

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И МАТЕРИАЛОВ

SIMULATION OF PROCESSES AND MATERIALS

*Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2014. Т. 17, № 4. С. 257–267.  
ISSN 1609-3577. DOI: 10.17073/1609-3577-2014-4-257-267*

УДК 621.315.592:548.4

## РАСЧЕТНО–ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ НА ФОРМУ ФРОНТА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ГЕПТАДЕКАНА И ГАЛЛИЯ В МОДЕЛИ МЕТОДА ЧОХРАЛЬСКОГО

© 2014 г. Н. А. Вerezуб<sup>1</sup>, А. И. Простомолотов<sup>1</sup>,  
В. С. Бердников<sup>2</sup>, В. А. Винокуров<sup>2</sup>

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

<sup>2</sup>Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теплофизики  
им. С. С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук,  
просп. Академика Лаврентьева, д. 1, 630090, Новосибирск, Россия

Процессы конвективного теплопереноса и кристаллизации изучены на основе упрощенной, но единой расчетно–экспериментальной модели метода Чохральского, в которой использованы два вещества с температурами плавления, близкими к комнатным: одно (гептадекан) с низкой, другое (галлий) с высокой теплопроводностью. Благодаря прозрачности расплава гептадекана визуализированы структуры как самого течения расплава, так и его закристаллизовавшейся части в лабораторном эксперименте, что обеспечило расчетную модель данными для тестирования. На основе численных расчетов проведено параметрическое изучение структур течения, тепловых потоков на охлаждаемом диске и определена зависимость формы фронта кристаллизации для обоих веществ от режимов конвективного теплообмена: термогравитационной и смешанной (т. е. при дополнительном вращении кристалла) конвекции.

**Ключевые слова:** моделирование, кристаллизация, гидродинамика, теплоперенос, модель метода Чохральского.

### Введение

В настоящее время математическое моделирование стало важной составляющей в развитии технологий и оборудования для выращивания кристаллов. Наибольшие успехи по глубине охвата физических процессов и в преодолении вычислительных трудностей достигнуты при моделировании конвективного тепло– и массопереноса при выращивании кристаллов из расплава методом Чохральского. С помощью современных сопряженных математических моделей определяют тепловые условия и примесный состав расплава и кристалла, изменения формы фронта кристаллизации (**ФК**) и напряженно–деформированное

состояние кристалла. Эти параметры рассчитывают с учетом сложного радиационного теплообмена, геометрии и характеристик материала для конкретных тепловых узлов, используемых при выращивании кристаллов. Эти модели реализуют с помощью современных программных комплексов. Однако адекватное их применение сталкивается с тем, что они перегружены большим числом недостаточно точно известных физических коэффициентов для применяемых в моделях конкретных процессов и неопределенностью задания настроечных расчетных параметров для обеспечения устойчивости и точности счета. Верификация результатов счета по таким моделям проводится недостаточно подробная.

**Вerezуб Наталия Анатольевна**<sup>1</sup> — старший научный сотрудник, канд. физ.–мат. наук, e-mail: verezub@ipmnet.ru; **Простомолотов Анатолий Иванович**<sup>1</sup> — ведущий научный сотрудник, доктор техн. наук, e-mail: prosto@ipmnet.ru; **Бердников Владимир Степанович**<sup>2</sup> — заведующий лабораторией, доктор физ.–мат. наук, e-mail: berdnikov@itp.nsc.ru; **Винокуров Виктор Александрович**<sup>2</sup> — научный сотрудник, канд. физ.–мат. наук.

Цель работы — детальное изучение процессов конвективного теплопереноса и кристаллизации на более простой, но единой расчетно-экспериментальной модели кристаллизации веществ (гептадекана и галлия) с температурами плавления, близкими к комнатным, методом Чохральского. Это является развитием более ранних исследований авторов без учета процесса кристаллизации с использованием этилового спирта в качестве рабочей среды [1].

Расчетная модель разработана на основе как базовой версии пакета программ *AnsysFluent* [2], так и ряда написанных авторами пользовательских *UDF*-подпрограмм на языке  $C^{++}$ , позволивших кардинально расширить возможности этого пакета для конкретных задач (например, для учета вращения кристаллизующейся фракции). Эксперименты были проведены на лабораторной модели с использованием кристаллизующихся при комнатной температуре веществ.

### Лабораторная установка

Лабораторная установка аналогична той, которую использовали в экспериментах с некристаллизующейся средой — этиловым спиртом [3]. Схема установки показана на рис. 1.

Нарушение теплового баланса на свободной поверхности практически исключено. Для этого вал  $\delta$  и установленный на нем диск (модель кристалла) теплоизолированы слоем пенопласта  $10$ . Крышка  $4$ , изолирующая слой воздуха над свободной поверхностью от окружающей среды, также изготовлена из плотного пенопласта. Кроме того, дополнительно использовали поролоновую изоляцию сверху. Среднюю температуру системы тигель—жидкость—кристалл поддерживали максимально близкой к комнатной. Критерием отсутствия испарения и теплоотдачи со свободной границы служило отсутствие градиента температуры по нормали к поверхности со стороны жидкости. Для этого специально измеряли профили температуры в жидкости. Таким образом, были приняты меры для исключения испарения и конденсации рабочей жидкости на холодной поверхности вала и модели кристалла (диске). В результате свободная граница оставалась практически адиабатической.

Для визуализации течения использовали мелкие частицы алюминия (чешуйчатые частицы размером  $\sim 10\text{—}15$  мкм). Все наблюдения были сделаны в центральном поперечном сечении с помощью плоского светового луча малой толщины ( $1\text{—}2$  мм). Для измерений полей скорости использовали цифровые видеокамеры. Видеофильмы вводили в компьютер и обрабатывали с помощью оригинальных программ. Компьютерная обработка позволила получать векторные поля скорости (или поля мгновенных траекторий движения визуализированной жидкости), что аналогично фотосъемке с высокой выдержкой.

Горячие спаи константан–нихромовых термопар зонда толщиной  $\sim 0,1$  мм были стравлены до  $10\text{—}15$  мкм; их монтировали для регистрации температуры в заданных точках расплава, включая тонкие пограничные слои. Использовали специальную методику для регистрации статистических данных (для  $N = 2048$  шагов по времени) с интервалами между измерениями  $\sim 0,2\text{—}0,5$  с из экспериментальных записей температуры. На дне и боковых стенках тигля установлено 7 термопар, на модели кристалла — 3 термопары для контроля распределения температуры на стенках в радиальном и азимутальном направлениях. Средние перепады температуры между стенками тигля и моделями кристаллов использовали для определения чисел Грасгофа.

