

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И МАТЕРИАЛОВ

SIMULATION OF PROCESSES AND MATERIALS

Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2016. Т. 19, № 3. С. 179–188.
ISSN 1609-3577. DOI: 10.17073/1609-3577-2016-3-179-188

УДК 621.315.592:004.94

ЭВОЛЮЦИЯ СИСТЕМЫ МОДЕЛЕЙ И АЛГОРИТМОВ ДЛЯ РАСЧЕТОВ ПАРАМЕТРОВ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ПОЛУЧЕНИЯ МАТЕРИАЛОВ МИКРО– И НАНОЭЛЕКТРОНИКИ

© 2016 г. В. В. Крапухин¹, В. Г. Косушкин²,
Л. В. Кожитов¹, В. Г. Костишин¹, Д. Г. Муратов¹,
А. В. Попкова³

¹Национальный исследовательский
технологический университет «МИСиС»,
Ленинский просп., д. 4, Москва, 119049, Россия

²Московский государственный
технический университет им. Н. Э. Баумана,
2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1, Москва, 105005, Россия

³Тверской государственный университет,
ул. Желябова, д. 33, Тверь, 170100, Россия

Рассмотрены результаты создания системы моделей и алгоритмов расчетов параметров технологических процессов получения материалов микро– и нанoeлектроники и проектирования оборудования. Акцентируется внимание на том, что отличительной чертой методики преподавания специальных технологических курсов материалов электронной техники является построение курсов по аналогии с технологическими процессами получения материалов для электроники: от объемного монокристалла до приборных структур, размеры которых в настоящее время не превышают нескольких десятков нанометров. Научный модельный подход к решению технологических задач формировался при изучении процессов тепло– и массообмена, которые в совокупности с процессами взаимодействия в жидкостях и газе, с учетом гетерогенных реакций, являются теоретической основой технологии материалов электронной техники. Проведено сравнение возможностей физического и математического моделирования. Рассмотрены подходы к созданию тематических моделей процессов роста монокристаллов полупроводников, эпитаксиальных слоев и гетероструктур и определены возможности их практического использования. Показано, что идеи, заложенные В. В. Крапухиным на начальных этапах подготовки специалистов в области технологии материалов электронной техники и развиваемые его учениками, определили возможности подготовки нескольких поколений квалифицированных специалистов.

Ключевые слова: тепломассообмен, модели и алгоритмы процессов получения материалов микро– и нанoeлектроники, выращивание монокристаллов, эпитаксия, расчет параметров процессов

Введение

Одной из задач технологии как науки является выявление сущности и закономерностей явлений различной природы с целью совершенствования существующих и разработки новых, более эффективных процессов. В теоретической части современных курсов технологии материалов микро– и нанoeлектроники взамен описательно–рецептурного материала изложены основы классической и прикладной термодинамики, гидродинамики, химической кинетики, направленные на

формирование основных понятий на примерах изучения процессов роста пленок и монокристаллов.

Инициатива использования теории тепло– и массообмена в технологических курсах получения материалов твердотельной электроники и практических расчетов параметров технологических процессов на кафедре «Технология материалов твердотельной электроники» в Московском институте стали и сплавов на факультете полупроводниковых материалов и приборов принадлежала сотрудникам кафедры, созданной в 1962 г. профессором

Крапухин Всеволод Валерьевич¹ — профессор; Косушкин Виктор Григорьевич² — доктор техн. наук, профессор, e-mail: vic_kos@mail.ru; Кожитов Лев Васильевич¹ — доктор техн. наук, профессор, kozitov@misis.ru, Костишин Владимир Григорьевич¹ — доктор физ.–мат. наук, профессор, зав. кафедрой «Технология материалов электроники», e-mail: drvkgkostishyn@mail.ru; Муратов Дмитрий Геннадиевич¹ — кандидат техн. наук, старший научный сотрудник; Попкова Алена Васильевна³ — старший научный сотрудник.

В. В. Крапухиным. Материалы учебных курсов кафедры легли в основу формирования научных школ Московского государственного института стали и сплавов (МИСиС, в настоящее время НИТУ «МИСиС»), ученые которого стояли у истоков формирования отечественной полупроводниковой электроники. Отличительной чертой методики преподавания было построение курсов по аналогии с технологическими процессами получения материалов для электроники: от объемного монокристалла до приборных структур, размеры которых в настоящее время не превышают нескольких десятков нанометров. Научный модельный подход к решению технологических задач формировался при изучении процессов теплообмена, которые в совокупности с процессами взаимодействия в жидкостях и газе, с учетом гетерогенных реакций, являются теоретической основой технологии материалов электронной техники. Без знания этих разделов науки невозможно создание математических моделей технологических процессов, пригодных для компьютерного конструирования оборудования и выбора оптимальных технологических режимов.

В настоящее время на кафедре «Технология материалов электроники» НИТУ «МИСиС» и кафедре «Материаловедение» МГТУ им. Н. Э. Баумана проводится работа по созданию системы моделей и алгоритмов расчета параметров технологических процессов получения материалов микро- и наноэлектроники, направленная на развитие методов и формирование у студентов компетенций, в основе которых лежат знания и умения, основанные на методах моделирования технологических процессов. В этой работе авторы широко используют труды профессора, доктора технических наук Всеволода Валерьевича Крапухина и его учеников [1–14]. Принципы выбора моделей, а также методики расчетов технологических параметров определены в серии учебников и учебных пособий [11–15], апробированных в учебном процессе подготовки бакалавров, магистров и специалистов по направлениям «Наноинженерия», «Металлургия», «Приборостроение», «Электроника и наноэлектроника», «Системный анализ и управление», «Химическая технология».

Цель работы — систематизация и обобщение опыта формирования модельных представлений описания технологических процессов у студентов и аспирантов, изучающих технологию материалов электронной техники с использованием возможностей компьютерных расчетов в рамках выбранных моделей.

Математическое моделирование в технологии материалов электронной техники

Моделирование — это универсальный научный метод, заключающийся в замене реального объекта или процесса (оригинала) моделью (объектом

или процессом, подобным оригиналу) и изучении ее свойств. Обычно выделяют физическое и математическое моделирование [16–20].

Экспериментальное изучение реальной физической модели называют «физическое моделирование». Физическая модель, как правило, геометрически подобна оригиналу, но может отличаться от него физическими характеристиками материала: энергией, давлением, значениями физических полей и т. п. В основе физического моделирования лежит теория подобия и анализ размерностей. Они устанавливают критерии подобия в виде некоторой комбинации параметров реальной среды и модели. При равенстве критериев подобия можно по результатам, полученным на модели, рассчитать параметры, характеризующие реальный процесс. Физическое моделирование широко применяют в гидро- и аэромеханике, тепло- и электротехнике, химии, технологии получения материалов, электронике и др. Физическое моделирование заменяет натуральный эксперимент, который часто вообще невозможен или нецелесообразен по экономическим соображениям. Обычно этот метод моделирования требует использования дорогостоящей аппаратуры и, что даже более важно, больших временных затрат. Последнее в современном, быстро меняющемся мире является важнейшим фактором конкурентоспособности разработок. Поэтому в последние десятилетия для выбора и оптимизации параметров технологических процессов широко используют математическое моделирование.

