



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 59 за 2023 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

А.О. Гусев, О.С. Мажорова

**Численное моделирование
процесса выращивания
монокристаллов методом
Чохральского в
квазистационарном
приближении**

Статья доступна по лицензии
[Creative Commons Attribution 4.0 International](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)



Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Гусев А.О., Мажорова О.С. Численное моделирование процесса выращивания монокристаллов методом Чохральского в квазистационарном приближении // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2023. № 59. 20 с.
<https://doi.org/10.20948/prepr-2023-59>
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2023-59>

Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
им. М.В. Келдыша
Российской академии наук

А.О. Гусев, О.С. Мажорова

Численное моделирование процесса выращивания
монокристаллов методом Чохральского
в квазистационарном приближении

Москва — 2023

Гусев А.О., Мажорова О.С.

Численное моделирование процесса выращивания монокристаллов методом Чохральского в квазистационарном приближении

В работе изучается квазистационарная математическая модель процесса выращивания монокристаллов методом Чохральского с жидкостной герметизацией расплава, учитывающая теплоперенос в кристалле, расплаве и флюсе, теплообмен излучением между нагревателем и содержимым тигля, формирование фронта кристаллизации и выделение теплоты на нем, образование мениска на границе расплав/флюс. В рамках квазистационарного приближения процесс кристаллизации рассматривается как серия стационарных состояний, однозначно определяющихся внешним температурным режимом, скоростью протяжки и объемом расплава. Для решения задачи с внутренними подвижными границами применен метод выпрямления фронта. Численно изучено влияние скорости протяжки и температуры нагревателя на радиус выращенного кристалла.

Ключевые слова: фазовый переход, численное моделирование роста кристаллов, метод Чохральского с жидкостной герметизацией расплава

Gusev A.O., Mazhorova O.S.

Quasi-steady-state numerical simulation of Czochralski single crystal growth

We consider the steady-state growth of a single crystal by the liquid encapsulated Czochralski method. The mathematical model accounts for heat transfer in the crystal, melt and encapsulant, radiative heat exchange between the crucible and the surrounding furnace, formation of the growth interface and the melt/encapsulant interface meniscus, release of the latent heat during the phase transition. The time history of the growth is reconstructed from a sequence of steady state calculations with decreasing melt depth. The numerical method is based on explicit interface tracking. The employed computational procedure ensures global conservation of thermal energy. The response of prototype growth system for changes in pull rate or heater temperature is examined numerically.

Key words: phase transition, numerical simulation of the crystal growth process, liquid encapsulated Czochralski crystal growth

1 Введение

В работе рассматривается процесс получения монокристаллов арсенида галлия методом Чохральского с жидкостной герметизацией расплава. Этот процесс является одним из вариантов метода направленной кристаллизации и состоит в следующем. Тигель, заполненный расплавом кристаллизующегося материала и покрытый слоем флюса из борного ангидрида, расположен в печи. Флюс препятствует испарению мышьяка из жидкой фазы. На начальной стадии процесса затравочный кристалл малого радиуса приводится в контакт со свободной поверхностью расплава. После контролируемого расплавления небольшого объема затравки начинается процесс роста кристалла (Рис. 1а). Образующийся монокристалл медленно вытягивается из жидкой фазы. За счет изменения скорости протяжки и температуры теплового узла кристалл разрастивают, увеличивая его радиус до номинального. На развитой стадии процесса в ростовой камере поддерживаются условия, обеспечивающие рост кристалла практически постоянного радиуса (Рис. 1б).

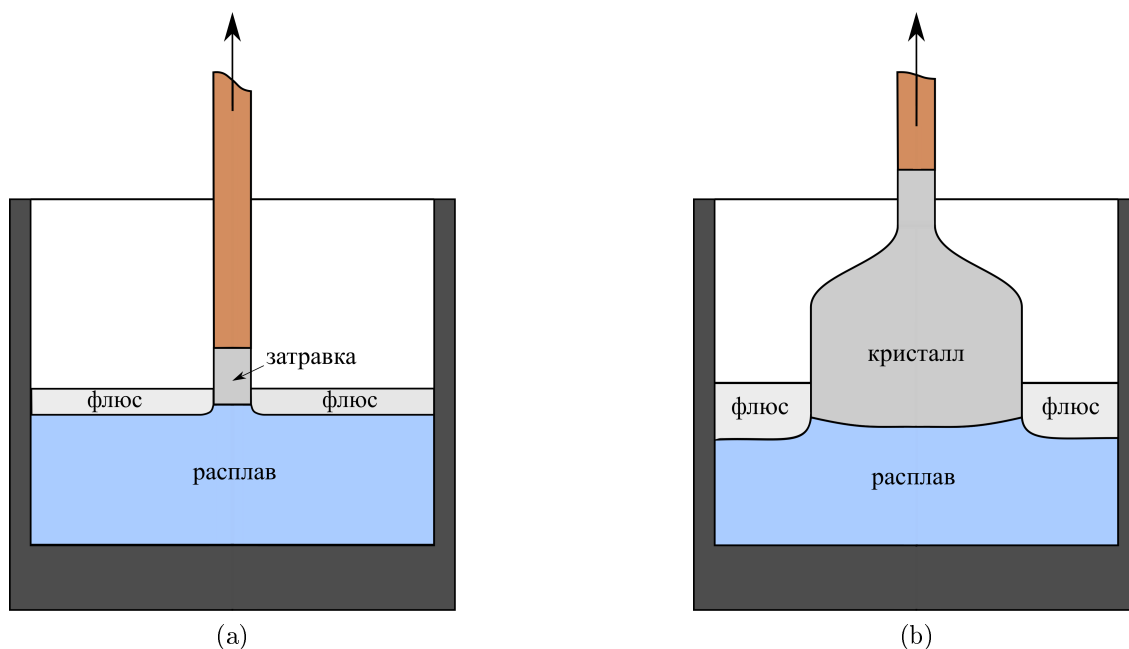


Рис. 1: Модельная система: (а) начальная стадия процесса; (б) развитая стадия.

