

УДК 621.315.592:004.947

ДИСТАНЦИОННОЕ И СОПРЯЖЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА И ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЕ В ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССАХ

© 2014 г. А. И. Простомолотов, Н. А. Вerezуб, Х. Х. Ильясов

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
«Институт проблем механики им. А. Ю. Ишлинского Российской академии наук»,
просп. Вернадского, д. 101, корп. 1, Москва, 119526, Россия

Современный уровень развития вычислительной техники и программных средств позволяет осуществлять дистанционное моделирование физических процессов в технологических задачах с использованием сложных программных комплексов. Его преимущество состоит в том, что пользователи (*Клиенты*) комплекса выполняют всю творческую работу по подготовке и обработке расчетных данных на собственных компьютерах, а длительные вычисления осуществляют через Интернет–доступ на удаленном суперкомпьютере (*Сервере*), где находится программный комплекс.

Представлены примеры, иллюстрирующие применение такого комплекса программ *CrystmoNet* к ряду задач, связанных с сопряженным моделированием физических процессов при выращивании монокристаллов кремния методом Чохральского. Они включают результаты сопряженных расчетов гидродинамических процессов в расплаве с учетом его кристаллизации и радиационно–кондуктивного теплопереноса во всем объеме ростового теплового узла, а также термоупругих напряжений и распределений собственных точечных дефектов в бездислокационном монокристалле кремния.

Ключевые слова: сопряженное моделирование, комплекс программ, удаленный доступ, технологические примеры.

Введение

Проблема управления природой, содержанием, размерами и характером распределения присутствующих в бездислокационном монокристалле микро– и наноразмерных дефектов связана с разработкой эффективных способов воздействия на ансамбль собственных точечных дефектов в выращиваемом слитке и вырезаемых из него пластинах. Эффективным подходом является использование математических моделей, описывающих особенности теплопереноса в расплаве и выращиваемом кристалле. Такого рода математические модели и программы на их основе обеспечивают возможность оптимизации конструкций тепловых узлов и условий выращивания монокристаллов. Они закладывают прочную научную основу в конструирование новых поколений высокопроизводительного ростового оборудования и разработку новых эффективных технологических процессов выращивания.

В отличие от ряда зарубежных аналогов, предложенный авторами подход наиболее полно учитывает сопряженность физических процессов в тепловом узле установки выращивания. Более того, рассмотрен подход, связан-

ный с дистанционным моделированием процессов роста кристаллов и описанием соответствующего программного комплекса *CrystmoNet* [1]. Его основой стали программные модули для сопряженного моделирования теплопереноса при Cz–выращивании, разработанные авторами (*Crystmo* и дефектообразования *Defects* в бездислокационных кристаллах кремния (Si)), а также коммерческие комплексы (*Ansys®Fluent®* для гидромеханики, *Marc®Mentat®* для радиационно–кондуктивного теплообмена и твердотельной механики, *Tecplot–360®* для графического представления результатов).

Практическое использование возможностей дистанционного и сопряженного моделирования иллюстрируется примерами расчетов процессов теплопереноса, напряжений и дефектообразования при выращивании монокристаллов кремния по методу Чохральского (Cz) (рис. 1).

Комплекс программ удаленного доступа *CrystmoNet*

Программный комплекс *CrystmoNet* обеспечивает возможность дистанционной работы по схеме *Клиент–Сервер* на двух

Простомолотов Анатолий Иванович — доктор техн. наук, ведущий научный сотрудник, e-mail: prosto@ipmnet.ru; Вerezуб Наталия Анатольевна — кандидат физ.–мат. наук, старший научный сотрудник, e-mail: verezub@ipmnet.ru, Ильясов Хисам Хисамович — кандидат физ.–мат. наук, старший научный сотрудник, e-mail: ilyasov@ipmnet.ru

платформах: *MS Windows* на клиентском компьютере (*Клиенте*), и *Unix*-подобной на удаленном серверном компьютере (*Сервере*). На *Клиенте* устанавливается программа-оболочка *CrystmoNet-Shell*, управляющая работой комплекса, и пре/постпроцессор *Mentat*, служащий для ввода исходных данных и вывода результатов расчета.