Математическое моделирование технологических процессов позволяет использовать вычислительный эксперимент и таким путем быстрее и с меньшими затратами решать задачу выбора оптимальных условий получения материалов твердотельной электроники.

В курсах лекций по технологии материалов и основам моделирования, подготовленных проф. В. В. Крапухиным, были максимально использованы известные физические и физико-химические свойства материалов и сред, т. е. рассматривались детерминированные модели, позволяющие получать информацию о процессе от «*a priori*» до создания установки и проведения реальных экспериментов. Стандартным стало рассмотрение технологического процесса, начиная с термодинамических и кинетических закономерностей, уравнений материального баланса и процессов теплопереноса. Эти подходы получили признание и развитие в работах зарубежных авторов [21–23].

Специальный курс по технологии эпитаксиальных гетерокомпозиций, разработанный проф. В. В. Крапухиным, содержал математические модели парофазного химического осаждения кремния и соединений $A^{III}B^V$, жидкофазной эпитаксии соединений $A^{III}B^V$ и их твердых растворов.

Для оценки адекватности выбранных моделей было разработано необходимое программное обеспе-

чение. Пакеты прикладных программ использовали при проведении вычислительных экспериментов. В качестве информационного обеспечения вычислительных экспериментов была разработана электронная база данных, включающая, наряду с термодинамическими, также и кинетические характеристики веществ. В дальнейшем программное обеспечение было адаптировано для использования совместно со стандартными математическими пакетами MathCad и MatLab [3].

Рассмотрение трех блоков модели — термодинамического, кинетического и материального баланса — позволяет проследить взаимосвязь между параметрами процесса и выходными данными в условиях достижения равновесия в системе и получить предельные значения выходных параметров в зависимости от их исходных значений (квазиравновесная кинетика).

Большинство технологических процессов получения материалов электронной техники с заданными свойствами являются гетерогенными и характеризуются микрокинетикой (атомно-молекулярными процессами на поверхности раздела фаз) и макрокинетикой (доставкой исходных компонентов к поверхности реакции). Макро- и микрокинетика являются двумя равноправными и взаимозависящими процессами, базирующимися на различных концепциях сплошной среды.

Микрокинетика учитывает дискретную структуру материи и элементарные акты взаимодействия частиц. На молекулярном уровне существенный вклад в кинетику вносят процессы адсорбции, поверхностной диффузии, реакции между адсорбированными частицами. Микроскопическое описание процесса роста может давать более точную картину явлений. Макрокинетика абстрагируется от дискретной сущности вещества. Для описания процессов с позиции макрокинетических представлений в настоящее время наиболее часто используют уравнения конвективной диффузии.

Процессы тепло- и массообмена оказывают существенное влияние на эффективность переноса в подвижных средах. Например, при индукционном нагреве градиент температуры в объеме реактора приводит к необходимости учета процессов термодиффузии. Концепция макроскопической сплошной среды, в которой отказываются от излишней детализации явлений, открывает более реальный путь для практических вычислений. Эта концепция позволяет сократить число требуемых для численного расчета феноменологических констант, давая в то же время ответы на важнейшие для технолога вопросы. Например, при выборе технологических условий процесса выращивания монокристаллов используют систему уравнений, базирующуюся на системе законов сохранения массы, количества движения и энергии [3, 5, 14].

1. Закон сохранения массы имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_i = -\nabla(\rho_i \mathbf{V} + \mathbf{j}_i), \quad (1)$$

где ρ_i — массовая плотность i -го компонента; \mathbf{j}_i — плотность диффузионного потока i -го компонента относительно неподвижной системы координат; \mathbf{V} — средняя скорость. Таким образом, изменение плотности массы определяется конвективным и диффузионным потоками компонентов.

Так как дивергенция в правой части уравнения является мерой общего притока в единичный объем или оттока из него, то она равна приращению плотности массы.

2. Закон сохранения количества движения.

Чаще всего этот закон для описания процессов переноса при росте кристаллов используют в виде уравнений Навье—Стокса:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \mathbf{V} = -[\nabla(\rho V \nu \pi)] + \sum \rho_i \mathbf{g}_i, \quad (2)$$

т. е. приращение количества движения определяется суммой сил конвекции, тензором давления π и суммой внешних сил. Исследование влияния этих сил на рост кристаллов, управление процессами с помощью этих сил, поиск способов управления этими силами является одной из главных задач управления процессом.

Уравнение показывает, что количество движения единичного объема жидкой фазы (левая часть уравнения) изменяется вследствие конвективного потока, ускорений, вызванных внутренним давлением или силами трения, и внешних сил, действующих на массу или объем расплава.

3. Закон сохранения энергии имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho \left(U + \frac{1}{2} v^2 \right) = \\ = -\nabla \left[\rho \left(U + \frac{1}{2} v^2 \right) + \mathbf{V} + \mathbf{q} + (\pi \cdot \mathbf{V}) \right] + \sum (\mathbf{B}_i \cdot \mathbf{g}_i), \quad (3) \end{aligned}$$

где U — внутренняя энергия на единицу массы; \mathbf{q} — поток тепла, переносимый путем теплопроводности; \mathbf{B}_i — поток массы i -го компонента относительно неподвижной системы координат.

В упрощенной форме эту систему уравнений используют и для моделирования процессов эпитаксиального наращивания.

Классификация моделей

Движущей силой технологических процессов, рассматриваемых в учебных курсах технологических дисциплин, является отклонение системы от равновесия.

Предлагаемая студентам классификация теоретических макроскопических моделей проведена с позиций физико-химической сущности уравнения

массообмена и вида граничных условий к нему. Рассмотрим эту классификацию процессов.

1. **Квазиравновесные модели**, в которых используют только методы термодинамики и на основе которых можно сделать вывод о необходимых условиях проведения процесса (температуре, давлении, исходных концентрациях, максимальной производительности процесса, термодинамическом выходе). Квазиравновесные модели нашли широкое применение для исследования проточных систем газофазной эпитаксии как наиболее простые, но дающие ответ о термодинамическом выходе процесса, максимально возможной скорости осаждения, границах области существования требуемого продукта, примерном составе слоя по макрокомпонентам и легирующим примесям. Однако эти модели часто недостаточны для описания реальных процессов, так как не учитывают влияния массообмена. Скорость роста оценивается только качественно, не говоря уже о невозможности оценки локального распределения компонентов получаемого слоя и его морфологии вдоль поверхности осаждения.