В отличие от метода Чохральского, реализуемого для роста кристаллов, в рассмотренной лабораторной установке вытягивание кристалла не происходит. Однако создаются такие условия охлаж-

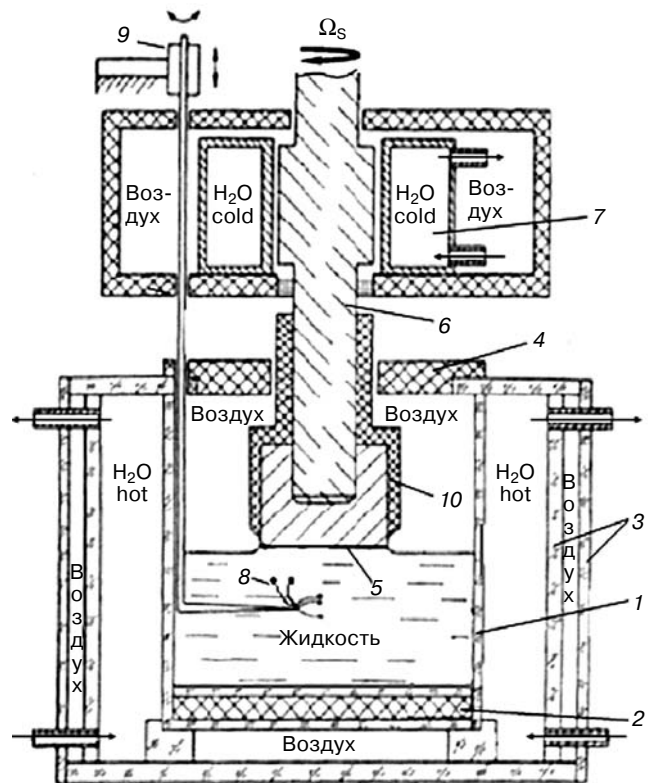


Рис. 1. Схема лабораторной установки для проверки расчетной модели:

- 1 — цилиндрический кварцевый тигель; 2 — адиабатическое дно; 3 — закрытая прозрачная нагреваемая камера с двойными оргстеклянными боковыми стенками; 4 — пенопластовый верхний экран; 5 — сменные модели дисков; 6 — массивный вал; 7 — закрытая охлаждаемая камера; 8 — термопарный зонд; 9 — механизм для перемещения зонда; 10 — слой теплоизоляции из пенопласта высокой плотности
- Fig. 1. Schematic of the Laboratory Setup for Simulation model Checking:
- (1) Cylindrical Quartz Crucible, (2) Adiabatic Bottom, (3) Isolated Transparent Heating Chamber with Double-Layer Plexiglass Side Walls, (4) Plastic Foam Top Screen, (5) Replaceable Disc Models, (6) Massive Shaft, (7) Isolated Cooling Chamber, (8) Thermocouple Probe, (9) Probe Movement Gear, (10) High Density Plastic Foam Heat Insulation Layer

дения вала 6, чтобы на внешней поверхности диска 5 поддерживалась заданная температура  $T_S < T_M$  (где  $T_M$  — температура плавления). Таким способом моделируется не направленная кристаллизация вверх вдоль оси, а объемная — в область расплава. Область расплава заполняется кристаллизующейся при комнатной температуре жидкостью — гептадеканом или галлием.

В расплавленном состоянии гептадекан является прозрачным, но его прозрачность исчезает по мере отвердевания. Граница расплава и закристаллизовавшейся фракции является достаточно отчетливой и может быть зафиксирована цифровой видеокамерой. Кроме этого, может быть измерена температура в ряде контрольных точек с помощью термопарного зонда 8.

Расплав галлия непрозрачный, поэтому для него проводили только измерения температуры. Наибольший интерес представлял тепловой поток из расплава в кристалл для различных режимов конвекции.

Геометрия рабочей зоны была следующей:  $R_C = 0,1475$  м — радиус цилиндрического тигля,  $R_S = 0,0536$  м — радиус диска,  $H$  — изменяемая высота расплава.

**Математическая постановка задачи**

Математическая модель учитывает все упомянутые выше особенности установки для физического моделирования. Для расчетов использовали формулировку математической модели метода Чохральского в гидродинамическом приближении. В отличие от предыдущих ее версий [1], эта модель учитывает кристаллизацию расплава.

Схема модели (рис. 2) включает цилиндрический тигель ( $R_C = 0,1475$  м,  $H = 0,1032$  м,  $H/R_C = 0,7$ ), заполненный расплавом, который частично закрыт сверху соосным диском ( $R_S = 0,0536$  м,  $R_C/R_S = 2,75$ ). Модель дополнена датчиками температуры ( $z \times r$ ) [м]: 11 — (0,0516, 0,0134), 12 — (0,0516, 0,1425), 13 — (0,005, 0,0134).

В отличие от модели для изучения конвекции в спирте, реализованной ранее в приближении Буссинеска, в рассматриваемом случае с учетом процесса кристаллизации в расчетах задается температурное изменение плотности  $\rho(T)$ , теплопроводности  $\lambda(T)$  и динамической вязкости жидкости  $\mu(T)$ . Предполагали, что между кристаллом (твердой фракцией) и расплавом (жидкой фракцией) существует промежуточная фракция — область кристаллизации при значениях температуры  $T$ , больших температуры солидуса  $T_{sol}$  и меньших температуры ликвидуса  $T_{liq}$ , в которой задается линейное изменение доли жидкой фракции посредством коэффициента

$$\beta = \frac{T - T_{sol}}{T_{liq} - T_{sol}}$$

Для твердой фракции и области кристаллизации при  $T < T_{liq}$  уравнение теплопереноса относительно энтальпии  $h = C_p T$  имеет следующий вид:

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \frac{V_p \partial(\rho h)}{\partial z} = \nabla(\lambda \nabla T) + Q,$$

где  $C_p$  — теплоемкость, задается постоянной величиной;  $V_p$  — постоянная скорость вытягивания кристалла вдоль оси  $z$ ;  $Q = \beta H_L$  — объемный источник, который учитывает выделение скрытой теплоты кристаллизации  $H_L$  в области кристаллизации; в кристалле при  $T < T_{sol}$  коэффициент  $\beta = 0$ .

Для жидкой фракции уравнение теплопереноса можно записать в виде

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \nabla(\rho h \mathbf{V}) = \nabla(\lambda \nabla T),$$

а уравнения движения и неразрывности жидкости — в виде

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{V})}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{V} \mathbf{V}) = -\nabla p + \nabla(\mu \nabla \mathbf{V}) + \rho \mathbf{g};$$

$$\text{div}(\rho h \mathbf{V}) = 0,$$

где  $\mathbf{V}$  — вектор скорости;  $p$  — давление,  $\mathbf{g}$  — вектор гравитации.