Сервер лицензий, расчетные модули *Crystmo*, *Defects*, *Marc*, *Fluent* и графический постпроцессор *Tecplot* устанавливаются на *Сервере*. Обмен данными между *Клиентом* и *Сервером* осуществляется по схеме, представленной на рис. 2 [1].

Работа с комплексом начинается с запуска программы-оболочки на *Клиенте* и получения лицензии. *CrystmoNet-Shell* открывает окно *Server.data* (рис. 3), которое содержит входные данные, кнопки-команды для расчетных модулей и *Tecplot*.

С помощью программы-оболочки задаются данные о расположении отдельных компонентов и способах взаимодействия между ними. Контроль количества одновременно работающих приложений осуществляется сервером лицензий. Для получения лицензии на удаленную работу задаются данные по идентификации пользователя, сервера лицензий, номера порта для взаимодействия, которые должны быть согласованы с системным администратором комплекса. Наличие флажка *Remote work with PuTTY* позволяет на экране *Клиента* создавать эмулятор терминала *Сервера* для контроля выполнения заданий.

Модули *Marc*, *Fluent*, *Tecplot* имеют собственные окна для ввода входных данных, для *Crystmo* и *Defects* созданы окна *Crystmo.data* и *Defects.data*. Запуск расчетных модулей и *Tecplot* на *Сервере* с одновременным файловым обменом между *Клиентом* и *Сервером* начинается с нажатия на кнопку *Run* в окнах *Marc+Crystmo*, *Crystmo.run*, *Defects.run*, *Tecplot*. В окне *Marc+Crystmo* дается перечисление файлов и их форматов для пересылки от *Клиента* к *Серверу* и обратно.

Возможны два варианта запуска *Marc*. В первом случае расчет проводится только решателем *Marc*, и флажок *Run Mentat* отсутствует. Во втором случае выполняется сопряженный расчет по *Marc* и *Crystmo*. При этом в число файлов, копируемых на *Сервер*, включается Фортран-модуль *Crystmo.f*, который перед расчетом автоматически интегрируется в объектную среду *Marc* с образованием единого модуля *Marc+Crystmo*. Сопряженный расчет по модулям *Marc* и *Fluent*, *Marc* и *Defects*, *Marc* и *Crystmo* организуется на основе файлового обмена между ними. Графические построения в программе *Tecplot* выполняются на *Сервере* по данным расчета, которые могут быть скопированы в виде рисунков на компьютер *Клиента*.

Модуль *Marc* и пре/постпроцессор *Mentat*. С помощью модуля *Mentat* [2] выполняется подготовка входных данных для *Marc*-решателя: задается гео-