2. **Диффузионные модели** учитывают массообмен в химическом реакторе, но на поверхности осаждения состав среды принимается равновесным. Эти модели позволяют оценить максимально возможную скорость осаждения. Обычно при моделировании дополнительно учитывают обмен теплом и массой между зонами источника и подложки, неизотермическую многокомпонентную диффузию, теплопередачу и перенос импульса количества движения в химически реагирующей среде. Введение конвективной составляющей позволяет учесть поток Стефана, возникающий за счет изменения числа молей газообразных веществ во время химических реакций и движения границы раздела фаз.

Внутреннее противоречие диффузионных моделей заключается в том, что за скорость роста кристалла принимается скорость доставки реагирующих веществ, рассчитанная из равновесного состава среды, а кристалл растет именно за счет отклонения химической системы от равновесия, т. е. здесь заложена заведомая ошибка в граничных условиях. Несмотря на это, диффузионные модели важны на практике, так как именно при ограничении процесса роста диффузией можно ожидать получения материалов с наиболее совершенной кристаллической структурой. Этот подход позволяет определить скорость роста с точностью до порядка. Однако локальное распределение скорости роста вдоль поверхности осаждения будет рассчитано в диффузионных моделях заведомо неточно. Эти модели не позволяют описать процессы селективной эпитаксии, получение ориентированных покрытий. По физическому смыслу диффузионная модель соответствует случаю бесконечной скорости химических реакций на поверхности. Если скорости осаждения (подвода массы) и химических процессов сравнимы

между собой, т. е. процесс ощутимо неравновесен, то граничные условия обязаны содержать функциональную связь между массовыми потоками и парциальными давлениями компонентов.

3. **Неравновесные модели** учитывают конечную скорость химической реакции. Эти модели позволяют оценить не только значение скорости роста слоев, но и рассчитать изменение скорости роста вдоль поверхности осаждения. В таких моделях конкретный путь перехода из начального состояния в конечное еще более детализируется. В рассмотрение включается собственно процесс роста кристалла с учетом отклонения химической системы от равновесия.

Классическим подходом можно считать тот, в котором рассматривается истинная химическая кинетика гетерогенных реакций. Граничные условия для уравнений, описывающих процесс массообмена в стационарном состоянии для гетерогенных реакций, обычно имеют вид степенных полиномов.

С математической точки зрения такой подход оказался удобным только для простейшего случая единственной гетерогенной реакции первого порядка. В общем случае множественных реакций произвольного порядка при попытках провести анализ относительного вклада стадии массообмена и химико-кинетических явлений в описание процесса осаждения вещества возникают принципиальные трудности. Во-первых, требуется знать слишком много феноменологических величин: истинный путь химической реакции (реакций), лимитирующую стадию, константы скоростей реакций, частные порядки реакций по всем реагентам. Все эти величины с трудом и с ограниченной точностью поддаются экспериментальному определению. Во-вторых, в каждом конкретном случае требуется находить уникальный алгоритм численного решения математической задачи, что усложняет вычислительный эксперимент.

Недетализированное до микропроцессов рассмотрение явлений переноса на основе континуального подхода оказывается плодотворным при изучении диффузии, теплопроводности, перекрестных явлений тепло- и массообмена, внутреннего трения. Для химических реакций методы неравновесной термодинамики получили меньшее распространение. Связано это прежде всего с тем, что в обычной химической технологии (немикрометаллургии особо чистых и полупроводниковых веществ) процессы стремятся проводить в экстремальных условиях, в которых достигается максимальная производительность. Увеличение производительности осуществляется за счет сильного отклонения химической системы от равновесия, где линейное соотношение перестает быть справедливым.

Для процессов, в которых на первый план выходит совершенство кристаллической структуры или прецизионность свойств, линейная связь между термодинамическими потоками и силами выполняется, в подавляющем большинстве случаев за счет

малых скоростей процессов. Например, типичная скорость роста эпитаксиальных слоев кремния составляет примерно 10—40 мкм/ч и достигается при перепаде температур 20—30 К при средней температуре ~1000 К.

Термодинамический блок включает модели, позволяющие выполнить расчет равновесного состава фаз, уровня легирования и скорости роста в квазиравновесном режиме. Расчет равновесного состава фаз в многокомпонентной системе проводят путем поиска минимума энергии Гиббса системы или решения системы уравнений, включающей закон действующих масс. В обоих случаях системы уравнений дополняются уравнениями материального баланса по атомам химических элементов, содержащихся в исходных веществах и продуктах.

При изучении процессов получения гетерокомпозиций изложенные выше подходы обычно дополняют учетом вклада упругих напряжений в энергию Гиббса на границе «подложка — эпитаксиальный слой».

Современная постановка решения гидродинамической задачи может быть изложена кратко следующим образом.

Уравнения сохранения записывают в безразмерных переменных, используя для этого характеристические значения зависимых и независимых пере-

менных. Типичные характеристические значения основных переменных для газофазных реакторов в качестве примера представлены в табл. 1.

Критерии теории подобия в выбранных безразмерных величинах представлены в табл. 2.

С использованием этих величин можно записать следующие уравнения [5, 14, 16]:

– уравнения сохранения массы

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{V}) = 0; \quad (4)$$

– уравнение сохранения момента

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \mathbf{V} \nabla \mathbf{V} \right] = \text{Fr}^{-1} \rho \mathbf{e}_g - \frac{\text{Ma}^{-2}}{\gamma} \Delta P + \text{Re}^{-1} \nabla \tau, \quad (5)$$

где $\tau = \mu \left[\nabla \mathbf{V} + (\nabla \mathbf{V})^2 \right] - \frac{2}{3} [\mu \nabla \mathbf{V}] I;$

– уравнение сохранения энергии

$$\begin{aligned} \rho C_p \left[\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{V} \nabla T \right] = \\ = \frac{\gamma - 1}{\gamma} \left[\frac{\partial P}{\partial t} + \mathbf{V} \nabla P \right] + \text{Pe}_h^{-1} \nabla [K \nabla T] + Q_S H_V - \\ - \text{Pe}_m^{-1} \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^{N_j} \text{Da}_{jk} \Delta H_{jk} R_{jk} - \text{Pe}_m^{-1} \sum_{k=1}^N C_{pk} \mathbf{J}_k \nabla T. \end{aligned} \quad (6)$$

Таблица 1

Характеристические значения основных величин, используемых при моделировании газофазных эпитаксиальных реакторов

[Typical main parameters used in modeling of gas phase epitaxy processes]