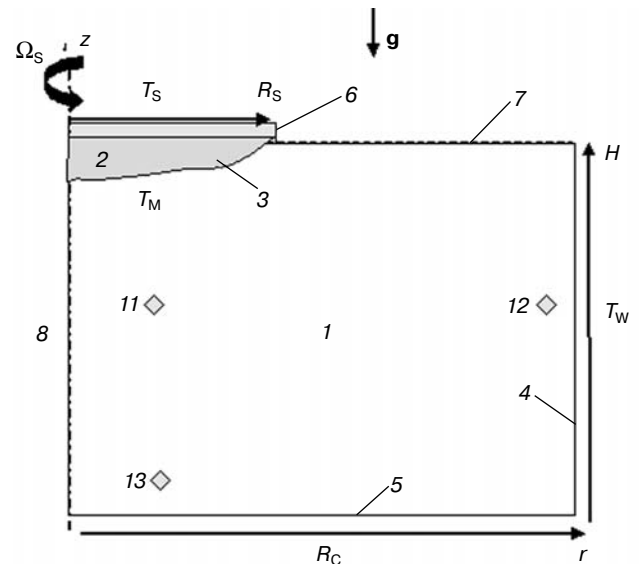


Рис. 2. Схема расчетной модели метода Чохральского: 1 — модельный материал в расплавленном состоянии при комнатной температуре; 2 — закристаллизовавшаяся часть материала, контактирующая с охлаждаемым диском; 3 — ФК при температуре плавления  $T_M$ ; 4 — термостатированная до температуры  $T_W$  боковая стенка тигля; 5 — теплоизолированное дно тигля; 6 — термостатированный до температуры  $T_S < T_W$  соосный с тиглем диск, частично закрывающий поверхность расплава; 7 — свободная теплоизолированная поверхность расплава; 8 — ось симметрии; 11–13 — датчик температуры

Fig. 2. Schematic of the Czochralsky Method Simulation Model: (1) Simulated Molten Material at Room Temperature, (2) Solidified Area in Contact with Cooled Disc, (3) Shape of Solidification Front at Melting Point  $T_M$ , (4) Crucible Side Wall Stabilized at  $T_W$ , (5) Heat Insulated Crucible Bottom, (6) Disc Coaxial with Crucible and Partially Covering Melt Surface, Stabilized at  $T_S < T_W$ , (7) Free Heat Insulated Melt Surface, (8) Symmetry Axis, (11–13) Temperature Gage

Согласно данной модели, в тигле находится расплавленная фракция 1 кристаллизующегося при температуре  $T_M$  материала. Его расплавленное состояние обеспечивают нагревом боковой стенки тигля 4 до температуры  $T_W > T_M$ . Предполагают, что дно тигля 5 и свободная поверхность расплава 7 адиабатические. Центральная часть поверхности расплава закрыта жестким диском, соосным с тиглем. На всей поверхности охлаждаемого диска 6 поддерживается температура  $T_S < T_M$ . Диск 6 может вращаться со скоростью  $\Omega_s$ , и на расплав действует сила тяжести  $g$ . Охлаждение диска приводит к кристаллизации расплавленного материала под поверхностью диска с образованием затвердевшей области 2.

Для регистрации изменений температурного поля в процессе численного эксперимента в расплав помещены три датчика 11–13, с которых записываются временные зависимости температуры и скорости расплава в данных точках. Затем эти записи обрабатываются программами спектрального анализа.

В процессе расчетов изучают форму ФК 3 в зависимости от режимов тепловой конвекции, изменяемых с помощью задания конкретных значений температуры ( $T_W, T_S$ ) и скорости вращения диска  $\Omega_s$ . Для конкретного исследуемого материала (гептадекан, галлий) задается температура кристаллизации  $T_M$ .

Процессы кристаллизации исследовали для двух материалов, кристаллизующихся при темпе-

ратуре, близкой к комнатной (гептадекан и галлия с  $T_M$ , составляющими 295 и 302,8 К соответственно). Эти процессы были рассчитаны в двух режимах конвективного теплопереноса:

- при отдельном действии гравитационно-капиллярной тепловой конвекции;
- при ее совместном действии с вращением кристалла со скоростью  $\Omega_s$ .

При работе с галлием в условиях комнатного эксперимента (без вакуумной камеры) на свободной поверхности расплава 7 образуется оксидная пленка, которая препятствует возникновению термокапиллярной конвекции. Поэтому в расчетах ее не учитывали.

В таблице приведены теплофизические параметры материалов (в основном, взяты из справочника [4]) и расчетные гидродинамические критерии подобия.

### Формы фронта кристаллизации в различных режимах тепловой конвекции

Нагрев боковой стенки тигля вызывает в гравитационном поле  $g$  тепловую конвекцию, при которой нагреваемый расплав движется вверх вдоль этой стенки к охлаждаемому диску. Это движение усиливается действием термокапиллярных сил на свободной поверхности расплава. Вблизи диска происходит кристаллизация расплава с образованием твердой фракции 2 (см. рис. 2), объем и форма которой зависят от режима конвекции.

В лабораторном эксперименте [5] был рассмотрен режим тепловой конвекции в гептадекане при следующих задаваемых температурах:  $T_S = 292,53$  К,  $T_W = 295,9$  К, который был использован в данной работе для верификации результатов математического моделирования. Анализировали формирование формы ФК. В расчетах форма ФК определялась по изотерме солидуса  $T_{sol}$ . При разности температур между боковой стенкой и диском  $\Delta T = 3,37$  К значения критериев дано в таблице.

В результате расчетов было зафиксировано одновихревое стационарное течение (рис. 3, а). Модуль скорости достигает максимума  $V_m = 1,01 \cdot 10^{-2}$  м/с в «опускном» течении вблизи оси. Однако подъемное течение вблизи боковой стенки тигля происходит существенно медленнее ( $V_m \approx 5,1 \cdot 10^{-4}$  м/с). Возникает вертикальная стратификация температурного поля, характеризующаяся радиальной температурной однородностью и тем, что верхние приповерхностные слои расплава значительно более прогреты, чем его придонные слои. Основная неоднородность температурного поля возникает в подкристалльной области, где охлаждающийся расплав стекает вниз вдоль ФК. При этом изотерма  $T_{sol}$  (см. рис. 3, б) и фото ФК, сделанное на лабораторной установке (см. рис. 3, в), удовлетворительно согласуются по выпуклости в расплав ФК.