Важнейшими параметрами, характеризующими качество монокристаллов, являются однородность его состава, низкая плотность дислокаций, отсутствие

дефектов, снижающих потребительские характеристики материала. Основными источниками дислокаций являются температурные напряжения, возникающие в кристалле в ходе выращивания. Для повышения качества материалов необходимо осуществлять строгий контроль условий выращивания. Экспериментальная оптимизация является дорогостоящим и требующим существенных временных затрат процессом. Сократить количество натурных экспериментов позволяет численное изучение тепловых полей, возникающих внутри ростовой установки.

В работах [1–5] Р. Брауном и Дж. Дерби рассмотрена квазистационарная капиллярная модель процесса выращивания монокристаллов методом Чохральского. В рамках квазистационарного приближения предполагается, что

- процессы теплопереноса протекают в системе существенно быстрее, чем изменяется геометрия фаз (их объем, форма межфазных границ);
- рост кристалла осуществляется с постоянной скоростью, равной скорости протяжки;
- растущий кристалл имеет постоянный радиус;
- процесс кристаллизации рассматривается как серия стационарных состояний, однозначно определяющихся внешним температурным режимом, скоростью протяжки и объемом расплава.

В данной работе изучается квазистационарная математическая модель процесса выращивания монокристалла методом Чохральского с жидкостной герметизацией расплава, учитывающая теплоперенос в кристалле, расплаве и флюсе, теплообмен излучением между нагревателем и содержимым тигля, формирование фронта кристаллизации и выделение теплоты на нем, образование мениска на границе расплав/флюс. Для решения задачи с внутренними подвижными границами применяется метод выпрямления фронта, в расчетах используется разностная схема, в которой на дискретном уровне выполнен закон сохранения внутренней энергии. Численно изучено влияние скорости протяжки и температуры нагревателя на радиус выращенного кристалла.

2 Математическая модель

Квазистационарная математическая модель процесса кристаллизации записывается в безразмерном виде. В качестве масштаба температуры выбрана температура плавления T_{ph} , пространственный масштаб определяется радиусом тигля R_c . Значения коэффициента теплопроводности, плотности и удельной теплоемкости отнесены к соответствующему значению в твердой фазе, т.е. $k^\gamma = k^\gamma/k^s$, $\rho^\gamma = \rho^\gamma/\rho^s$, $c^\gamma = c^\gamma/c_p^s$ $\gamma = s, c, l, e$. Безразмерные параметры задачи приведены в таблице 1, где σ^* — постоянная Стефана–Больцмана, ε^s , ε^e — степень черноты кристалла и флюса соответственно, σ — коэффициент поверхностного натяжения, g — ускорение свободного падения.

Таблица 1: Безразмерные параметры

Величина	Определение	Физический смысл	Значение
Число Пекле (протяжка)	$Pe = v_g R_c c_p^s \rho^s / k^s$	$\frac{\text{Перенос за счет движения}}{\text{Теплопроводность}}$	0.1
Число Стефана	$St = \lambda / (c_p^s \rho^s T_{\text{ph}})$	$\frac{\text{Скрытая теплота плавления}}{\text{Количество теплоты}}$	1.1
Радиационное число Био	$Rad^\gamma = \sigma^* \varepsilon^\gamma R_c T_{\text{ph}}^3 / k^s$, $\gamma = s, e$	$\frac{\text{Радиационный теплообмен}}{\text{Теплопроводность}}$	1
Число Бонда	$Bo = g R_c^2 (\rho^l - \rho^e) / \sigma$	$\frac{\text{Сила тяжести}}{\text{Сила поверхностного натяжения}}$	290

Основные уравнения. Теплоперенос в тигле, расплаве и флюсе описывается с помощью уравнения

$$\nabla \cdot (k^\gamma \nabla T) = 0, \quad (r, z) \in \Omega_\gamma, \quad \gamma = e, l, c. \quad (1)$$

Перенос энергии в кристалле, движущемся со скоростью v_g , задается уравнением

$$\nabla \cdot (k^s \nabla T) - Pe (\nabla T \cdot \mathbf{e}_z) = 0, \quad (r, z) \in \Omega_s. \quad (2)$$

Граничные условия. Дно тигля теплоизолировано

$$-k^c (\mathbf{n} \cdot \nabla T)|_{\partial\Omega_0} = 0. \quad (3)$$

Боковая стенка тигля поддерживается при постоянной температуре

$$T|_{\partial\Omega_1 \cup \partial\Omega_5} = T_c. \quad (4)$$

Из симметрии следует, что на оси

$$\left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=0} = 0. \quad (5)$$

Тигель и расплав, расплав и флюс, а также флюс и кристалл находятся в идеальном тепловом контакте.