Переменные	Обозначение	Характеристическая переменная	Типичные значения характеристических переменных
Длина	N, Z	L_0	1—10 см
Скорость	v_r, v_z, v_0	V_0	10 см/с
Время	t	L_0/V_0	0,1—1 с
Температура	T	T_0	300 К
Давление	P	P_0	0,1—1 атм
Молекулярная масса	M, M_k	M_0	4 г/моль
Плотность	ρ	$\rho_0 = P_0 M_0 / RT_0$	$1,6 \cdot 10^{-4}$ г/см ³
Теплопроводность	K	$K_0 = K(T_0)$	$3,6 \cdot 10^{-4}$ кал/(см · с · К)
Теплоемкость	C_p, C_{pk}	$C_{p0} = C_p(T_0)$	5 кал/(моль · К)
Вязкость	μ	$\mu_0 = \mu(T_0)$	$2,0 \cdot 10^{-4}$ г/(см · с)
Молекулярный коэффициент диффузии	D_k	$D_0 = D_k(T_0, P_0)$	1 см ² /с
Термический коэффициент диффузии	D_k^T	$D_0^T = D_k^T(T_0, P_0)$	1 см ² /с

В уравнении (6) первые два члена описывают изменения энергии, связанные с работой расширения (сжатия), а два последних представляют теплоту, полученную за счет гомогенных химических реакций, и теплоту, связанную с диффузией частиц. Обратим особое внимание на член $Q_S H_V$, описывающий энергетическое воздействие на газовую фазу внешнего источника (СВЧ-поля, лазерного излучения). Величину Q_S можно рассчитать с помощью уравнения

$$Q_S = \frac{Q_0 L_0}{\rho_0 C_p U_0 T_0},$$

где Q_0 — характеристическая мощность источника энергии (Дж/(см³ · с)).

Уравнения (4) — (6) дополняют также уравнением сохранения индивидуальных частиц, выражаемых через их массовую долю I_k :

$$\text{Pe}_m \left[\rho \frac{\partial I_k}{\partial t} + \rho \mathbf{V} \nabla I_k \right] = \sum_{j=1}^{N_G} \text{Da}_{jk} M_k R_{jk} - \mathbf{V} \mathbf{J}_k, \quad (7)$$

где R_{jk} — скорость образования частицы k в j -й реакции;

$$\mathbf{J}_k = -[\rho D_k \nabla I_k + D_k \nabla \ln(T)] \quad (8)$$

представляет собой массовый диффузионный поток частиц K , определяемый градиентом концентраций и градиентом температуры.

Критерии подобия, используемые в моделях газофазных реакторов
 [Identity criteria used in gas phase reactor models]

Обозначение	Определение	Описание	Типичные значения
Fr	U	Число Froude (инерциальные силы / гравитационные силы)	0,01
Γ	Cp_0/Cv_0	Адиабатическая (отношение теплоемкостей при постоянном давлении и постоянном объеме)	1,67
Ma	V_0/C_0	Число Маха (отношение скорости газа к скорости звука)	10^{-4}
Re	$\rho_0 V_0 l_0 / \mu_0$	Число Рейнольдса (инерциальные силы / силы вязкости)	10—100
Pe _m	$V_0 l_0 / D_0$	Число Пекле для переноса массы (конвективный поток / диффузионный поток)	10—100
Pe _h	$V_0 l_0 \rho_0 Cp_0 / K_0$	Число Пекле для переноса теплоты (конвективный поток / поток теплопроводности)	10—100
Da _{j,h}	$A_{ik} l_0^2 / D_0$	Число Дамкхлера (скорость реакции / скорость диффузии)	$8,5 \cdot 10^{-10}$
Bi	$h l_0 / D_0$	Число Байота (коэффициент теплопередачи / теплопроводность)	1—10

В случае учета поверхностных реакций с общей формой уравнения [3]

$$\sum_{i=1}^{N_G} a'_{ij} A_i + \sum_{j=1}^{N_s} b_{ij} B_i(s) = \sum_{i=1}^{N_G} a''_{ij} A_i + \sum_{i=1}^{N_s} b_{ij} B_i(s), \quad (9)$$

где a_{ij} , b_{ij} — стехиометрические коэффициенты газовых и адсорбированных частиц; N_G и N_s — общее число газовых и адсорбированных частиц. Скорость реакции может быть записана в виде

$$R_j = k_{fj} \prod_{i=1}^{N_G} [A_i]_W^{a'_{ij}} \prod_{i=1}^{N_s} [B_i(s)]^{b_{ij}} - k_{rj} \prod_{i=1}^{N_G} [A_i]_W^{a''_{ij}} \prod_{i=1}^{N_s} [B_i(s)]^{b_{ij}}, \quad (10)$$

где k_{fj} , k_{rj} — константы скорости прямой и обратной реакций соответственно; $[A_i]$, $[B_i(s)]$ — концентрации газообразных и адсорбированных частиц.

Решение системы уравнений осуществляется с использованием различных вычислительных схем при предварительно выбранных граничных условиях. Точность расчетов существенно зависит от шага сетки, но уменьшение шага существенно увеличивает время счета. Поэтому в реальных расчетах выбирают компромиссные варианты.

В настоящее время этот подход позволяет проводить расчет одно-, двух- и трехмерных моделей различных эпитаксиальных реакторов. Разработаны пакеты прикладных программ, позволяющие моделировать процессы эпитаксиального роста наиболее важных полупроводниковых систем. На рис. 1 в качестве примера показан результат расчета скорости роста однокомпонентного автоэпитаксиального слоя с учетом скорости кристаллизации на подложке в условиях неравновесной кристаллизации [13].

В случае химически активных сред обычно не выполняется условие постоянства феноменологи-

ческих коэффициентов (связанных с химической кинетикой) во всех точках исследуемой термодинамической системы: перепады температуры обычно велики, и проявляется экспоненциальный характер зависимости скорости химических реакций от температуры. Поэтому для теоретического анализа процессов тепло- и массообмена остается единственным путь — прямое численное решение соответствующих систем уравнений физико-химической гидродинамики и исследование зависимостей, получаемых в ходе проведения вычислительных экспериментов.

Граничным условием на поверхности подложки служит сток или исток компонентов при образовании эпитаксиального слоя. При этом учитывается конечная скорость атомно-молекулярных процессов на подложке. При высоких температурах, когда лимитируется массоперенос компонентов в газовой фазе, расчет проводят по закону молекулярной диффу-

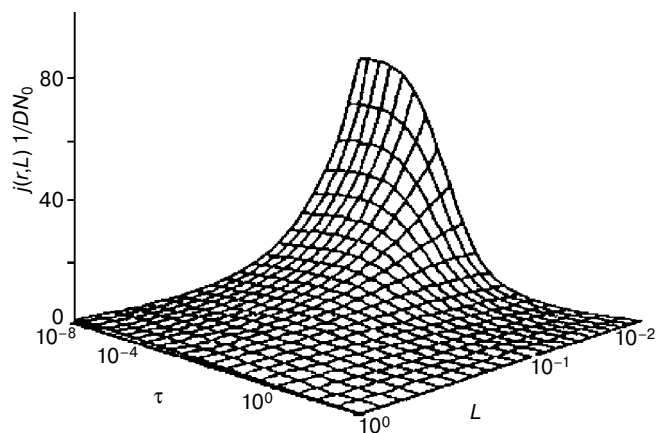


Рис. 1. Зависимость плотности потока $j(r,L)$ кристаллизующегося вещества в относительных единицах от безразмерных параметров τ , L [13]

Fig. 1. Flux density $j(r,L)$ of crystallizing material in rel. units vs dimensionless parameters τ and L [13]

зии в диффузионном пограничном слое. На внешней стенке реактора используется граничное условие «непроницаемой стенки».