### Теплофизические параметры и критерии подобия

[Thermophysical Parameters and Identity Criteria]

Параметр	Гептадекан	Галлий
$T_M$ , К	295	302,8
$\rho$ , кг/м <sup>3</sup>	787 (273 К) 778 (295 К) 769 (303 К)	5904 (298 К) 6093 (303 К)
$\beta_T$ , 1/К	$1,17 \cdot 10^{-3}$	$1,21 \cdot 10^{-3}$
$\nu$ , м <sup>2</sup> /с	$5,187 \cdot 10^{-6}$ (295 К)	$3,24 \cdot 10^{-7}$
$\sigma$ , Н/м	0,0281 (295 К) 0,0214 (373 К)	0,706 (323 К), 0,705 (373 К)
$\partial\sigma/\partial T$ , Н/(м · К)	$8,38 \cdot 10^{-5}$	$2 \cdot 10^{-5}$
$\lambda$ , Дж/(с · м · К)	0,1368 (295 К) 0,1319 (313 К)	28,1 (300 К) 26 (304 К)
$C_p$ , Дж/(кг · К)	2247	373
$H_L$ , Дж/кг	$3,2 \cdot 10^5$	$0,8 \cdot 10^5$
$Pr = \nu C_p / \lambda$	66,37	0,026
$Gr = g \beta_T R_S^3 \Delta T / \nu^2$	$2,21 \cdot 10^5$	$7,60 \cdot 10^7$
$Mn = (\partial\sigma/\partial T) R_S C_p \Delta T / \nu \lambda$	$4,79 \cdot 10^4$	—
$Re = R_S^2 \Omega_s / \nu$	$5,54 \cdot 10^2$	$8,0 \cdot 10^3$

Обозначения:  $\beta_T$  — объемное тепловое расширение;  $\nu$  — вязкость кинематическая;  $\sigma$  — поверхностное натяжение;  $\partial\sigma/\partial T$  — поверхностное тепловое расширение;  $\lambda$  — теплопроводность;  $C_p$  — теплоемкость;  $H_L$  — теплота плавления;  $Mn$  — число Марангони.

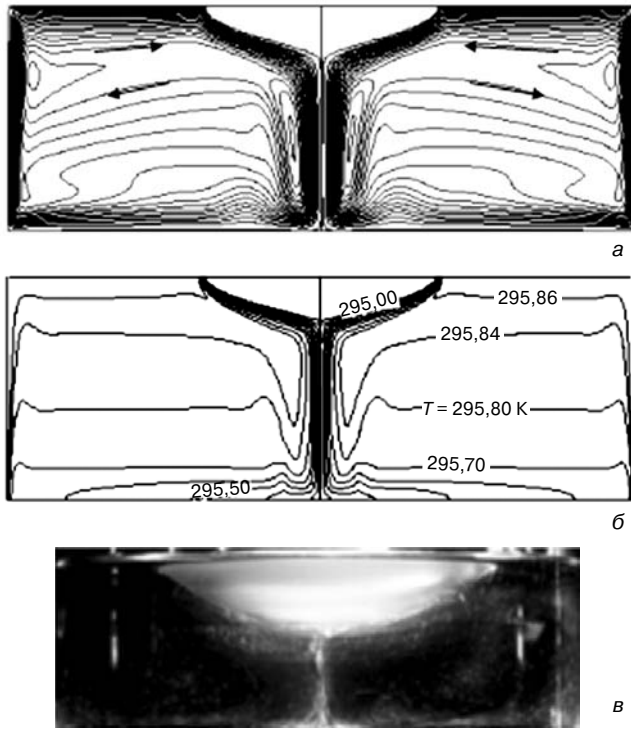


Рис. 3. Кристаллизация гептадекана при тепловой конвекции ( $T_S = 292,53$  К,  $T_W = 295,9$  К,  $Gr = 2,21 \cdot 10^5$ ): а — линии тока; б — изотермы; в — фото закристаллизовавшейся части (светлая область)

Fig. 3. Heptadecane Solidification for Heat Convection ( $T_S = 292,53$  K,  $T_W = 295,9$  K,  $Gr = 2,21 \cdot 10^5$ ): (a) flow curves, (b) isothermal curves, (c) solidified portion image (bright area)

Интерес представляет исследование возможности управления формой ФК. С этой целью были рассчитаны формы ФК гептадекана для разных режимов тепловой конвекции:

- в зависимости от числа  $Gr$ ;
- при вариации разности температур  $\Delta T$ .

В первом случае при заданной разности температур  $\Delta T = 3,37$  К между боковой стенкой тигля ( $T_W = 295,9$  К) и диском ( $T_S = 292,53$  К) проведены расчеты для разных значений числа Грасгофа  $Gr$  в диапазоне  $22,1—2,21 \cdot 10^5$  (рис. 4). Анализ результатов расчета (см. рис. 4) показал, что при самом малом значении числа Грасгофа (кривая 1) скорость движения расплава незначительная, и перенос тепла осуществляется в режиме теплопроводности, а твердая фаза охватывает всю центральную часть материала. Увеличение числа Грасгофа приводит к постепенному уменьшению вертикального и радиального размера кристалла (кривые 2—5), причем кривая 5 соответствует данным рассмотренного выше теста. Эти результаты качественно согласуются с экспериментальными данными, полученными ранее [6].

Расчет, проведенный при другой разности температур  $\Delta T = 1,6$  К и  $Gr = 1,1 \cdot 10^5$  (см. рис. 4, кривая 6), соответствовал температуре на боковой стенке тигля  $T_W = 295,9$  К и на диске  $T_S = 294,3$  К. Можно заметить, что этот режим отличается от предыдущих (кривые 1—5) режимов некоторым повышением темпе-

ратуры охлаждающего диска, однако это значительно влияет на спрямление формы ФК (кривые 5 и 6).

Таким образом, для рассматриваемой постановки задачи можно сделать следующий вывод. На форму ФК влияет не только интенсивность тепловой конвекции, зависящая от числа  $Gr$  и определяемая разностью температур между нагреваемой боковой стенкой тигля  $T_W$  и температурой кристаллизации  $T_M$ , но и температура охлаждаемого диска  $T_S$ .

Интерес представляют также закономерности изменения формы ФК для материалов с существенно более высокой теплопроводностью, чем гептадекан. Для такого модельного вещества были проведены расчеты с увеличенным в  $10^3$  раз по сравнению с гептадеканом коэффициентом теплопроводности в твердой и жидкой фазах. При этом число Прандтля  $Pr$  для расплава уменьшилось до 0,066 и стало соответствовать значению, характерному для расплавов металлов и полупроводников. Формы ФК, линии тока и изотермы в расплаве такого модельного вещества показаны на рис. 5. Они были рассчитаны для примерно тех же режимных параметров, что и для гептадекана: при  $\Delta T = 3,37$  К,  $T_W = 295,9$  К,  $T_S = 292,53$  К и примерно в том же диапазоне чисел  $Gr$ :  $380—3,8 \cdot 10^5$ .