Предполагается, что флюс является непрозрачным. На поверхности флюса происходит радиационный теплообмен с кристаллом и стенкой тигля

$$-k^e(\mathbf{n} \cdot \nabla T)|_{\partial\Omega_2} = \text{Rad}^e[T^4 - T_{\text{eq}}^4]|_{\partial\Omega_2}. \quad (6)$$

Эффективная температура T_{eq} в граничном условии (6) вычисляется по формуле

$$T_{\text{eq}}^4(M) = \int_{\partial\Omega_3} F_{\partial\Omega_2-\partial\Omega_3}(M, M')T^4(M')dz + \int_{\partial\Omega_5} F_{\partial\Omega_2-\partial\Omega_5}(M, M'')T^4(M'')dz, \\ M \in \partial\Omega_2, \quad M' \in \partial\Omega_3, \quad M'' \in \partial\Omega_5. \quad (7)$$

Здесь и далее угловые коэффициенты $F_{\partial\Omega_i-\partial\Omega_j}$ вычисляются аналитически, с помощью выражений представленных в работах [6, 7]. Температура на боковой поверхности кристалла определяется потоком излучения, падающим со стенки ампулы и поверхности флюса.

$$-k^s(\mathbf{n} \cdot \nabla T)|_{\partial\Omega_3} = \text{Rad}^s[T^4 - T_{\text{eq}}^4]|_{\partial\Omega_3}, \quad (8)$$

где

$$T_{\text{eq}}^4(M) = \int_{\partial\Omega_2} F_{\partial\Omega_3-\partial\Omega_2}(M, M')T^4(M')dr + \int_{\partial\Omega_5} F_{\partial\Omega_3-\partial\Omega_5}(M, M'')T^4(M'')dz, \\ M \in \partial\Omega_3, \quad M' \in \partial\Omega_2, \quad M'' \in \partial\Omega_5. \quad (9)$$

На верхнем торце кристалла задано следующее граничное условие

$$-k^s(\mathbf{n} \cdot \nabla T)|_{\partial\Omega_4} = \text{Rad}^s[T^4 - T_{\text{eq}}^4]|_{\partial\Omega_4}. \quad (10)$$

Здесь

$$T_{\text{eq}}^4(M) = \int_{\partial\Omega_5} F_{\partial\Omega_4-\partial\Omega_5}(M, M') T^4(M') dz, \quad M \in \partial\Omega_4, \quad M' \in \partial\Omega_5. \quad (11)$$

Условия на фронте кристаллизации. Температура на фронте кристаллизации равна температуре плавления. В безразмерном виде имеем

$$T(r, \zeta_0(r)) = 1. \quad (12)$$

Из закона сохранения внутренней энергии следует условие Стефана:

$$k^l(\mathbf{n} \cdot \nabla T)|_{z=\zeta_0(r)-} - k^s(\mathbf{n} \cdot \nabla T)|_{z=\zeta_0(r)+} = \text{Pe St} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_z). \quad (13)$$

Мениск. В ходе процесса расплав смачивает кристалл, поверхность жидкости искривляется, образуя мениск. Средняя кривизна мениска, поверхностное натяжение жидкости и сила тяжести связаны уравнением Лапласа для капиллярного давления [1]:

$$\zeta_1(t, r) = \frac{2}{\text{Bo}} \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right), \quad (14)$$

здесь R_1 и R_2 — главные кривизны мениска:

$$\frac{1}{R_1} = \frac{d\zeta_1/dr}{r[1 + (d\zeta_1/dr)^2]^{1/2}}, \quad \frac{1}{R_2} = \frac{d^2\zeta_1/dr^2}{[1 + (d\zeta_1/dr)^2]^{3/2}}. \quad (15)$$

Граничные условия для уравнения (14) имеют вид

$$\zeta_1(R) = \zeta_0(R), \quad \left. \frac{d\zeta_1}{dr} \right|_{r=R} = 0. \quad (16)$$

Большое число Бонда ($\text{Bo} = 290$) указывает на то, что форма мениска преимущественно определяется силой тяжести. Существенное искривление границы $\zeta_1(r)$ будет наблюдаться лишь вблизи поверхности кристалла.

Условием роста кристалла постоянного радиуса является равенство контакт-

ного угла равновесному:

$$\theta = \theta_{\text{eq}}. \quad (17)$$

Из равенства (17) следует условие, позволяющее определить радиус кристалла R :

$$\left. \frac{d\zeta_1}{dr} \right|_{r=R} = \text{tg}(\theta_{\text{eq}} - \pi/2). \quad (18)$$

Приближенное выражение для формы мениска. Определение формы мениска из уравнения (14) является отдельной трудоемкой задачей. Однако в работе [8] для случая малого контактного угла из уравнения (14) получены приближенные аналитические выражения, связывающие высоту мениска h , радиус кристалла R и величину контактного угла θ

$$h = \sqrt{\text{Bo}(1 - \cos \alpha) + (\text{Bo} \sin \alpha / 4R)^2} - \text{Bo} \sin \alpha / 4R, \quad \alpha = \pi/2 - \theta, \quad (19)$$

а также форму мениска, радиус кристалла и контактный угол

$$z = \zeta_1(r) - \text{приближенная формула: } r = f_{\text{men}}(z, R, \theta). \quad (20)$$

Конкретное выражение для f_{men} опущено в силу громоздкости (см. [8], формула (18)).

При заданных радиусе кристалла R и высоте мениска h реальный контактный угол θ может быть вычислен из уравнения (19) (соответствующий корень при фиксированных R , Pe и T_c обозначим $\theta(R, \text{Pe}, T_c)$). Таким образом, условие для определения радиуса кристалла (17) записывается в виде

$$\theta(R, \text{Pe}, T_c) = \theta_{\text{eq}}. \quad (21)$$

В работе [8] показано, что в диапазоне физических параметров, характерном для GaAs и рассматриваемого технологического процесса, результаты, полученные с помощью приближенных формул (19), (20), хорошо согласуются с численным решением уравнения (14).