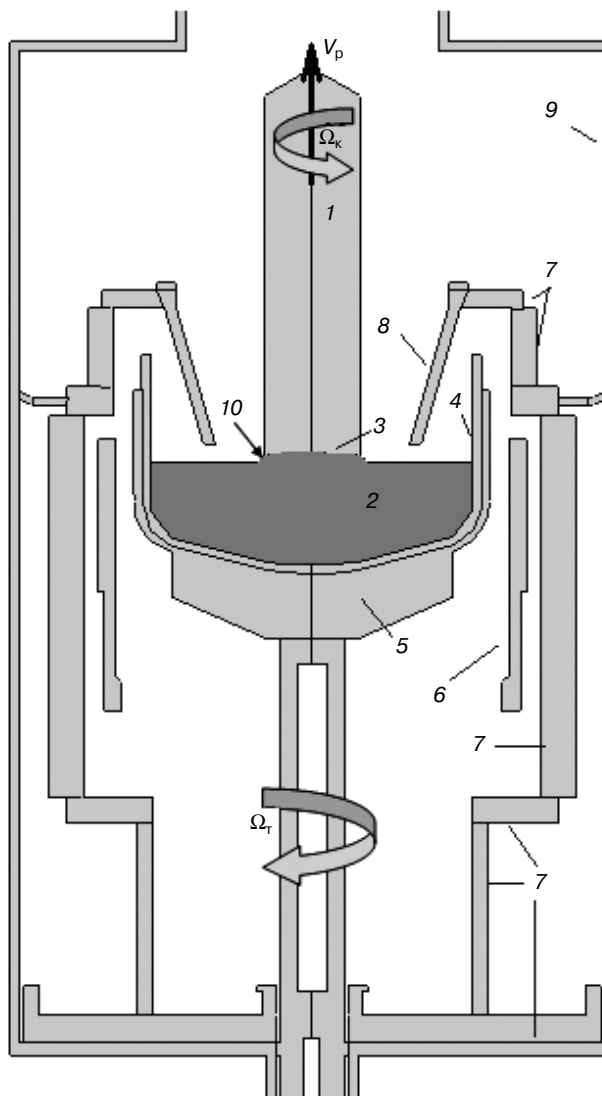


Рис. 1. Схема сопряженной математической модели выращивания кристаллов кремния методом Чохральского: 1 — кристалл; 2 — расплав; 3 — фронт кристаллизации (ФК); 4 — тигель; 5 — подставка; 6 — нагреватель; 7 — теплоизоляция; 8 — тепловой экран; 9 — водоохлаждаемый корпус; 10 — требуемое положение кромки ФК; V_p — скорость вытягивания кристалла из расплава; Ω_c , Ω_{Cr} — угловые скорости вращения кристалла и тигля соответственно

Fig. 1. Schematic of the conjugated mathematical mode of Czochralski silicon single crystal growth: (1) crystal, (2) melt, (3) crystallization front, (4) crucible, (5) graphite pad, (6) heater, (7) heat insulation, (8) heat screen, (9) water cooled enclosure, (10) required position of the crystallization front, V_p is the crystal pulling rate and Ω_c , Ω_{Cr} are the angular speeds of the crystal and the crucible, respectively

метрия теплового узла, выполняется сеточное разбиение на конечные элементы.

Тепловой узел состоит из ряда компонент с различающимися материальными свойствами (см. рис. 1), для каждой из которых задаются свои теплофизические параметры (например, стальная камера, кристалл и расплав кремния, графитовые экраны и нагреватель). На внешней стенке водоохлаждаемой камеры теплового узла задается комнатная температура. Скорость вытягивания кристалла V_p и мощность нагревателя задаются данными в окне *Marc+Crystmo*. Радиационный теплоперенос