Однако можно заметить некоторые отличия в форме ФК для близких режимов тепловой конвекции. Например, в модельном веществе при большем числе  $Gr$  (см. рис. 5, а) сохраняется форма твердой фазы, охватывающая всю центральную часть тигля, а при  $Gr = 3,8 \cdot 10^5$  (см. рис. 5, в) объем кристалла существенно больше, чем для гептадекана (см. рис. 4, кривая 5). Это позволяет сказать, что зависимость формы ФК от конвекции и теплопереноса в расплаве для веществ с большим коэффициентом теплопроводности (металлов, полупроводников) существенно ниже, чем для органических и оксидных веществ с низкой теплопроводностью.

По результатам расчетов сделаны количественные обобщения. Графики наиболее важных характе-

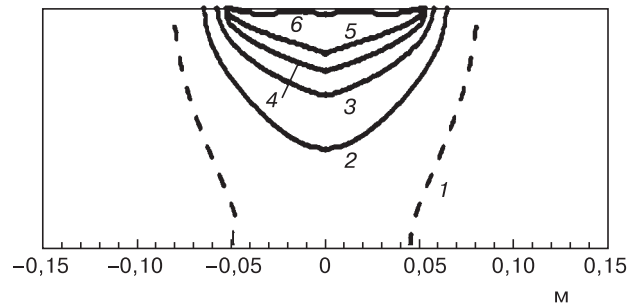


Рис. 4. Формы ФК гептадекана в разных режимах тепловой конвекции при  $\Delta T = 3,37$  К ( $T_W = 295,9$  К,  $T_S = 292,53$  К) (1—5) и  $\Delta T = 1,6$  К ( $T_W = 295,9$  К,  $T_S = 294,3$  К) (6) и разных числах  $Gr$ : 1 — 22,1; 2 — 221; 3 — 2210; 4 —  $2,21 \cdot 10^4$ ; 5 —  $2,21 \cdot 10^5$ ; 6 —  $1,1 \cdot 10^5$

Fig. 4. Heptadecane Solidification Front Shapes for Different Heat Convection Modes at  $\Delta T = 3,37$  K ( $T_W = 295,9$  K,  $T_S = 292,53$  K) (1—5) and  $\Delta T = 1,6$  K ( $T_W = 295,9$  K,  $T_S = 294,3$  K) (6) and different  $Gr$ : 1 — 22,1; 2 — 221; 3 — 2210; 4 —  $2,21 \cdot 10^4$ ; 5 —  $2,21 \cdot 10^5$ ; 6 —  $1,1 \cdot 10^5$

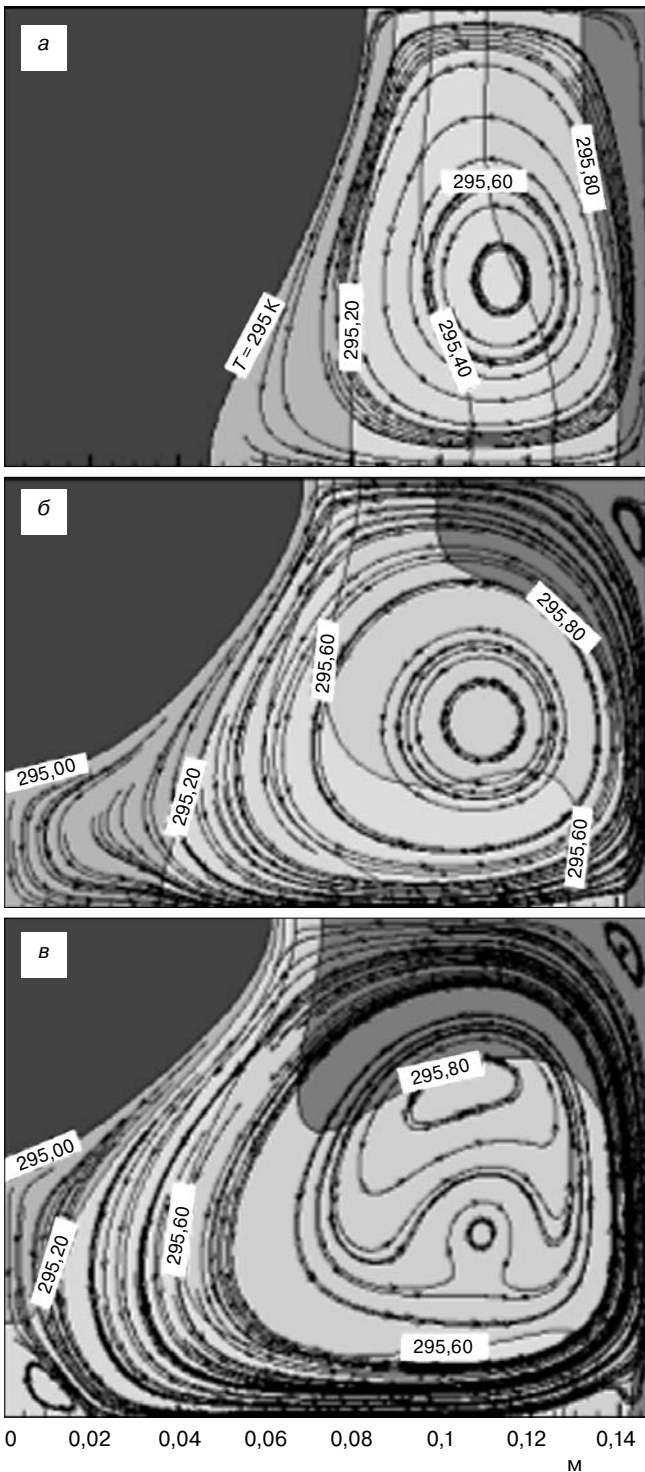


Рис. 5. Форма ФК, линии тока и изотермы в расплаве модельного вещества с малым числом Прандтля ( $Pr = 0,066$ ) при  $\Delta T = 3,37$  К ( $T_W = 295,9$  К,  $T_S = 292,53$  К) и разных числа Gr: а – 380; б – 3800; в –  $3,8 \cdot 10^5$   
 Fig. 5. Solidification Front Shapes, Flow Curves and Isothermal Curves for Model Material Melt with Low Prandtl Number ( $Pr = 0.066$ ) at  $\Delta T = 3.37$  K ( $T_W = 295.9$  K,  $T_S = 292.53$  K) and different Gr: (a) 380; (b) 3800; (c)  $3.8 \cdot 10^5$

ристик были построены в зависимости от числа Gr для различных температур охлаждаемого диска  $T_S$ , а также для больших и малых чисел Pr. Эти графики приведены на рис. 6 для величины выпуклости ФК в расплав  $\Delta$  (а) и теплоотдачи на диске, выраженной

через относительную величину интегрального числа Нуссельта Nu (б), которую вычисляли как отношение интегрального потока тепла из кристалла в диск при конкретном числе Gr к его величине в режиме теплопроводности [5].