3 Метод решения

Метод выпрямления фронта. Для решения задачи с внутренней границей, положение которой необходимо определить в ходе решения, применяется метод выпрямления фронта. В системе уравнений (1)–(14) выполняется замена независимых переменных (r, z) таким образом, чтобы в новой системе координат (ξ, η) положение границы раздела фаз было фиксировано и совпадало с некоторой координатной линией.

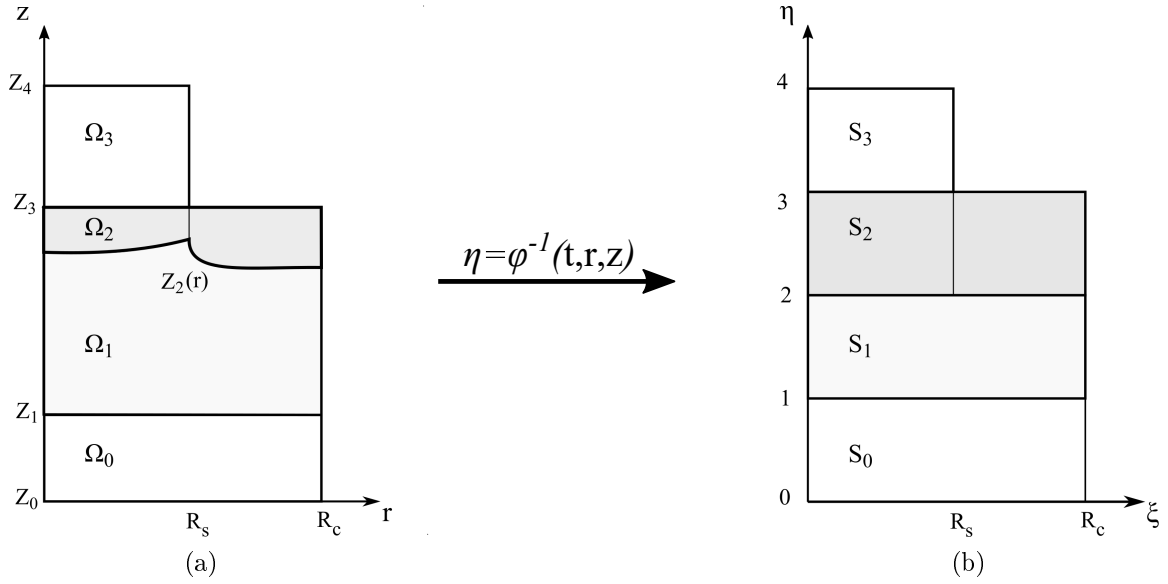


Рис. 3: Замена переменных: (а) физическая область; (б) расчетная область.

Преобразование системы координат осуществляется следующим образом. Физическая область, изображенная на рисунке 3а, разбивается на четыре под-области: тигель $\Omega_0 = (0 \leq r \leq R_c, Z_0 \leq z \leq Z_1)$; расплав $\Omega_1 = (0 \leq r \leq R_c, Z_1 \leq z \leq Z_2(r))$; флюс и часть кристалла, боковая поверхность которого смочена флюсом $\Omega_2 = (0 \leq r \leq R, Z_2 \leq z \leq Z_3)$; часть кристалла $\Omega_3 = (0 \leq r \leq R_s, Z_3 \leq z \leq Z_4)$. В результате замены переменных области $\Omega_\gamma, \gamma = 0, 1, 2, 3$ в новой системе координат отображаются на прямоугольники $S_\gamma, \gamma = 0, 1, 2, 3$ (рис. 3б), а границы областей — прямые $z = Z_0, z = Z_1, z = Z_2, z = Z_3, z = Z_4$ — переходят в прямые $\eta = 0, \eta = 1, \eta = 2, \eta = 3, \eta = 4$ соответственно. Связь между системами координат выражается соотношением

$$\xi = r, \quad \eta = (z - Z_\gamma)/l^\gamma + \gamma, \quad \gamma = 0, 1, 2, 3. \quad (22)$$

Здесь $l^\gamma = Z_{\gamma+1} - Z_\gamma$.

Уравнения (1), (2) и граничные условия (3)–(13) в преобразованной системе координат представлены в работе [9]. Диссипативные члены в новой системе координат содержат метрические коэффициенты, значения которых зависят от $\zeta_0(r)$, $\zeta_1(r)$.

Разностная схема Использование метода выпрямления фронта позволяет стандартным образом ввести в расчетной области прямоугольную сетку и с помощью метода конечных объемов построить разностную схему, в которой выполняется баланс внутренней энергии. Подробное описание построения разностной схемы приведено в работе [9].

Вычислительный алгоритм. Квазистационарная математическая модель позволяет определить радиус R , форму фронта $\zeta_0(r)$ и температуру $T(r, z)$ кристалла, выращенного при заданных скорости протяжки Re^* и температуре нагревателя T_c^* . Рассмотрим вычислительный алгоритм решения данной задачи.