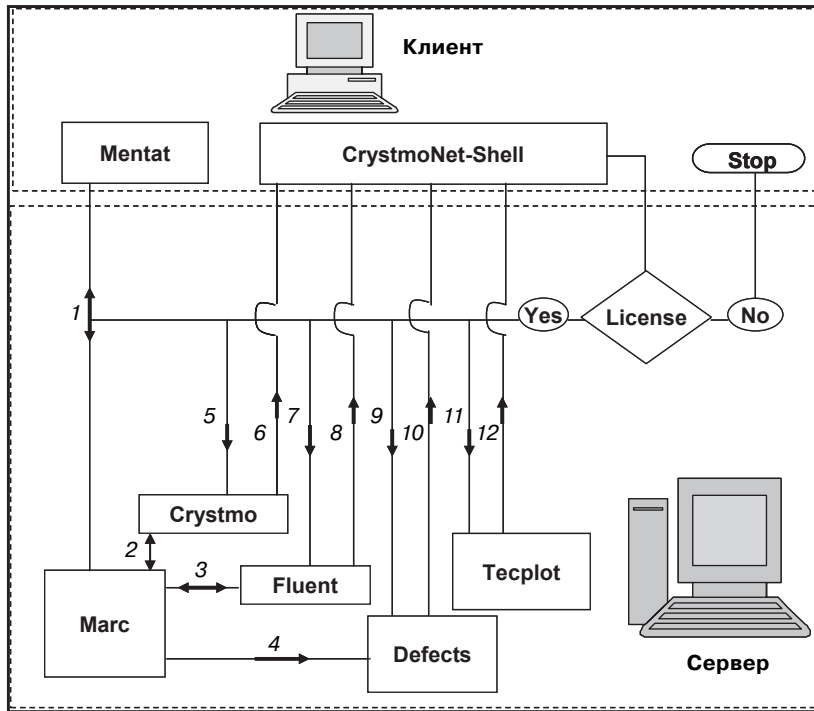


Рис. 2. Схема взаимодействия Клиент–Сервер с направлениями файлового обмена между модулями комплекса CrystmoNet [1]
 Fig. 2. Client–Server interaction diagram showing file exchange directions between CrystmoNet modules [1]

в Cz–тепловом узле полагают в приближении «серого» тела и между взаимно видимыми поверхностями рассчитывают угловые коэффициенты.

Из окна Mentat выполняется запуск решателя Marc с учетом заданных параметров для задач теплопереноса. В процессе счета Mentat позволяет выполнять графический вывод результатов. Расчет термонапряжений и деформаций в кристалле осуществляется по рассчитанному полю температуры путем настройки соответствующего окна Mentat для задания материальных свойств и запуска решателя Marc для механического класса задач.

Одно из первых применений Marc/Mentat к Cz–процессу роста монокристаллов кремния было выполнено в работе [3], где описаны особенности его использования для радиационно–кондуктивного теплопереноса в тепловом узле без учета гидродинамики расплава. Однако самостоятельное и более широкое применение Marc к проблемам Cz–выращивания сдерживается отсутствием внутреннего программного модуля для моделирования процессов гидродинамики при реальных теплофизических и Cz–ростовых параметрах, соответствующих большим числам подобия (Рейнольдса, Рэлея, Марангони).

Модуль Crystmo. Разработанный авторами модуль Crystmo [4] служит для расчета гидродинамики и теплопереноса в расплаве для Cz–процесса. Трехмерные уравнения Навье–Стокса–Буссинеска и теплопереноса решаются в цилиндрических координатах методом конечных объемов. Теплофизические параметры расплава (вязкость, теплопроводность и т. д.) полагают постоянными. Сеточное

разбиение, настроечные и физические параметры задаются в табличном виде в окне Crystmo.data. Температура на границах расплава задается по результатам расчета в Marc для радиационно–кондуктивного теплопереноса. Для переноса данных с конечно–элементной сетки из Marc на сетку конечных объемов в Crystmo выполняется интерполяция. При сопряженном решении Marc+Crystmo рассчитанные в Crystmo компоненты скорости течения интерполируются на конечно–элементную сетку и передаются в Marc. Файловый обмен между Клиентом и Сервером и запуск Crystmo осуществляются с помощью окна Crystmo.run, аналогичного по виду окну Marc+Crystmo.

Модуль Fluent. Коммерческий модуль Fluent [5] используют как гидродинамическую программу с дополнительными возможностями для решения уравнений Навье–Стокса–Буссинеска и тепломассопереноса в областях сложной формы, с учетом кристаллизации расплава и для применения турбулентных моделей. Для подготовки входных данных и представления результатов расчетов имеется встроенный графический пре/постпроцессор.

Примеры отдельного применения Fluent для Cz–моделирования известны [6], однако варианты