С каждым шагом расчетной сетки вдоль пьедестала учитывается изменение концентраций компонентов по движению парогазовой смеси и изменение температуры при наличии градиента температуры вдоль оси реактора. Типичное учебное задание для моделирования процесса эпитаксиального наращивания включает:

- выбор температуры и состава исходной парогазовой смеси при заданной скорости роста эпитаксиального слоя. Температуру процесса и состав исходной смеси рекомендуется выбирать ближе к минимальной вблизи перехода диффузионного режима роста в кинетический;

- выбор градиента температуры вдоль реактора для получения слоев одинаковой толщины вдоль всего пьедестала. Учитывается тот факт, что скорость роста эпитаксиального слоя арсенида галлия в хлоридно-гидридном процессе вдоль оси пьедестала существенно снижается за счет быстрого истощения парогазовой смеси компонентами, образующими эпитаксиальный слой. Вместе с тем экзотермические процессы роста определяют существенное влияние температуры на скорость роста эпитаксиального слоя.

На рис. 2 приведены расчетные кривые распределения скорости роста эпитаксиального слоя GaAs по длине пьедестала при различных параметрах проведения процесса (b — зазор между подложкой и стенкой реактора).

Подобно процессу газофазной эпитаксии в учебном курсе рассматривается модель жидкофазной эпитаксии, включающая термодинамический расчет равновесия в многокомпонентной системе с учетом упругих напряжений при гетероэпитаксии. Диффузионная кинетика используется как для молекулярного переноса с учетом температурного поля, так и в условиях конвективной диффузии для различного типа устройств для выращивания эпитаксиальных слоев.

Учебные пособия, монографии и учебники

Для подготовки студентов к проведению компьютерного моделирования технологических процессов получения материалов микро- и нанoeлектроники авторами подготовлены и изданы учебные пособия, монографии и учебники [11—18]. Рассмотрим краткое содержание этих изданий. Учебное пособие «Модели и алгоритмы технологических процессов получения новых материалов» посвящено подробному описанию математического аппарата решения уравнений, используемых для моделирования конкретных технологических процессов, алгоритмов и примеров программных продуктов технологических процессов. Использование для этих целей со-

временных стандартных математических пакетов MathCad и MatLab позволяет не только развить навыки решения конкретных задач, но и закрепить навыки использования информационных технологий в обучении [12].

В пособии сформулированы общие подходы к модельным представлениям процессов на разнообразных примерах. В качестве примеров использованы представления из области процессов, которые относятся к современным высоким технологиям (например, современным процессам нанoeлектроники).

Учебное пособие «Расчеты параметров технологических процессов получения новых материалов» [13] предназначено для формирования знаний и умений в использовании аппарата математического моделирования в решении инженерных задач. Материал рассчитан на студентов старших курсов бакалавриата и может быть использован в магистерской подготовке по дисциплинам, связанным с формированием инженерного мышления и приобретением навыков решения технологических задач в области получения новых материалов. Материалы, рассмотренные в пособии, соответствуют требованиям стандартов ФГОС 3+ по соответствующим направлениям в части формирования общепрофессиональных и профессиональных компетенций.

Учебное пособие содержит программные продукты и необходимые сведения для решения конкретных задач по расчетам параметров процессов и оборудования для их проведения. Решение конкретных задач позволяет сформировать навыки, необходимые студентам в будущей профессиональной деятельности.

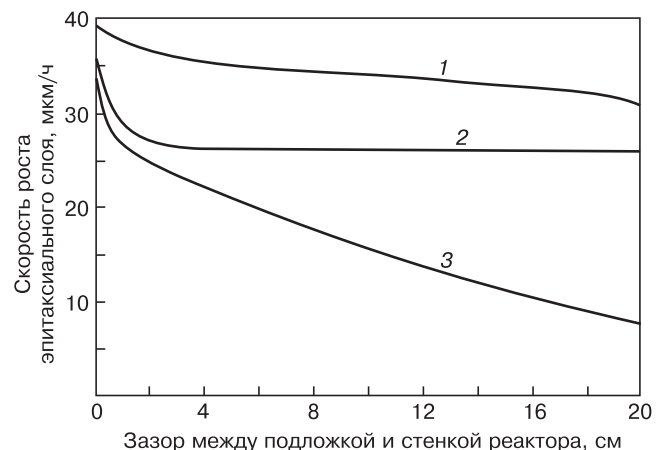


Рис. 2. Изменение скорости роста эпитаксиального слоя в зазоре между подложкой и стенкой реактора: 1 — $T = 1020$ К, $U = 4$ см/с, $b = 3$ см, $P_{\text{GaCl}} = 0,007$ атм., $P_{\text{HCl}} = 0,001$ атм., $P_{\text{As}} = 0,01$ атм.; 2 — $T_1 = 1057$ К, $T_2 = 1104$ К, $U = 4$ см/с, $b = 3$ см, $P_{\text{GaCl}} = 0,007$ атм., $P_{\text{HCl}} = 0,001$ атм., $P_{\text{As}} = 0,01$ атм.; 3 — $T = 1020$ К, $U = 2$ см/с, $b = 2$ см, $P_{\text{GaCl}} = 0,005$ атм., $P_{\text{HCl}} = 0,001$ атм., $P_{\text{As}} = 0,005$ атм.

Fig. 2. Epitaxial layer growth rate in the substrate/reactor wall gap: (1) $T = 1020$ K, $U = 4$ cm/s, $b = 3$ cm, $P_{\text{GaCl}} = 0.007$ atm., $P_{\text{HCl}} = 0.001$ atm., $P_{\text{As}} = 0.01$ atm.; (2) $T_1 = 1057$ K, $T_2 = 1104$ K, $U = 4$ cm/s, $b = 3$ cm, $P_{\text{GaCl}} = 0.007$ atm., $P_{\text{HCl}} = 0.001$ atm., $P_{\text{As}} = 0.01$ atm.; (3) $T = 1020$ K, $U = 2$ cm/s, $b = 2$ cm, $P_{\text{GaCl}} = 0.005$ atm., $P_{\text{HCl}} = 0.001$ atm., $P_{\text{As}} = 0.005$ atm.