В работе используется метод, состоящий из внутреннего и внешнего итерационных процессов:

- В ходе внутренних итераций при фиксированных значениях управляющих параметров (R^*, Re^*, T_c^*) из разностных аналогов нелинейных уравнений (1)–(13), (19), (20) с помощью метода Ньютона определяется поле температуры в области $T(r, z)$, положение межфазных границ $\zeta_0(r)$, $\zeta_1(r)$ и реальная величина контактного угла $\theta(R^*, Re^*, T_c^*)$. Итерации внутреннего цикла осуществляются следующим образом:

1. По известному с предыдущей итерации распределению температуры на поверхности кристалла, флюса и нагревателя, из уравнений (6)–(11) вычисляется эквивалентный поток излучения, падающий на границы $\partial\Omega_2$, $\partial\Omega_3$, $\partial\Omega_4$. (На первой итерации предполагается, что размерная температура на поверхности кристалла и флюса равна $0.95T_{ph}$.) Затем из разностных аналогов уравнений (1), (2), дополненных граничными условиями (3)–(13), вычисляется поле температуры внутри области Ω .
2. Форма фронта кристаллизации $z = \zeta_0(r)$ определяется в соответ-

ствии с новым положением изотермы, соответствующей температуре фазового перехода ($T = 1$). Для определения высоты мениска h вычисляется подъем тройной точки $\{R^*, \zeta_0(R^*)\}$ относительно верхней границы расплава.

3. По известным высоте мениска h и радиусу кристалла R^* из уравнения (19) определяется величина контактного угла $\theta(R^*, \text{Pe}^*, T_c^*)$. С помощью уравнения (20) вычисляется форма мениска.
4. Осуществляется пересчет метрических коэффициентов в уравнениях (1), (2).

Затем описанные выше шаги повторяются. Внутренний итерационный процесс ведется до сходимости метода Ньютона. Вектор неизвестных содержит поле температуры в узлах сетки, значения функций ζ_0 и ζ_1 . Как правило, внутренний итерационный процесс сходится за 5–7 итераций.

- Во внешнем цикле осуществляется поиск радиуса, обеспечивающего при фиксированных Pe^* и T_c^* выполнение условия (21). Для решения нелинейного уравнения (21) используется метод Ньютона:

$$\frac{\theta(R^k + \delta, \text{Pe}^*, T_c^*) - \theta(R^k, \text{Pe}^*, T_c^*)}{\delta} \Delta R = -[\theta(R^k, \text{Pe}^*, T_c^*) - \theta_{\text{eq}}],$$

$$R^{k+1} = R^k + \Delta R.$$

Здесь k — номер итерации, δ — шаг численного дифференцирования, значения $\theta(R^k + \delta, \text{Pe}^*, T_c^*)$ и $\theta(R^k, \text{Pe}^*, T_c^*)$ определяются численно, в ходе решения уравнений (1)–(13), (19), (20) во внутреннем цикле итерационного процесса. Итерационный процесс метода Ньютона ведется до сходимости. Расчеты показывают, что, как правило, метод Ньютона сходится за 7–10 итераций.

4 Результаты расчетов

Геометрическая конфигурация системы однозначно определяется объемом расплава V^l . Из закона сохранения массы для твердой и жидкой фаз имеем

$$m_0 = V^l \rho^l + V^s \rho^s,$$

где $m_0 = V_0 \rho^l$ — масса поликристаллической загрузки, $V^l \rho^l$ — масса расплава, $V^s \rho^s$ — масса кристалла.

Пусть $m_0 = 4$ кг, масса флюса составляет 0.5 кг. Радиус тигля $R_c = 7.75$ см, его высота $H_h = 12$ см, толщина нижнего торца $Z_1 = 2$ см. Применим рассмотренный численный алгоритм для изучения влияния скорости протяжки v_g и температуры нагревателя T_c на радиус монокристалла. В расчетах используются физические параметры расплава, кристалла, тигля и флюса, представленные в работах [2, 10, 11].

Влияние скорости протяжки на радиус кристалла. Изменение радиуса кристалла в ходе выращивания обусловлено сложным взаимодействием тепловых и поверхностных процессов на межфазной границе. Теплоперенос в системе определяет форму межфазной границы, положение тройной точки и реальный угол смачивания θ : в случае, когда $\theta > \theta_{eq}$, происходит разращивание кристалла, при $\theta < \theta_{eq}$ радиус кристалла уменьшается [8, 12]. В рамках квазистационарного приближения предполагается, что угол $\theta = \theta_{eq}$, поэтому форма кристалла определяется преимущественно переносом энергии в системе — количеством теплоты, поступающим к фронту из жидкой фазы, выделением энергии в ходе кристаллизации, отводом тепла через поверхность кристалла

$$k^l(\mathbf{n} \cdot \nabla T)|_{z=\zeta_0(r)-} - \text{Pe St}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_z) = k^s(\mathbf{n} \cdot \nabla T)|_{z=\zeta_0(r)+}. \quad (23)$$

Увеличение скорости протяжки приводит к тому, что удельное количество теплоты, выделяющееся на межфазной границе, также увеличивается. Поэтому, в соответствии с балансным соотношением для внутренней энергии (23), с увеличением скорости протяжки количество кристаллизующегося материала и, как следствие, радиус кристалла уменьшаются.

На рисунке 4 приведена зависимость радиуса кристалла от скорости протяжки (числа Пекле), полученная при $T_c = 1.045$, $V^1 = 0.75V_0$. Расчеты показывают, что с увеличением скорости протяжки радиус кристалла уменьшается. Зависимость $R(\text{Pe})/R(\text{Pe} = 0)$ довольно точно описывается функцией вида $A/(B + \text{Pe}^2)$. Полученные результаты согласуются с результатами, представленными в работе [1].