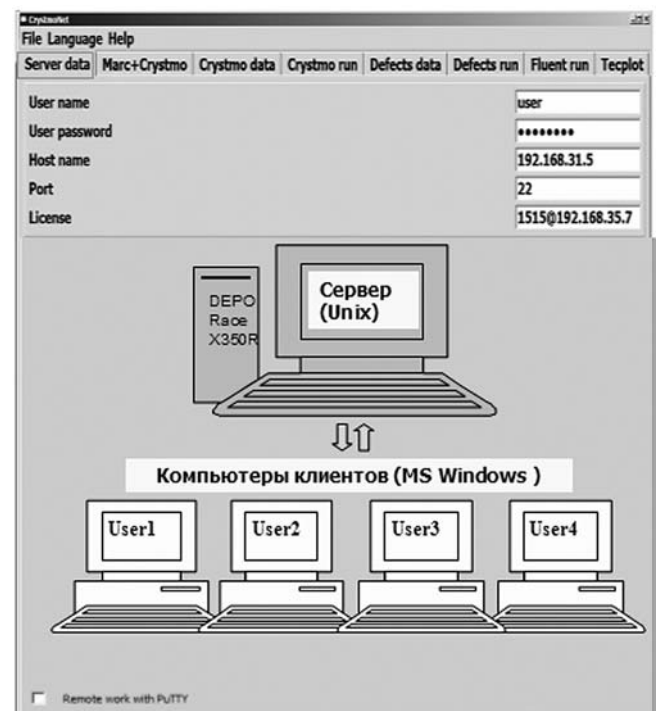


Рис. 3. Общий вид экранного меню с открытым окном Server.data для регистрации пользователя, с иллюстрацией взаимодействия Сервера и компьютеров Клиентов
 Fig. 3. General view of the screen menu with the Server.data window open for user registration illustrating the interaction between the Server and the Client computers

его сопряжения с *Marc* отсутствуют. В *CrystmoNet* такое сопряжение построено по схеме файлового обмена. С этой целью разработаны подпрограммы, позволяющие задавать профили температуры на границах расплава и кристалла по данным *Marc* и передавать компоненты скорости расплава после расчета по *Fluent* в *Marc*. При передаче данных выполняется такая же интерполяция, как при расчете по *Marc+Crystmo*.

Модуль Defects. Разработанный авторами модуль *Defects* [7] рассчитывает процесс диффузии–рекомбинации собственных точечных дефектов (СТД) — вакансий и межузельных атомов кремния и образование микродефектов в растущем бездислокационном монокристалле кремния. При расчете используют температурное поле, полученное по *Marc* и *Crystmo* или *Marc* и *Fluent*.

Систему уравнений для расчета СТД–концентраций и плотности микродефектов решают методом конечных разностей. Сеточное разбиение, настроечные и физические параметры задают в окне *Defects.data*. Файловый обмен между *Клиентом* и *Сервером*, а также запуск на счет *Defects* осуществляется с помощью окна *Defects.run*, аналогичного окну *Marc+Crystmo*. При обмене производится интерполяция данных между сетками.

Модуль Tecplot. Коммерческий пакет *Tecplot* [8] используют как универсальный и эффективный графический постпроцессор, позволяющий выполнять обработку численных результатов, полученных как методом конечных объемов, так и методом конечных элементов. Запуск модуля осуществляют в окне *Tecplot*, открываемом в общем экранном меню, показанном на рис. 3. Файловый обмен между *Клиентом* и *Сервером* обеспечивает загрузку результатов в *Tecplot*–формате для каждого из расчетных модулей.

Примеры моделирования Cz–процесса с использованием комплекса *CrystmoNet*

Расчет теплопереноса для Cz–процесса осуществляют на основе сопряжения радиационно–кондуктивной модели в *Marc* и моделей конвекции в *Crystmo* или *Fluent*. Расчеты термонапряжений и дефектообразования в кристалле выполняются в *Marc* и *Defects*.

Сопряженный теплоперенос. Вначале расчеты проводят в *Marc* в режиме кондуктивно–радиационного теплопереноса. Для учета кристаллизации задают переходной слой между расплавом и кристаллом в интервале $T_S < T < T_L$ (где $T_S = 1678$ К — температура солидуса и $T_L = 1688$ К — ликвидуса) с выделением скрытой теплоты плавления. Рассчитывается температурное поле в тепловом узле с итерационной коррекцией мощности нагревателя до величины, соответствующей заданному положению кромки фронта кристаллизации (см. точку 10

на рис. 1). Затем в *Crystmo* рассчитывается теплоперенос и поле скоростей в расплаве без учета кристаллизации. Поле скоростей копируется в *Marc*.