Можно отметить, что выпуклость ФК уменьшается при увеличении числа Gr (см. рис. 6). Ее большие значения соответствуют меньшему числу Pr (см. кривые 1 и 3). Например, при  $Gr = 10^4$  ее значения отличаются в 2,5 раза:  $\Delta = 0,035$  м для большого числа  $Pr = 66,37$  и  $\Delta = 0,087$  м для малого числа  $Pr = 0,066$ .

Как было отмечено выше (см. рис. 5, кривая б), изменение температуры охлаждаемого диска  $T_S$  приводит к существенному уменьшению выпуклости ФК. При  $Gr = 10^5$  и большом числе Pr ее значения отличаются в 5 раз:  $\Delta = 0,025$  м для  $T_S = 292,53$  К и  $\Delta = 0,005$  м для  $T_S = 294,3$  К (см. для сравнения кривую 1 и точку 2 на рис. 6, а).

В рассматриваемой модели источником притока тепла в расплав является нагреваемая боковая стенка тигля, а сток тепла происходит на охлаждаемом

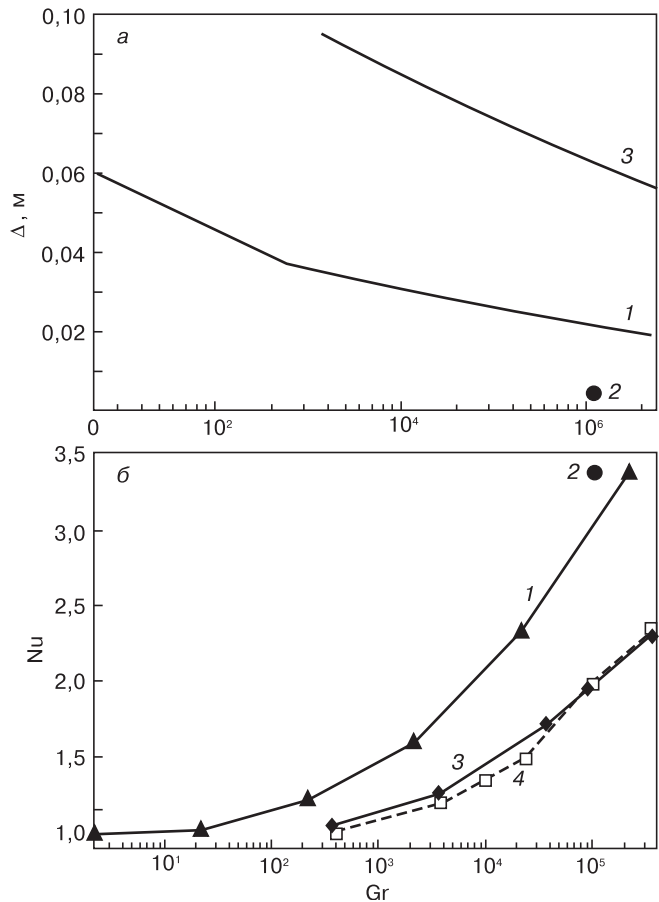


Рис. 6. Зависимости величины выпуклости ФК в расплав  $\Delta$  (а) и числа Nu (б) от числа Gr при больших и малых значениях числа Pr:  
 1 –  $Pr = 66,37$ ,  $T_W = 292,53$  К; 2 –  $Pr = 66,37$ ,  $T_W = 294,23$  К; 3 –  $Pr = 0,066$ ,  $T_W = 292,53$  К; 4 –  $Pr = 0,050$  [5]  
 Fig. 6. (a) Solidification Front Convexity Towards Melt  $\Delta$  and (b) Nu Number as Functions of Gr for High and Low Pr: 1 –  $Pr = 66.37$ ,  $T_W = 292.53$  K; 2 –  $Pr = 66.37$ ,  $T_W = 294.23$  K; 3 –  $Pr = 0.066$ ,  $T_W = 292.53$  K; 4 –  $Pr = 0.05$  [5]

диске. Расчеты проводили до момента установления теплового баланса, когда интегральный поток втекающего тепла на боковой стенке незначительно (не более чем на 5 %) отличался от интегрального стока тепла на диске. На рис. 6, б показано изменение относительной величины интегрального стока тепла на диске (числа  $Nu$ ), полученное в результате нормировки исходной величины теплового потока для конкретного числа  $Gr$  на аналогичное его значение для режима теплопроводности.

Можно отметить, что сток тепла растет с увеличением числа  $Gr$ . Причем этот рост происходит существенно быстрее для большего числа  $Pr$  (см. для сравнения рис. 6, б, кривые 1, 3 и 4). При  $Gr = 10^5$  эти значения отличаются примерно в 1,7 раза ( $Nu = 3,1$  для  $Pr = 66,37$  и  $Nu = 1,8$  для  $Pr = 0,066$ ). Согласно работе [5], данные для кривой 4 были получены при малом числе  $Pr = 0,05$ , они хорошо согласуются с результатами данной работы при малом числе  $Pr = 0,066$  (см. рис. 6, б, кривая 3).

Изменение температуры охлаждаемого диска  $T_S$  также приводит к некоторым отличиям. Например, при  $Gr \approx 10^5$  и большом числе  $Pr$  значения  $Nu$  отличаются примерно в 1,1 раза:  $Nu = 3,1$  для  $T_S = 292,53$  К и  $Nu = 3,4$  для  $T_S = 294,3$  К (см. для сравнения кривую 1 и точку 2 на рис. 6, б). Такое увеличение стока тепла объясняется тем, что влияние небольшого повышения температуры  $T_S$  на 1,77 К существенно меньше, чем вызванное им уменьшение выпуклости ФК.

### Особенности теплопереноса и форм фронта кристаллизации при вращении кристалла и тепловой конвекции

Вопрос о влиянии вращения кристалла на форму ФК обсуждается уже много лет, начиная с публикации [7]. В его основе лежит представление о наличии в тигле ламинарного течения расплава с двумя вихрями. Один из этих вихрей вызван тепловой конвекцией за счет нагрева тигля, другой (с противоположным направлением движения) — вращением кристалла.