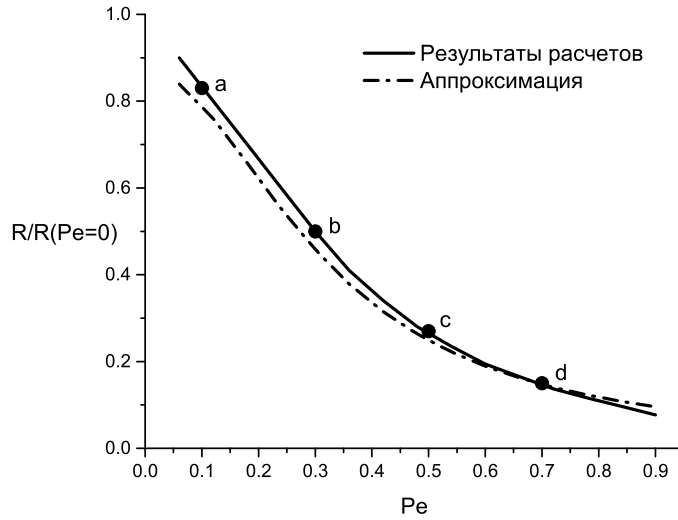


Рис. 4: Зависимость радиуса кристалла от скорости протяжки при $T_c = 1.045$. Точки, отмеченные маркерами, соответствуют результатам, приведенным на рисунке 5.

Стационарные распределения температуры в системе и формы межфазных границ в случае различных скоростей протяжки приведены на рисунке 5. Расчеты показывают, что с увеличением Pe растет кривизна фронта кристаллизации, увеличивается осевой градиент температуры в твердой фазе. Данные результаты согласуются с аналитическими оценками, представленными в работе [13].

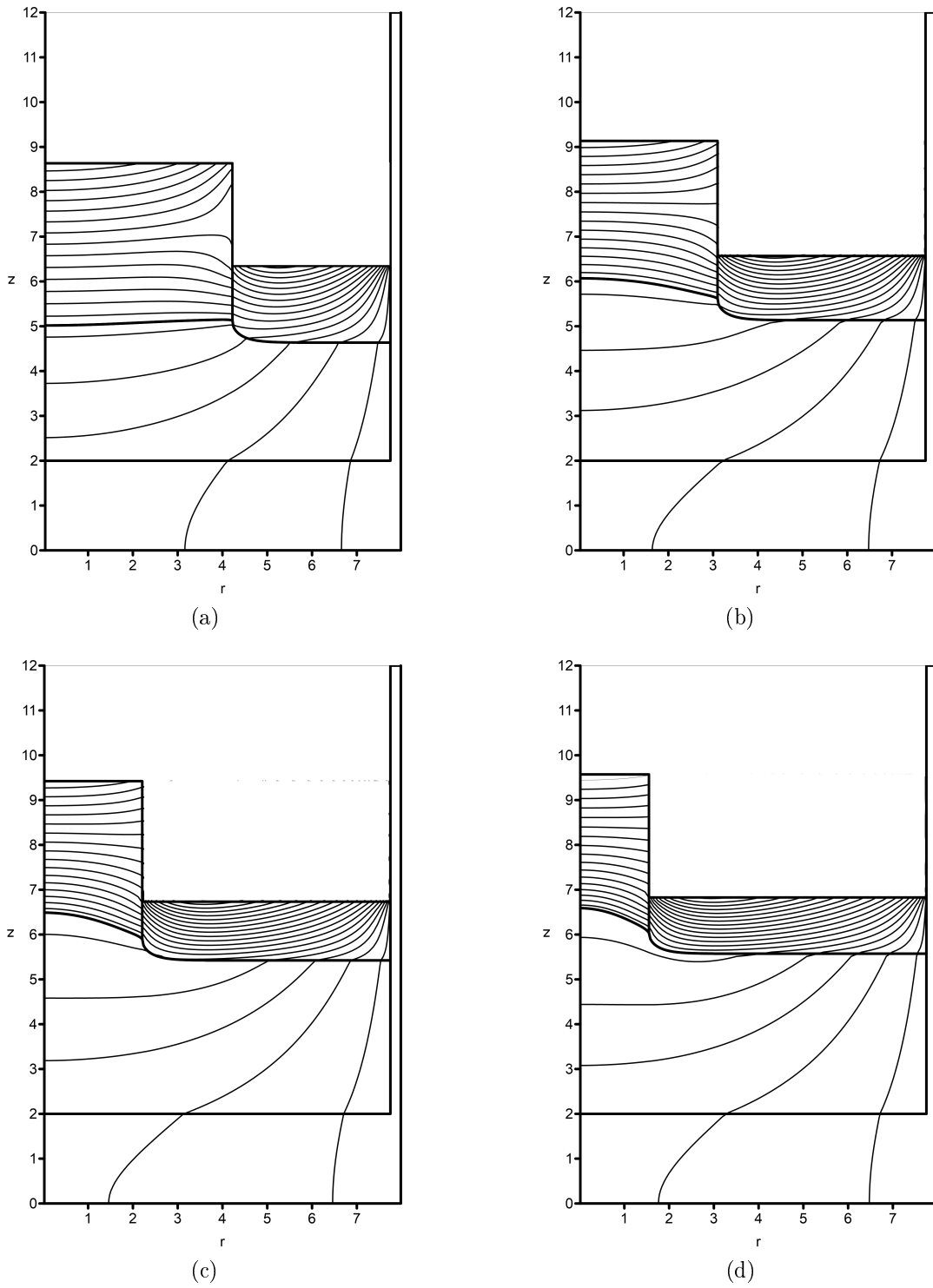


Рис. 5: Распределение температуры в области при $T_c = 1.045$ и различных значениях скорости протяжки: (a) $Pe = 0.1$; (b) $Pe = 0.3$; (c) $Pe = 0.5$; (d) $Pe = 0.7$.