Сопряженный расчет *Marc+Fluent* повторяет *Marc+Crystmo*–последовательность. Из *Marc* во *Fluent* передаются распределения температур на границах расплава и кромке кристалла. Во *Fluent* теплоперенос рассчитывается совместно для кристалла и расплава с учетом кристаллизации и скорости V_p . Значения мощности нагревателя и скорости V_p корректируют в окне *Marc+Crystmo* при отсутствии флажка *Run Mentat*. При завышенной мощности возникает перегрев кристалла, и фронт кристаллизации (**ФК**) будет смещен вверх по кристаллу, что соответствует отклонению от задаваемого положения кромки ФК (см. точку 10 на рис. 1). В результате итерационной коррекции мощности и пересчета гидродинамики по *Fluent* достигается требуемое положение кромки ФК, соответствующее W–образной форме ФК на данной стадии выращивания кристалла (рис. 4, см. третью стр. обложки).

Приведенный выше расчет соответствует одной стадии выращивания (при фиксированной длине кристалла, глубине расплава и положении тигля). При моделировании всего ростового процесса с расчетом напряжений и дефектообразования в кристалле рассчитываются 10–20 таких стадий роста цилиндрической части слитка. Результаты расчетов собираются в базу данных. Для плавного изменения температурного поля применяют интерполяцию по времени между смежными стадиями. На этой основе строится тепловая история процесса, которая показывает динамику изменения теплового поля в тепловом узле и растущем кристалле.

Сопряженный расчет термонапряжений и дефектообразования. По модулю *Marc* рассчитывается термонапряженное состояние монокристалла кремния. Такой пример показан на рис. 5 (см. третью стр. обложки) для монокристалла кремния диаметром 100 мм на конкретной стадии выращивания с целью оценки возможностей возникновения критических напряжений, вызывающих пластическую деформацию и генерацию дислокаций. Получено, что расчетные значения напряжений не превышают критические. Их максимальное значение (7,6 МПа) достигается на боковой поверхности кристалла вблизи ФК, что обусловлено наличием наибольших градиентов температуры в этой области. При удалении от ФК напряжения быстро уменьшаются.

Следующим шагом сопряженного решения является построение тепловой истории выращиваемого монокристалла, а затем моделирование на ее основе процесса рекомбинации собственных точечных дефектов вблизи ФК. Аннигиляция вакансий и межузельных атомов вблизи ФК в значительной степени определяет их последующую миграцию и распределение в кристалле. Скорость аннигиляции равна разности между скоростями прямой реакции

рекомбинации и обратной реакции термической генерации пар собственных точечных дефектов. Скорость прямой (бинарной) реакции рекомбинации пропорциональна произведению концентраций взаимодействующих точечных дефектов. Скорость обратной реакции связана со скоростью прямой реакции законом действующих масс. В выращиваемом по методу Чохральского кристалле кремния перенос вакансий и межузельных атомов осуществляется в основном конвективной диффузией, процессом термодиффузии пренебрегают.

В качестве примера на рис. 6 (см. третью стр. обложки) даны изолинии C_{iv} остаточных собственных точечных дефектов после их рекомбинации в монокристалле кремния в двух режимах: вакансионном и смешанном вакансионно-межузельном. Здесь $C_{iv} = C_i - C_v$, где C_i , C_v — концентрации межузельных атомов и вакансий соответственно. Различия вызваны разным соотношением скорости вытягивания V_p и осевого температурного градиента на ФК. В случае, представленном на рис. 6, а (см. третью стр. обложки), концентрация остаточных вакансий значительная, так как скорость вытягивания превышает критическую. Однако при ее снижении растет концентрация межузельных атомов, и при некотором критическом значении V_p происходит сужение вакансионной области к центру кристалла с расширением межузельной области, примыкающей к его боковой поверхности. Результатом расчета является радиальное распределение концентрации вакансий и межузельных атомов на верхней границе расчетной области.

