

Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации

Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»
(МФТИ, Физтех)

Юридический адрес: 117303, г. Москва,
ул. Керченская, дом 1А, корпус 1
Почтовый адрес: 141700, Московская обл.,
г. Долгопрудный, Институтский переулок, дом 9
Тел.: +7 (495) 408-42-54, факс: +7 (495) 408-68-69
info@mipt.ru

21.03.2023, № 26-05/2171

на №

от

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной работе

Баган Виталий
Анатольевич

2023



ОТЗЫВ

ведущей организации на диссертацию **Гусева Андрея Олеговича**
на тему «Разработка и исследование численных методов решения задачи о
фазовом переходе в многокомпонентном растворе» на соискание
ученой степени кандидата физико-математических наук
по специальности 1.1.6. Вычислительная математика

Актуальность избранной темы. Связь работы с планами соответствующих отраслей науки и народного хозяйства. В настоящее время многопараметрическое численное моделирование стало одним из важных этапов оптимизации и разработки новых технологий во многих отраслях промышленности. Наибольший интерес представляет численное изучение технологических режимов, экспериментальное исследование которых не позволяет получить детальную информацию о его ходе процесса и при этом является крайне длительным и дорогостоящим. Выращивание полупроводниковых монокристаллов из жидкой фазы является одним из таких процессов: кристаллизация многокомпонентных соединений осуществляется при высокой температуре, в непрозрачной установке и может занимать несколько дней, а иногда и недель. При этом свойства выращенного материалов определяются комплексом физико-химических процессов, протекающих в системе в ходе кристаллизации: тепло- и массопереносом в жидкой фазе и кристалле, теплообменом между элементами установки, скоростью движения фронта кристаллизации, поверхностными процессами, протекающими на границе раздела фаз, и т.д. Основу современных математических моделей процесса кристаллизации многокомпонентного соединения составляют уравнения Навье — Стокса, уравнения тепломассопереноса в твердой и жидкой фазах и условия термодинамического равновесия на межфазной границе. Задачи данного класса имеют ряд особенностей — изменение геометрии расчетной области, наличие процессов, с существенно различающимися характерными

временами, высокая длительности технологических режимов. Несмотря на существующий обширный опыт численного исследования фазовых переходов в многокомпонентных средах, сохраняется потребность в надежных и эффективных численных методах решения задач данного класса. В ходе развития полупроводниковых технологий появляются новые, требующие тщательной отработки, режимы выращивания монокристаллов. Для того чтобы адекватно описывать современные технологические режимы математически, классические модели кристаллизации необходимо расширять для учета новых физических эффектов. Поэтому современные методы численного решения задач кристаллизации необходимо строить таким образом, чтобы внесение изменений в математическую модель процесса не влияло существенным образом на надежность и эффективность алгоритма. При этом, особый интерес представляют методы, позволяющие получать детальную информацию о ходе процесса кристаллизации существенно быстрее, чем в случае проведения натуральных экспериментов. Разработке и исследованию таких методов посвящена диссертация Гусева А.О.

Общая характеристика диссертационной работы. Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения и библиографии. Общий объем диссертации 160 страниц, включая 42 рисунка. Библиография включает 120 наименований.

Во *введении* содержится обзор литературы, посвященной численным методам решения задачи о фазовом переходе; обоснована актуальность работы, сформулированы цели и задачи исследования, кратко изложено содержание диссертационной работы.

Первая глава посвящена построению и исследованию консервативной разностной схемы для задачи о фазовом переходе в двухкомпонентном растворе в цилиндрической системе координат в осесимметричном приближении. Математическая модель процесса учитывает движение межфазной границы, процессы тепло- и массопереноса в кристалле и растворе, условия фазового равновесия и балансные соотношения для внутренней энергии и массы на фронте кристаллизации. Для решения задачи применяется метод выпрямления фронта. разностная схема построена в расчетной системе координат на прямоугольной сетке с помощью интегро-интерполяционного метода. Доказано, что предложенный вычислительный алгоритм гарантирует выполнение разностных аналогов законов сохранения характерных для рассматриваемого физического процесса.

Во *второй главе* изучено влияние способа аппроксимации нелинейных условий на межфазной границе на сходимость итерационного процесса решения соответствующей системы разностных уравнений. Получены условия сходимости для методов, основанных на последовательном определении полей температуры и концентрации. Доказано, что область применимости соответствующих методов определяется физическими свойствами рассматриваемых веществ, а также параметрами технологического режима. Проведен анализ сходимости алгоритма, в котором соответствующая система

нелинейных уравнений решается совместно с помощью метода Ньютона относительно вектора неизвестных, компонентами которого являются концентрация в твердой и жидкой фазах, температура во всей расчетной области и скорость движения фронта. Возможности предложенного вычислительного алгоритма продемонстрированы на примере модельной задачи о кристаллизации двухкомпонентного раствора в цилиндрической ампуле. Достоверность полученных результатов подтверждена расчетами, проведенными на последовательности сгущающихся пространственных сеток.

В *третьей главе* для двухфазной задачи Стефана на подвижной сетке, согласованной с формой границы раздела фаз, построена разностная схема алгебраически эквивалентная схеме, построенной методом выпрямления фронта. Доказано, что, аналогично дифференциальному случаю, схемы переходят друг в друга с помощью замены переменных.

В *четвертой главе* продемонстрирована эффективность применения методов, построенных на основе изложенных в работе принципов, для численного моделирования промышленных способов получения полупроводниковых материалов из жидкой фазы. Проведено численное исследование основных этапов выращивания двухкомпонентного соединения методом Бриджмена: растворение загрузки, смена растворения ростом, кристаллизация полупроводникового материала.