Влияние температуры нагревателя на радиус кристалла. Для определения влияния температуры нагревателя на радиус кристалла была проведена серия расчетов при $Re = 0.1$, $V^1 = 0.75V_0$. Расчеты показывают, что существует температура $T_c = T^*$, соответствующая радиусу $R = R^*$, выше которой рассмотренная задача не имеет стационарного решения (Рис. 6). Точка (T^*, R^*) является точкой бифуркации в соответствующем фазовом пространстве. При $R > R^*$ для увеличения радиуса кристалла температуру нагревателя необходимо уменьшать: в таком случае количество теплоты, отводящееся через боковую стенку кристалла, увеличивается, что компенсирует возросшее выделение тепловой энергии на фронте кристаллизации (рис. 7b). При $R < R^*$ из-за малого радиуса кристалла отведение энергии от фронта ухудшается, поэтому температуру на боковой стенке ампулы также необходимо уменьшать (рис. 7a). Важно отметить, что из теории устойчивости следует, что решения, соответствующие $R < R^*$, являются неустойчивыми относительно малых возмущений поля температуры [14], и в реальности будет происходить разрастание кристалла до радиуса, соответствующего устойчивой ветви распределения температуры [5].

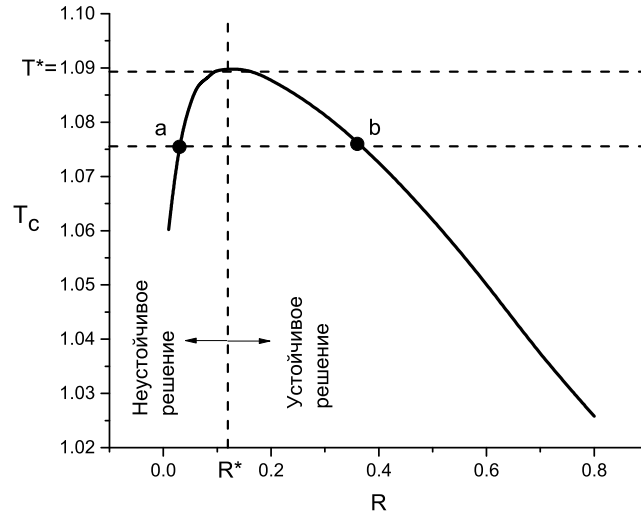


Рис. 6: Зависимость радиуса кристалла от температуры нагревателя при $Re = 0.1$. Точки, отмеченные маркерами, соответствуют результатам, приведенным на рисунке 7.

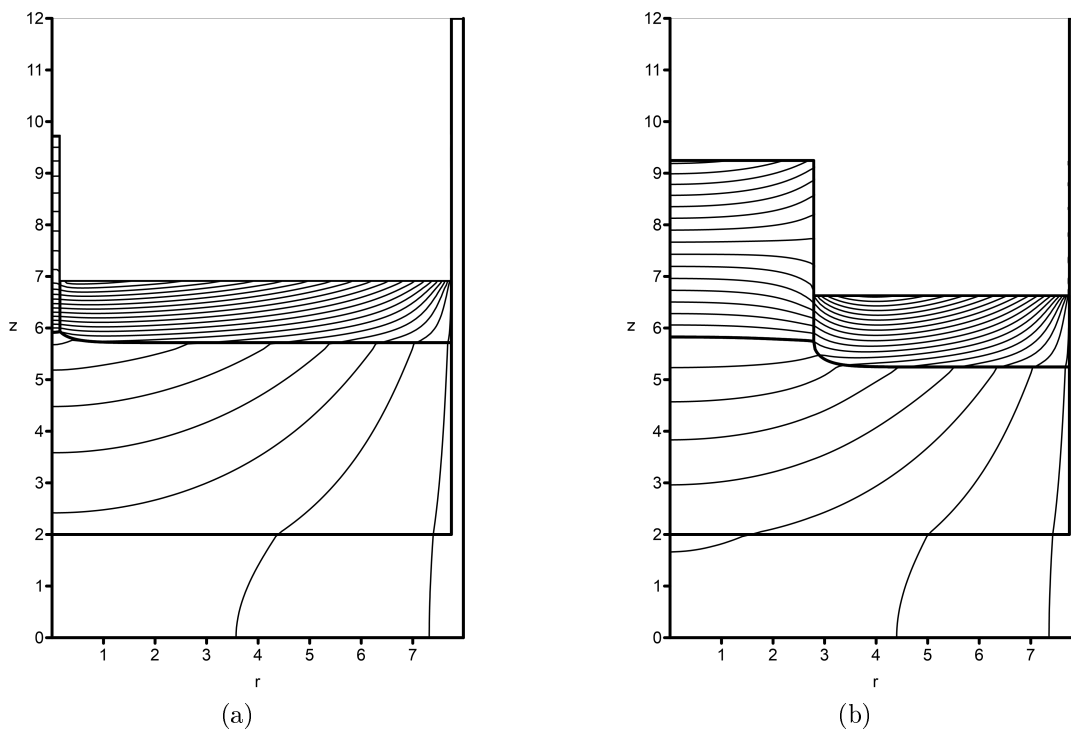


Рис. 7: Распределение температуры в области при $Pe = 0.1$ и $T_c = 1.075$: (a) $R = 0.02$; (b) $R = 0.36$.

5 Выводы

Рассмотренная в работе квазистационарная математическая модель процесса получения монокристаллов методом Чохральского позволяет изучать влияние управляющих параметров, таких как скорость протяжки и температура нагревателя, на форму кристалла и поле температуры внутри него. Несмотря на то, что математическая модель не учитывает ряд важных особенностей технологического процесса, полученные результаты расчетов на качественном уровне согласуются с существующими численными и экспериментальными данными.