В этом случае форму ФК не рассчитывают, а ее вогнутость или выпуклость в расплав оценивают на качественном уровне путем оценки отношения чисел Грасгофа и Рейнольдса  $Re$  в следующем виде:  $\gamma = Gr/Re^2$ , или в некоторой другой их комбинации. Обычно считают, что при  $\gamma > 1$  преобладает тепловая конвекция, и возникает выпуклый ФК, а при  $\gamma < 1$  конвекция определяется вращением кристалла, и ФК является вогнутым. Эти представления были полезны и многократно тестировались экспериментально при выращивании оксидных монокристаллов. В частности, оценивали критический радиус, соответствующий инверсии ФК от сильно выпуклой к слегка вогнутой форме при росте конусной части монокристалла [8, 9].

Эти представления послужили основой для большого числа работ по математическому моделированию конвективного теплопереноса в гидродинамической модели метода Чохральского без учета процесса кристаллизации [10, 11].

Работы такого типа имели практическую значимость, если опирались на экспериментальные наблюдения и их данные. Это относится к работе [11], где критерий для формы ФК был основан на экспериментальном наблюдении за свободной поверхностью расплава в процессе выращивания монокристаллов гранатовой структуры. Так, если на поверхности расплава были видны структуры, напоминающие лепестки [12], то это соответствовало плоскому ФК с преобладанием вынужденной конвекции от вращения кристалла. В противном случае преобладала тепловая конвекция, и ФК был выпуклым в расплав. В работе [11] был предложен способ эффективного воздействия на форму ФК с помощью контролируемого изменения скорости вращения кристалла в процессе его выращивания.

В настоящее время в технологическую практику активно внедряются сопряженные математические модели со сложным радиационным теплообменом и учетом процесса кристаллизации. С их помощью создаются расчетные модели и даются практические рекомендации применительно к реальным установкам и режимам выращивания кристаллов методом Чохральского. Однако до сих пор расчетный процесс кристаллизации не был протестирован на данных лабораторного эксперимента.

Расчетный тест по данным лабораторного эксперимента выполняли применительно к кристаллизации гептадекана, характеризующегося, как и оксидные и органические материалы, большим числом Прандтля  $Pr = 66,37$ . Тепловые условия задавали следующим образом:  $T_S = 292,53$  К и  $T_W = 295,9$  К (т. е. разность температур  $\Delta T = 3,37$ ). Предполагали наличие термогравитационной и термокапиллярной конвекций, а также вынужденной конвекции от вращения диска с угловой скоростью  $\Omega_s = 1$  рад/с. Значения теплофизических параметров и рассчитанные критерии подобия для этого теста приведены в таблице.

В соответствии с картиной течения, показанной на рис. 7, а, основное подъемное движение происходит за счет термогравитационной конвекции вблизи боковой стенки тигля. Скорость подъемного течения достигает  $7,7 \cdot 10^{-4}$  м/с. Оно несколько усиливается в радиальном направлении к ФК в приповерхностном слое за счет действия термокапиллярных сил. Охлаждение диска приводит к кристаллизации расплава в подкристалльной области с формированием выпуклой в расплав отвердевшей области.

Однако вращение диска существенно влияет на течение расплава в подкристалльной области. Центробежные силы, возникающие при вращении твердой выпуклой области, создают вихревое движение (вы-

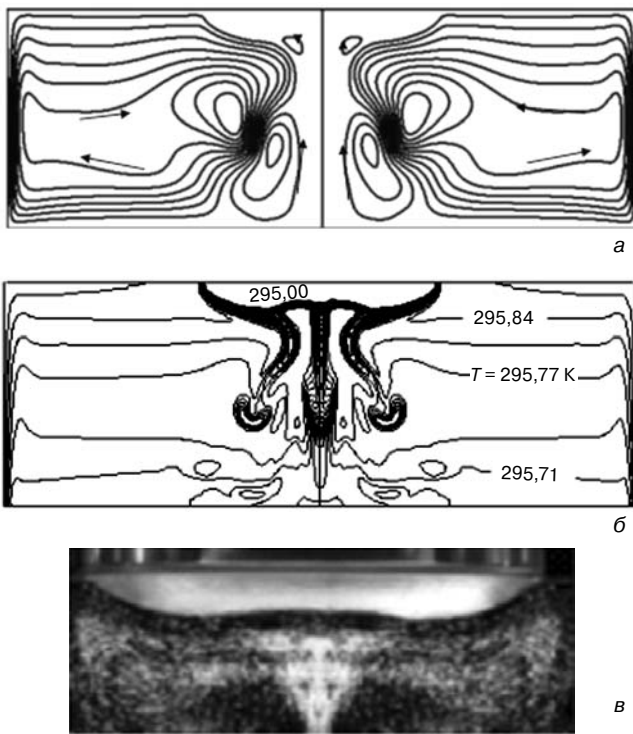


Рис. 7. Кристаллизация гептадекана при тепловой конвекции и вращении диска ( $\Omega_s = 1$  рад/с,  $Re = 554$ ): а — линии тока; б — изотермы; в — фото закристаллизовавшейся части (светлая область)  
 Fig. 7. Heptadecane Solidification for Heat Convection and Disc Rotation ( $\Omega_s = 1$  rad/s,  $Re = 554$ ): (a) flow curves, (b) isothermal curves, (c) solidified portion image (bright area)

нужденную конвекцию) противоположно направлению тепловой конвекции (см. рис. 7, а). Линейная скорость вращения кромки закристаллизовавшейся части достигает большой величины  $5,56 \cdot 10^{-2}$  м/с, что вовлекает во вращательное движение весь объем расплава. Но течение в меридиональной плоскости (радиальная и осевая компоненты скорости) существенно медленнее. Вблизи оси тигля расплав всплывает вверх (с осевой скоростью  $V_z \approx 4,14 \times 10^{-3}$  м/с) и отбрасывается центробежными силами, действующими на твердой выпуклой поверхности. Такое встречное течение приводит к ослаблению воздействия тепловой конвекции на форму ФК. Это проявляется в виде центрального прогиба вверх в профиле ФК, и обычно такой ФК называется W-образным. Расчетная форма ФК, представленная изотермой  $T_{sol}$ , и экспериментальное фото закристаллизовавшейся области хорошо между собой согласуются (см. для сравнения рис. 7, б и в).

Интерес представляет также оценка распространенного на практике параметра  $\gamma$ . В данном тесте его значение составляет 0,72, что соответствует условию преобладания тепловой конвекции ( $\gamma < 1$ ) и согласуется с полученными авторами результатами.

Можно отметить, что описанная выше картина течения в целом остается неизменной во времени. Однако интенсивности вихрей как вынужденной, так и тепловой конвекции изменяются колебательно во

времени. Такая колебательная неустойчивость двухвихревого течения вызывает периодическое возникновение, развитие и отрыв «холодных» термических потоков (термиков) вблизи ФК (см. рис. 7, б).