В пособии приведены методики расчетов параметров технологических процессов получения материалов микро- и нанoeлектроники и оборудования для их проведения, а также необходимые информационные материалы для проведения семинарских и практических занятий, лабораторных работ и курсовых проектов по разработке оборудования.

Теория и методы математического моделирования технологических процессов являются «стержнем» всех разделов книги и позволяют решать технологические задачи с использованием алгоритмических подходов и современных информационных технологий. Такой подход позволяет учесть особенности изучаемого предмета — технологию производства конкретных материалов и приборов электронной техники.

При выборе инструментов моделирования авторы предлагают воспользоваться двумя взаимно дополняющими друг друга подходами. Первый путь — формально статистический привлекает кажущимися простотой и доступностью. Как правило, широко распространенные математические пакеты программ типа MathCAD или MatLab способны предложить пользователю, располагающему результатами экспериментальных исследований технологического объекта, математическую модель поведения объекта (процесса) в виде достаточно абстрактных математических конструкций (полиномов, сплайнов, рядов и т. п.).

Формально-статистические методы в определенной степени избавляют исследователя от выполнения процедуры генерации моделей, хотя всякого рода априорная информация в виде ранжирования факторов или каких-то математических соотношений, описывающих фрагменты технологического процесса, будет полезна при построении математических моделей этими методами. В силу указанного достоинства формально-статистические методы достаточно популярны среди технологов-исследователей, тем более имеется много литературы как по общим вопросам математической статистики, так и по прикладным проблемам применения изучаемых методов в отдельных отраслях знаний.

Второй путь получил название «причинно-физический подход». В нем подчеркивается первостепенная важность формулировки и синтеза (генерации) математических моделей. Сторонники этого подхода считают, что для решения задачи синтеза математической модели объекта целесообразно использовать интеллект исследователя и разнообразную (априорную) информацию об изучаемых процессах. Взаимосвязь формальных и неформальных методов в синтезе модели и ее расчете — главная проблема адекватного математического моделирования и дальнейшей оптимизации параметров сложных объектов.

В монографии [15] обобщены новые результаты исследований в области технологий роста кристал-

лов и эпитаксиальных процессов, используемых при производстве материалов электронной техники. Разделы книги объединяет проблема оптимизации технологических процессов получения монокристаллов и пленок, связанная не только с выбором технологических режимов, но и с конструированием специального технологического оборудования. Наряду с традиционными методами моделирования технологических процессов использованы методы нелинейной динамики и термодинамики необратимых процессов, позволяющие учитывать взаимное влияние соответствующих процессов переноса. Протекание многих процессов в движущихся средах определило необходимость рассмотрения основных законов гидро- и газодинамики и использование их при рассмотрении практических задач расчета режимов в условиях конвективной диффузии и термокинетики. Использование во многих случаях глубокого вакуума (процессы молекулярно-лучевой эпитаксии) обусловило необходимость рассмотрения явлений переноса в молекулярном режиме течения газов. Математическое описание процессов стало необходимым при проектировании оборудования, оптимизации и управлении технологическими процессами. Оно включает термодинамические и кинетические закономерности, а также уравнения материального баланса. В монографии рассмотрена эволюция математических моделей, используемых для описания процессов роста объемных монокристаллов и эпитаксиальных пленок во всех современных методах эпитаксиальной технологии.

Заключение

Идеи, заложенные В. В. Крапухиным на начальных этапах подготовки специалистов в области технологии материалов электронной техники и развиваемые его учениками, позволили подготовить несколько поколений квалифицированных специалистов, которые не только справляются с обязанностями технологов, но и успешно развивают направление в области нанотехнологий. Совершенствование методики позволяет поднять обучение на уровень современных требований к специалистам, обладающим не только узкопрофессиональными знаниями, умениями и навыками, но и способным работать в междисциплинарной среде, компилируя известные и генерируя новые знания и практические подходы к решению технологических задач.

Библиографический список

1. Крапухин, В. В. Технология материалов электронной техники / В. В. Крапухин, Г. Д. Кузнецов, И. А. Соколов. — М. : Металлургия, 1996. — 486 с.
2. Соколов, И. А. Расчеты процессов полупроводниковой технологии / И. А. Соколов. — М. : Металлургия, 1994. — 136 с.
3. Кожитов, Л. В. Технология материалов микро- и нанoeлектроники / Л. В. Кожитов, В. Г. Косушкин, В. В. Крапухин, Ю. Н. Пархоменко. — М. : МИСИС, 2007. — 526 с.
4. Кожитов, Л. В. Технология эпитаксиальных гетерокомпозиций: учебное пособие / Л. В. Кожитов, В. В. Крапухин, В. А. Улыбин. — М. : МИСИС, 2001. — 156 с.