Для корректного описания процессов переноса, протекающих внутри расплава и кристалла, необходимо с высокой точностью знать распределение температуры на поверхности тигля. Получить такие данные экспериментально из-за конструктивных особенностей установки, как правило, крайне трудно, детальный расчет нестационарных процессов переноса внутри теплового узла требует проведения длительных многочасовых расчетов. Квазистационарная матема-

тическая модель может быть использована для определения температуры на боковой поверхности тигля, обеспечивающей при фиксированной скорости протяжки рост кристалла заданного радиуса. В этом случае время расчета одного стационарного состояния на персональном компьютере не превысит нескольких секунд. Таким образом, рассмотренная математическая модель является эффективным инструментом предварительного анализа хода технологических процессов. Результаты расчетов, полученные с ее помощью, могут быть использованы при изучении нестационарных процессов переноса в системе в рамках более сложных двух- и трехмерных моделей роста монокристаллов.

Список литературы

1. Derby J., Brown R., Geyling F. et al. Finite element analysis of a thermal-capillary model for liquid encapsulated Czochralski growth // J. Electrochem. Soc. 1985. Vol. 132, no. 2. Pp. 470–482. <https://doi.org/10.1149/1.2113867>.
2. Derby J., Brown R. Thermal-capillary analysis of Czochralski and liquid encapsulated Czochralski crystal growth: I. Simulation // J. Crystal Growth. 1986. Vol. 74, no. 3. Pp. 605–624. [https://doi.org/10.1016/0022-0248\(86\)90208-3](https://doi.org/10.1016/0022-0248(86)90208-3).
3. Derby J., Brown R. Thermal-capillary analysis of Czochralski and liquid encapsulated Czochralski crystal growth: II. Processing strategies // J. Crystal Growth. 1986. Vol. 75, no. 2. Pp. 227–240. [https://doi.org/10.1016/0022-0248\(86\)90032-1](https://doi.org/10.1016/0022-0248(86)90032-1).
4. Derby J., Brown R. On the quasi-steady-state assumption in modeling Czochralski crystal growth // J. Crystal Growth. 1988. Vol. 87, no. 2. Pp. 251–260. [https://doi.org/10.1016/0022-0248\(88\)90172-8](https://doi.org/10.1016/0022-0248(88)90172-8).
5. Thomas P., Derby J., Atherton L. et al. Dynamics of liquid-encapsulated czochralski growth of gallium arsenide: Comparing model with experi-

- ment // J. Crystal Growth. 1989. Vol. 96, no. 1. Pp. 135–152. [https://doi.org/10.1016/0022-0248\(89\)90284-4](https://doi.org/10.1016/0022-0248(89)90284-4).
6. Srivastava R., Ramachandran P., Duduković M. Radiation view factors in Czochralski crystal growth apparatus for short crystals // J. Crystal Growth. 1986. Vol. 74, no. 2. Pp. 281–291. [https://doi.org/10.1016/0022-0248\(86\)90117-X](https://doi.org/10.1016/0022-0248(86)90117-X).
 7. Берлинер Л.Б., Гвелесиани Л.А. Численный расчет радиационного теплообмена для направленной кристаллизации CdZnTe // Вестник МИТХТ. 2010. Vol. 5. Pp. 13–18.
 8. Hurle D.T.J. Analytical representation of the shape of the meniscus in Czochralski growth // J. Crystal Growth. 1983. Vol. 63, no. 1. Pp. 13–17. [https://doi.org/10.1016/0022-0248\(83\)90421-9](https://doi.org/10.1016/0022-0248(83)90421-9).
 9. Gusev A.O., Shcheritsa O.V., Mazhorova O.S. Conservative finite volume strategy for investigation of solution crystal growth techniques // Computers & fluids. 2020. Vol. 202. Pp. 104501. <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2020.104501> .
 10. Motakef S. Thermoelastic analysis of GaAs in lec growth configuration: II. Temporal evolution of the stress field // J. Crystal Growth. 1988. Vol. 88, no. 3. Pp. 341–352. [https://doi.org/10.1016/0022-0248\(88\)90006-1](https://doi.org/10.1016/0022-0248(88)90006-1).
 11. Smirnova O.V., Kalaev V.V. 3D unsteady numerical analysis of conjugate heat transport and turbulent/laminar flows in LEC growth of GaAs crystals // Int. J. Heat Mass Transfer. 2004. Vol. 47, no. 2. Pp. 363–371. [https://doi.org/10.1016/S0017-9310\(03\)00404-6](https://doi.org/10.1016/S0017-9310(03)00404-6).
 12. Hurle D.T.J. Dynamics, stability and control of Czochralski growth // J. Crystal Growth. 1993. Vol. 128, no. 1. Pp. 15–25. [https://doi.org/10.1016/0022-0248\(93\)90290-D](https://doi.org/10.1016/0022-0248(93)90290-D).
 13. Srivastava R., Ramachandran P., Duduković M. Interface shape in Czochralski grown crystals: Effect of conduction and radia-

tion // J. Crystal Growth. 1985. Vol. 73, no. 3. Pp. 487–504.
[https://doi.org/10.1016/0022-0248\(85\)90012-0](https://doi.org/10.1016/0022-0248(85)90012-0).

14. Хакен Г. Синергетика. М.: Мир, 1980.

Содержание

1 Введение	3
2 Математическая модель	5
3 Метод решения	10
4 Результаты расчетов	13
5 Выводы	17
Список литературы	18