Заключение

Показан алгоритм дистанционного применения известных коммерческих комплексов *Ansys®Fluent®* и *MSC.Marc®Mentat®* в сопряжении со специализированными программными модулями, разработанными авторами. Для этого разработана программная оболочка *CrystmoNet-Shell* на языке C++, которая предоставляет возможность удаленного доступа по схеме Клиент-Сервер для сопряженного численного решения широкого круга задач механики жидкости и твердого тела. Сопряженное моделирование обеспечивается специальными интерфейсами взаимодействия между модулями, функционирующими на клиентском компьютере под управлением

одной из разновидностей ОС MS Windows и сервере под управлением UNIX-подобной ОС.

Результаты работы комплекса программ *CrystmoNet* в режиме такого дистанционного решения сопряженных задач проиллюстрированы примерами для технологии Cz-выращивания кристаллов, где сопряженное моделирование включает: расчет радиационно-кондуктивного теплопереноса в ростовой установке и напряженно-деформированного состояния кристалла по *MSC.MarcMentat* с учетом данных расчета конвективного теплопереноса при кристаллизации расплава по модулям *Crystmo* или *AnsysFluent*, а также расчет дефектообразования по модулю *Defects* и графическую обработку по модулю *Tecplot-360*.

Предложенный подход позволяет существенно наращивать сопряженность технологической модели за счет использования уже широко известных и апробированных моделей механики сплошной среды, включенных в упомянутые выше коммерческие пакеты программ, а также дополнять их сопряжением с собственными новыми моделями и программными модулями пользователя, что дает более полный и адекватный учет особенностей процессов выращивания монокристаллов.

Библиографический список

1. Prostomolotov, A. CrystmoNet remote access code for Czochralski crystal growth modelling / A. Prostomolotov, H. Ilyasov, N. Verezub // Sci. and Technol. – 2013, Special Iss. – P. 18–25.
2. Introduction to MSC.Marc and Mentat: MAR101 course notes. Msc.Software Inc. 2007. <http://www.mssoftware.com/training-materials>
3. Virzi, A. Computer modelling of heat transfer in Czochralski silicon crystal growth / A. Virzi // J. Cryst. Growth. – 1991. – V. 112. – P. 699–722.
4. Гончаров, А. Л. Аппроксимация и численный метод решения трехмерных уравнений Навье-Стокса на ортогональных сетках / А. Л. Гончаров, М. Т. Девдариани, А. И. Простомолотов, И. В. Фрязинов // Математическое моделирование. – 1991. – Т. 3, № 5. – С. 89–109.
5. Ansys Fluent Tutorial Guide: Release 14.0. Ansys Inc. 2011. <http://www.ansys.com/Products/Simulation+Technology/Fluid+Dynamics>
6. Mokhtari, F. Combined effects of crucible geometry and Marangony convection on silicon Czochralski crystal growth / F. Mokhtari, A. Bouabdallah, M. Zizi, S. Hanchi, A. Alemany // Cryst. Res. and Technol. – 2009. – V. 44, N 8. – P. 787–799.
7. Везуб, Н. А. Взаимодействие собственных точечных дефектов при выращивании монокристаллов кремния методом Чохральского / Н. А. Везуб, В. В. Воронков, М. Г. Мильвидский, А. И. Простомолотов // Поверхность. Рентгеновские, синхронные и нейтронные исследования. – 2001. – № 10. – С. 15–20.
8. Tecplot 360: User's Manual. Tecplot Inc. 2009. <http://www.tecplot.com/support/documentation>

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты № 12-02-01126, 14-08-00454).

Статья написана по материалам междисциплинарного научно-практического семинара «Математическое моделирование в материаловедении электронных наноструктур», проведенного в ВЦ РАН имени А. А. Дородницына.

Авторы благодарят В. Ежлова (ОАО «Гиредмет») за техническую поддержку и лицензионный доступ к *MSC.Marc®Mentat®* и *Tecplot-360®*.

Статья поступила в редакцию 24 апреля 2014 г.

ISSN 1609–3577 Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering. 2015, vol. 18, no. 1, pp. 31–36.