Научная новизна. Результаты диссертации, выносимые на защиту, являются новыми. Разработаны методы численного исследования двумерной модели процесса кристаллизации бинарного соединения, учитывающей тепломассоперенос в твердой и жидкой фазах, движение фронта кристаллизации и зависимость температуры фазового перехода от состава фаз. С помощью методов, основанных на явном выделении границы фазового перехода, построены разностные схемы, обеспечивающие выполнение дискретных аналогов законов сохранения массы, внутренней и кинетической энергии. Выделен класс схем, для которых метод выпрямления фронта и метод, основанный на использовании подвижных сеток, согласованных с формой фронта кристаллизации, алгебраически эквивалентны. Проведен анализ устойчивости различных методов численной реализации нелинейных условий на границе раздела фаз. Получены и доказаны условия сходимости итерационных методов, основанных на последовательном и совместном определении полей температуры и концентрации. Показано, что совместный алгоритм решения задачи обладает значительным запасом устойчивости и позволяет численно исследовать фазовые переходы в широком диапазоне физических параметров. На основе изложенных в работе алгоритмов автором разработан параллельный программный комплекс, позволяющий проводить полномасштабное математическое моделирование реальных режимов выращивания, за время существенно меньшее длительности физического процесса. Так для процесса направленной кристаллизации, длительность которого составляет 140 часов, результаты расчетов были получены на персональном компьютере за 3.5 часа.

Теоретическая и практическая значимость полученных автором диссертации результатов. Рассмотренная диссертация вносит существенный вклад в исследование и разработку методов численного решения задач кристаллизации. Построен вычислительный алгоритм, позволяющий проводить исследования промышленных режимов выращивания монокристаллов. Результаты расчетов, полученные в работе, согласуются с имеющимися теоретическими и экспериментальными данными, и отражают качественные особенности рассмотренных методов выращивания полупроводниковых материалов из жидкой фазы. Надежность и эффективность предложенного вычислительного алгоритма позволяют рекомендовать его в качестве инструмента для проведения многопараметрического моделирования. Результаты численных экспериментов могут быть использованы профильными организациями (АО Гиредмет, ИК РАН, ИНХ СО РАН и др.) при разработке новых и оптимизации существующих технологических режимов.

Обоснованность научных положений, выводов и заключений диссертации подтверждается доказанными теоремами и подкрепляется результатами расчетов.

Достоверность. Основные результаты работы докладывались на восьми всероссийских и международных конференциях. По теме диссертации опубликованы 12 работ. Из них 10 опубликованы в журналах из перечня рецензируемых научных изданий, рекомендованных ВАК, 6 – в журналах, индексируемых в базах данных Scopus и Web of Science.

Автореферат правильно и полно отражает содержание диссертации.

Оценка содержания диссертации. Диссертационная работа Гусева Андрея Олеговича выполнена на высоком научном уровне и содержит решение сложной и актуальной задачи, связанной с разработкой методов численного изучения процессов тепломассопереноса в среде с фазовым переходом.

В ходе ознакомления с текстом диссертации возникли следующие **вопросы и замечания:**

1. Преимущества построенного алгоритма демонстрируются автором на примере численного моделирования процесса направленной кристаллизации двухкомпонентного раствора. Анализ результатов расчетов для режимов выращивания соединений с большим числом компонентов позволил бы более полно представить результаты работы.
2. В третьей главе для двухфазной задачи Стефана построена и исследована консервативная разностная схема на подвижной сетке. Результаты расчетов, полученные с помощью данной схемы, в диссертационной работе не представлены.
3. При выращивании кристаллов из высокотемпературных расплавов из-за неоднородности распределения температуры в материале возникают термические напряжения, являющиеся основной причиной образования

дислокаций. Плотность дислокаций является одной из главных характеристик качества кристалла. В четвертой главе с помощью численного моделирования определен технологический режим, обеспечивающий рост кристалла с выпуклой межфазной границей и заданным распределением состава. Для того чтобы подтвердить практическую применимость предложенного внешнего температурного режима целесообразно оценить плотность распределения дислокаций в полученном монокристалле.

4. Формулировка «закон сохранения теплоты», которая несколько раз встречается в тексте диссертации, не является удачной.

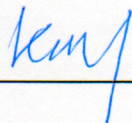
Указанные недостатки не снижают общей положительной оценки диссертационной работы А.О.Гусева и носят характер пожеланий на будущее.

Заключение о соответствии диссертации критериям, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней. Диссертация Гусева Андрея Олеговича является законченным, научным исследованием, содержание и результаты работы соответствует паспорту научной специальности 1.1.6. Вычислительная математика и требованиям п. 9 Постановления Правительства РФ от 24.09.2013 №842 «О порядке присуждения ученых степеней», а ее автор, А.О. Гусев, заслуживает присуждения ученой степени кандидата наук физико-математических наук по специальности 1.1.6. Вычислительная математика.

Отзыв обсужден на расширенном заседании кафедры моделирования и технологий разработки нефтяных месторождений МФТИ 27 февраля 2023 года протокол № 8.

Отзыв подготовил,

доктор физ.-мат. наук



Колдоба Александр Васильевич

Почтовый адрес: 141700, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский пер., 9

Телефон: 8 (495) 408-45-54

Адрес электронной почты: koldoba@rambler.ru

Организация – место работы: федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)», кафедрой моделирования и технологий разработки нефтяных месторождений МФТИ

Должность: заведующий кафедрой

Web-сайт организации: <https://mipt.ru>