5. Косушкин, В. Г. Управление ростом кристаллов низкоэнергетическими воздействиями / В. Г. Косушкин. – Калуга : Изд. научной литературы Н. Ф. Бочкаревой, 2004. – 272 с.
6. Кожитов, Л. В. Оборудование полупроводникового производства / Л. В. Кожитов, И. Г. Блинов. – М. : Машиностроение, 1986. – 264 с.
7. Скворцов, И. М. Технология и аппаратура газовой эпитаксии кремния и германия / И. М. Скворцов, И. И. Лапидус, Б. В. Орион, Л. В. Кожитов, В. К. Аникин. – М. : Энергия, 1978. – 136 с.
8. Черняев, В. Н. Технология эпитаксиальных слоев арсенида галлия и приборы на их основе: монография / В. Н. Черняев, Л. В. Кожитов. – М. : Энергия, 1974. – 256 с.
9. Кожитов, Л. В. Жидкофазная эпитаксия кремния / Л. В. Кожитов, В. В. Липатов, А. С. Тимошин, М. П. Волков. – М. : Металлургия, 1989. – 200 с.
10. Крапухин, В. В. Физико-химические основы технологии полупроводниковых материалов / В. В. Крапухин, И. А. Соколов, Г. Д. Кузнецов. – М. : Изд-во «МИСиС», 1995.
11. Кожитов, Л. В. Технологическое вакуумное оборудование / Л. В. Кожитов, Н. А. Чиченев, С. Г. Емельянов, В. Г. Косушкин. – Курск : ЮЗГУ, 2014. – 552 с.
12. Головатый, Ю. П. Модели и алгоритмы технологических процессов получения новых материалов: учеб. пособие / Ю. П. Головатый, В. Г. Косушкин, С. Г. Емельянов, Л. М. Червяков, В. Г. Костишин, Л. В. Кожитов, В. Г. Бебенин. – Курск : ЮЗГУ, 2014. – 282 с.
13. Косушкин, В. Г. Расчеты параметров технологических процессов получения новых материалов: учеб. пособие / В. Г. Косушкин, С. А. Адарчин, Л. В. Кожитов, С. Г. Емельянов, В. Г. Костишин, Д. Г. Муратов, Л. М. Червяков, В. Г. Бебенин. – Курск : ЮЗГУ, 2016. – 314 с.
14. Кожитов, Л. В. Технология материалов микро- и нанoeлектроники / Л. В. Кожитов, С. Г. Емельянов, В. Г. Косушкин, С. С. Стрельченко, Ю. Н. Пархоменко, В. В. Козлов, С. Л. Кожитов. – Курск : ЮЗГУ, 2012. – 862 с.
15. Карамурзов, Б. С. Модели, технологии и оборудование роста кристаллов и эпитаксиальных слоев: монография / Б. С. Карамурзов, Л. В. Кожитов, В. Г. Косушкин, С. С. Стрельченко, С. Л. Кожитов. – Нальчик : Кабардино-Балкарский ун-т, 2011. – 334 с.
16. Мазалов, А. В. Влияние условий роста на структурное совершенство слоев AlN, полученных методом МОС-гидридной эпитаксии / А. В. Мазалов, Д. Р. Сабитов, В. А. Курешов, А. А. Падалица, А. А. Мармалюк, Р. Х. Акчуринов // Известия вузов. Материалы электронной техники. – 2013. – № 1. – С. 45–48. DOI: 10.17073/1609-3577-2013-1-45-48
17. Простомолотов, А. И. Дистанционное и сопряженное моделирование тепломассопереноса и дефектообразование в технологических процессах / А. И. Простомолотов, Н. А. Везуб, Х. Х. Ильясов // Известия вузов. Материалы электронной техники. – 2015. – Т. 18, № 1. – С. 31–36. DOI: 10.17073/1609-3577-2015-1-31-36
18. Абгарян, К. К. Математическое моделирование процессов формирования кластеров точечных дефектов в кремнии на базе молекулярно-динамического подхода / К. К. Абгарян, О. В. Володина, С. И. Уваров // Известия вузов. Материалы электронной техники. – 2015. – Т. 18, № 1. – С. 37–42. DOI: 10.17073/1609-3577-2015-1-37-42
19. Филиппов, М. М. Применение математической модели для сопровождения процесса выращивания монокристаллов в многозонных термических установках / М. М. Филиппов, А. И. Грибеноков, В. Е. Гинсар, Ю. В. Бабушкин // Известия вузов. Материалы электронной техники. – 2013. – № 2. – С. 26–31. DOI: 10.17073/1609-3577-2013-2-26-31
20. Везуб, Н. А. Расчетно-экспериментальное исследование влияния тепловых процессов на форму фронта кристаллизации гептадекана и галлия в модели метода Чохральского / Н. А. Везуб, А. И. Простомолотов, В. С. Бердников, В. А. Винокуров // Известия вузов. Материалы электронной техники. – 2014. – Т. 17, № 4. – С. 257–267. DOI: 10.17073/1609-3577-2014-4-257-267
21. Machlin, E. An introduction to aspects of thermodynamics and kinetics relevant to material science / E. Machlin. – Amsterdam; Boston; Heidelberg; London; New York; Oxford; Paris; San Diego; San Francisco; Singapore; Sydney; Tokyo: Elsevier, 2014. – 480 p.
22. Вураппа, К. Crystal Growth Technology / К. Вураппа, Т. Ohachi. – Norwich; New York: William Andrew publishing, 2016. – 585 p.
23. Ulrich, J. Heat and mass transfer operations — crystallization / J. Ulrich, M. J. Jones // Encyclopedia of the Life Support Systems. Developed under the Auspices of the UNESCO. – Oxford (UK): Tolss Publishtrs. URL: <http://www.eolss.net/>

Работа выполнена в рамках госзадания Минобрнауки НИТУ «МИСиС» (тема 3503022 «Разработка научно-методических основ процессов получения перспективных функциональных материалов для автономной генерации, хранения и преобразования энергии», срок выполнения с 01.03.2017 по 31.12.2019) и стипендии Президента РФ (СП–3513.2016.1).

ISSN 1609–3577 Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronic Technics. 2016, vol. 19, no. 3, pp. 179–188.

Evolution of models and algorithms for parameter calculation in micro- and nanoelectronics materials technology

V. V. Krapukhin¹, V. G. Kosushkin², L. V. Kozhitov¹, V. G. Kostishin¹, D. G. Muratov¹, A. V. Popkova³

¹National University of Science and Technology MISiS, 4 Leninsky Prospekt, Moscow 119049, Russia

²Bauman Moscow State Technical University, 5 Baumanskaya 2-ya Str., Moscow 105005, Russia

³Tver State University, 33, Zhelyabova Str., Tver 170100, Russia

Abstract. Results of developing a system of models and algorithms for parameter calculation in micro and nanoelectronics materials processes and equipment design have been considered. A distinctive feature of the teaching methods for special technological courses on electronics materials is that the courses are designed by analogy with electronics materials technologies: from a bulk single crystal to device structures the typical dimensions of which are within several

tens of nanometers. A scientific model approach to the solution of technological problems has been developed during the study of heat and mass transfer processes which, along with the interaction processes in liquids and gas and with account of the heterogeneous reactions, are the theoretical basis of the electronics materials technology. The possibilities of physical and mathematical modeling have been compared. Approaches to the creation of mathematical models for the single crystals growth processes of semiconductors, epitaxial layers and heterostructures have been considered and their possible practical applications have been outlined. We show that the ideas put forward by V.V. Krapukhin at early stages of training specialists in electronics materials technology and further developed by his students have formed the basis for the training of several generations of highly skilled specialists.

Vesvolod V. Krapukhin¹ — Professor; **Victor G. Kosushkin²** — Dr. Sci. (Eng.), Professor, Head of Department (vic_kos@mail.ru); **Lev V. Kozhitov¹** — Dr. Sci. (Eng.), Professor (kozhitov@misis.ru); **Vladimir G. Kostishin¹** — Dr. Sci. (Phys.-Math.), Professor, Head of Department of the Technology of Electronic Materials (drvkostishyn@mail.ru); **Dmitriy G. Muratov¹** — Cand. Sci. (Eng.), Associate Professor, Senior Researcher; **Alena V. Popkova³** — Senior Researcher.