Remote and Conjugated Modeling of Heat–Mass Transfer and Defect Formation in Technological Processes

Anatolii Ivanovich Prostomolotov — Leading Researcher, Dr. Sci. (Eng.) (prostom@ipmnet.ru); **Nataliya Anatol'evna Verezub** — Cand. Sci. (Phys.–Math.), Senior Researcher (verezub@ipmnet.ru); **Khisam Khisamovich Ilyasov** — Cand. Sci. (Phys.–Math.), Senior Researcher (ilyasov@ipmnet.ru).

Institute for Problems in Mechanics (IPMech) of Russian Academy of Sciences,
101/1 prospekt Vernadskogo, Moscow 119526, Russia

Abstract. The advanced development of computer technology and software makes possible remote simulation of physical processes in technological processes using complex software systems. Its advantage is that the users (*Clients*) carry out the main creative work (the preparation and treatment of the calculated data) on their own computers, but the long–time calculations are executed by means of Internet access on a remote supercomputer (*Server*) where the software package is installed. The presented examples illustrate an application of *CrystmoNet* code to a number of tasks related to the conjugated simulation of Czochralski silicon single crystal growth. They include results of conjugated calculations of the hydrodynamic processes occurring in the melt taking into account its crystallization and the radiation–conductive heat transfer in the entire volume of the crystal growth hot zone, as well as the thermal stresses and the distributions of intrinsic point defects in dislocation–free silicon single crystals.

Key words: conjugated modeling, program code, remote access, technological examples.

References

1. Prostomolotov A., Ilyasov H., Verezub N. CrystmoNet remote access code for Czochralski crystal growth modelling. *Science and Technology*. 2013, iss. Special (March), pp. 18–25. DOI: 10.5923/s.scit.201301.04
2. Introduction to MSC.Marc®&Mentat®: MAR101 course notes. MSC.Software Inc. 2007. <http://www.mssoftware.com/training-materials>

3. Virzi A. Computer modelling of heat transfer in Czochralski silicon crystal growth. *Journal of Crystal Growth*. 1991, vol. 112, pp. 699–722. DOI: 10.1016/0022-0248(91)90126-P

4. Goncharov A. L., Devdariani M. T., Prostomolotov A. I., Fryazinov I. V. Approximation and numerical method for solving three–dimensional Navier–Stokes equations in the orthogonal grids. *Matematicheskoe modelirovanie*. 1991, vol. 3, no. 5, pp. 89–109. (In Russ.)

5. ANSYS.Fluent® Tutorial Guide: Release 14.0. ANSYS Inc. 2011. <http://www.ansys.com/Products/Simulation+Technology/Fluid+Dynamics>

6. Mokhtari F., Bouabdallah A., Zizi M., Hanchi S., Alemany A. Combined effects of crucible geometry and Marangoni convection on silicon Czochralski crystal growth. *Crystal Research and Technology*. 2009, vol. 44, no. 8, pp. 787–799. DOI 10.1002/crat.200800580

7. Verezub N. A., Voronkov V. V., Milvidskii M. G., Prostomolotov A. I. Interaction of the intrinsic point defects into Cz growing silicon single crystals. *Poverkhnost'. Rentgenovskie, sinkhronnye i neutronnye issledovaniya = Journal of Surface Investigation: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. 2001, no. 10, pp. 15–20. (In Russ.)

8. TECPLOT 360®: User's Manual. TECPLOT Inc. 2009. <http://www.tecplot.com/support/documentation>

Acknowledgements. This work was performed with financial support of RFFI (Grants No. 12–02–01126 and No. 14–08–00454).

The article was written based on an interdisciplinary scientific and practical seminar «Mathematical Modeling in Materials electronic nanostructures», held in the Institution of Russian Academy of Sciences Dorodnicyn Computing Centre of RAS.

The Authors wish to thank V. Ezhlov (OAO Giredmet) for technical support and providing licensed access to MSC.Marc®Mentat® and Tecplot–360®.

Received April 24, 2014