Keywords: heat and mass transfer, models and algorithms of micro and nanoelectronics materials technology, single crystal growth, epitaxy, process parameter calculation

References

1. Krapukhin V. V., Kuznetsov G. D., Sokolov I. A. *Tekhnologiya materialov elektronnoi tekhniki* [Technology of electronic materials]. Moscow: Metallurgiya, 1996. 486 p. (In Russ.)
2. Sokolov I. A. *Raschety protsessov poluprovodnikovoi tekhnologii* [Calculations of the processes of semiconductor technology]. Moscow: Metallurgiya, 1994. 136 p. (In Russ.)
3. Kozhitov L. V., Kosushkin V. G., Krapukhin V. V., Parkhomenko Yu. N. *Tekhnologiya materialov mikro- i nanoelektroniki* [Technology of materials of micro- and nanoelectronics]. Moscow: MISIS, 2007. 526 p. (In Russ.)
4. Kozhitov L. V., Krapukhin V. V., Ulybin V. A. *Tekhnologiya epitaksial'nykh heterokompozitsii* [Technology of epitaxial hetero-compositions]. Moscow: MISIS, 2001. 156 p. (In Russ.)
5. Kosushkin V. G. *Upravlenie rostom kristallov nizkoenergeticheskimi vozdeistviyami* [Control of crystal growth by low-energy effects]. Kaluga: Izd. Nauchnoi literatury N. F. Bochkarevoi, 2004. 272 p. (In Russ.)
6. Kozhitov L. V., Blinov I. G. *Oborudovanie poluprovodnikovogo proizvodstva* [Semiconductor manufacturing equipment]. Moscow: Mashinostroenie, 1986. 264 p. (In Russ.)
7. Skvortsov I. M., Lapidus I. I., Orion B.V., Kozhitov L. V., Anikin V. K. *Tekhnologiya i apparatura gazovoi epitaksii kremniya i germaniya* [Technology and equipment for gas epitaxy of silicon and germanium]. Moscow: Energiya, 1978. 136 p. (In Russ.)
8. Chernyaev V. N., Kozhitov L. V. *Tekhnologiya epitaksial'nykh sloev arsenida galliya i pribory na ikh osnove* [Technology of gallium arsenide epitaxial layers and devices based on them]. Moscow: Energiya, 1974. 256 p. (In Russ.)
9. Kozhitov L. V., Lipatov V. V., Timoshin A. S., Volkov M. P. *Zhidkofaznaya epitaksiya kremniya* [Liquid-phase epitaxy of silicon]. Moscow: Metallurgiya, 1989. 200 p. (In Russ.)
10. Krapukhin V. V., Sokolov I. A., Kuznetsov G. D. *Fiziko-khimicheskie osnovy tekhnologii poluprovodnikovykh materialov* [Physicochemical basis of semiconductor materials technology]. Moscow: Izdatel'stvo «MISiS», 1995. (In Russ.)
11. Kozhitov L. V., Chichenev N. A., Emel'yanov S. G., Kosushkin V. G. *Tekhnologicheskoe vakuumnoe oborudovanie* [Technological vacuum equipment]. Kursk: YuZGU, 2014. 552 p. (In Russ.)
12. Golovaty Yu. P., Kosushkin V. G., Emel'yanov S. G., Chervyakov L. M., Kostishin V. G., Kozhitov L. V., Bebenin V. G. *Modeli i algoritmy tekhnologicheskikh protsessov polucheniya novykh materialov* [Models and algorithms of technological processes for obtaining new materials]. Kursk: YuZGU, 2014. 282 p. (In Russ.)
13. Kosushkin V. G., Adarchin S. A., Kozhitov L. V., Emel'yanov S. G., Kostishin V. G., Muratov D. G., Chervyakov L. M., Bebenin V. G. *Raschety parametrov tekhnologicheskikh protsessov polucheniya novykh materialov* [Calculations of parameters of technological processes for obtaining new materials]. Kursk: YuZGU, 2016. 314 p. (In Russ.)
14. Kozhitov L. V., Emel'yanov S. G., Kosushkin V. G., Strel'chenko S. S., Parkhomenko Yu. N., Kozlov V. V., Kozhitov S. L. *Tekhnologiya materialov mikro- i nanoelektroniki* [Technology of materials of micro- and nanoelectronics]. Kursk: YuZGU, 2012. 862 p. (In Russ.)
15. Karamurzov B. S., Kozhitov L. V., Kosushkin V. G., Strel'chenko S. S., Kozhitov S. L. *Modeli, tekhnologii i oborudovanie rosta kristallov i epitaksial'nykh sloev* [Models, technologies and equipment for the growth of crystals and epitaxial layers]. Nalchik: Kab.-Balk. un-t, 2011. 334 p. (In Russ.)
16. Mazalov A. V., Sabitov D. R., Kureshov V. A., Padalitsa A. A., Marmalyuk A. A., Akchurin R. Kh. Influence of conditions of growth on structural perfection of layers of AlN received by method MOS-gidridnoy of an epitaxy. *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronic Technics*. 2013, no. 1, pp. 45–48. (In Russ.). DOI: 10.17073/1609-3577-2013-1-45-48
17. Prostomolotov A. I., Verezub N. A., Ilyasov Kh. Kh. Remote and conjugated modeling of heat-mass transfer and defect formation in technological processes. *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2015, vol. 18, no. 1, pp. 31–36. (In Russ.). DOI: 10.17073/1609-3577-2015-1-31-36
18. Abgaryan K. K., Volodina O. V., Uvarov S. I. Mathematical modeling of point defect cluster formation in silicon based on molecular dynamic approach. *Modern Electronic Materials*, 2015, vol. 1, no. 3, pp. 82–87. DOI: 10.1016/j.moem.2016.03.001
19. Philippov M. M., Gribenyukov A. I., Ginsar V. E., Babushkin Yu. V. Application of mathematical model for support of crystal growth process in multizone thermal installations. *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronic Technics*. 2013, no. 2, pp. 26–31. (In Russ.). DOI: 10.17073/1609-3577-2013-2-26-31
20. Verezub N. A., Prostomolotov A. I., Berdnikov V. S., Vinokurov V. A. Numerical and experimental study of the influence of thermal processes on the shape of solidification front in Czochralski model for heptadecane and gallium. *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronic Technics*. 2014, vol. 17, no. 4, pp. 257–267. (In Russ.). DOI: 10.17073/1609-3577-2014-4-257-267
21. Machlin E. *An introduction to aspects of thermodynamics and kinetics relevant to material science*. Amsterdam; Boston; Heidelberg; London; New York; Oxford; Paris; San Diego; San Francisco; Singapore; Sydney; Tokyo: Elsevier, 2014. 480 p.
22. Byrappa K., Ohachi T. *Crystal Growth Technology*. Norwich; New York: William Andrew publishing, 2016. 585 p.
23. Ulrich J., Jones M. J. Heat and mass transfer operations — crystallization. *Encyclopedia of the Life Support Systems. Developed under the Auspices of the UNESCO*. Oxford (UK): Tolss Publishtrs. URL: <http://www.eolss.net/>

Acknowledgements. The work was performed within the State Assignment of the Ministry of Education and Science to the National Research and Technical University MISiS (topic 3503022, Development of scientific and methodical basis for technologies of prospective functional materials of independent energy generation, storage and conversion, terms 01.03.2017 to 31.12.2019) and Fellowship of the President of the Russian Federation (SP-3513.2016.1).