Явление переноса тепла термиками применительно к модели метода Чохральского (без учета процесса кристаллизации) было подробно рассмотрено ранее для тепловой конвекции в этиловом спирте [1]. Настоящее исследование показало особенности этого явления в процессе кристаллизации гептадекана с отличной от плоской формой ФК.

По-видимому, это фундаментальное явление играет важную роль в образовании полосчатой неоднородности кристаллов, которая связана с колебательным вхождением примесей в кристалл в процессе кристаллизации. Отметим, что форма и положение ФК практически не изменяются во времени. Однако тепловой пограничный слой вблизи ФК подвержен значительным изменениям.

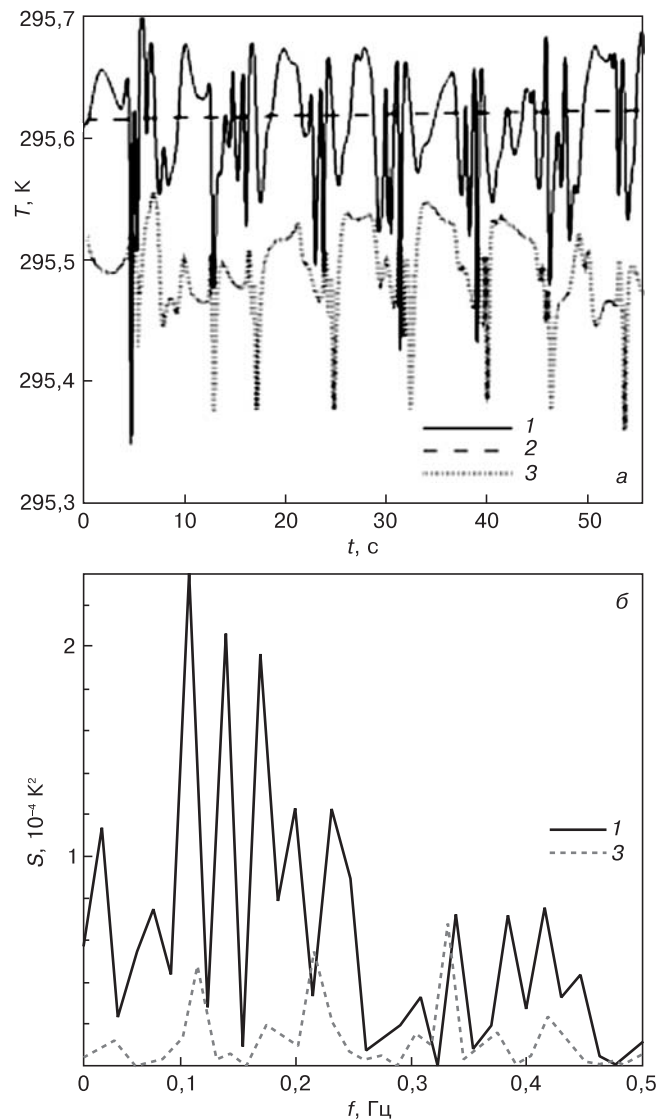


Рис. 8. Графики колебаний температуры (а) и соответствующие им спектральные плотности (б) в точках расплава 11–13 (см. рис. 2)  
 Fig. 8. (a) Temperature Fluctuation Curves and (b) Respective Spectral Densities for Melt Points 11–13 (see Fig. 2)



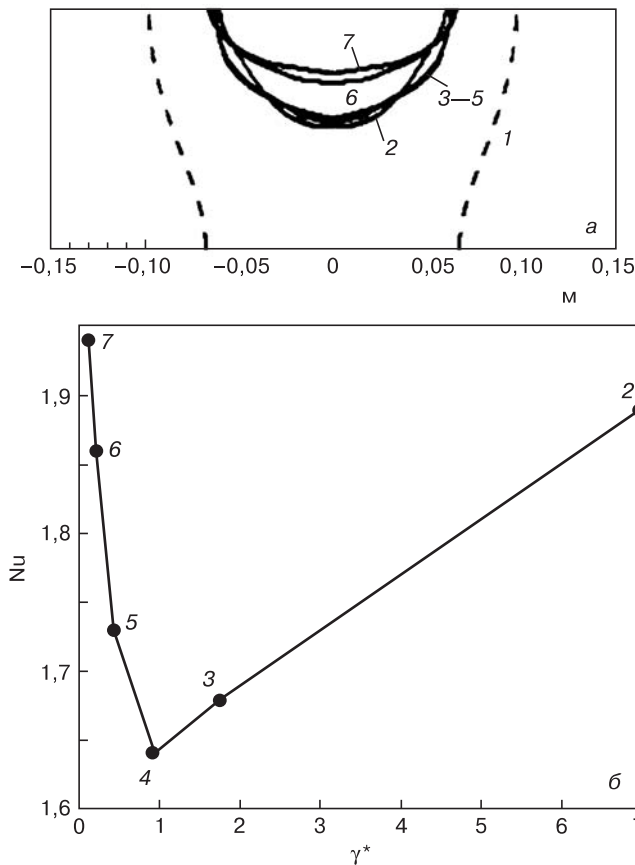


Рис. 9. Формы ФК галлия при вращении диска с различной скоростью (а) и зависимость числа Nu от величины  $\gamma^*$  (б): 1 — Gr = Re = 0; 2—7 — Gr =  $7,6 \cdot 10^7$ , Re ·  $10^{-4}$  = 0,8 (2), 1,6 (3), 2,2 (4), 3,2 (5), 4,8 (6), 6,4 (7)  
 Fig. 9. (a) Gallium Solidification Front Shapes for Disc Rotation at Different Speeds and (b) Nu Number as a Function of  $\gamma^*$ : 1 — Gr = Re = 0; 2—7 — Gr =  $7.6 \cdot 10^7$ , Re ·  $10^{-4}$  = 0,8 (2), 1,6 (3), 2,2 (4), 3,2 (5), 4,8 (6), 6,4 (7)

На рис. 8 приведены графики колебаний температуры и соответствующие им спектральные плотности в трех характерных точках расплава. Они показывают значительные осцилляции температуры в точке 11 (см рис. 2) подкристалльной области, которая находится вблизи ФК, и несколько меньшие в более удаленной от ФК точке 13 (см. рис. 2). При этом колебания вблизи боковой стенки тигля (см. рис. 2, точка 2) практически отсутствуют. Наиболее значимые частоты этих осцилляций соответствуют диапазону 0,1—0,2 Гц для точки 11, что согласуется с задаваемой частотой полного оборота диска ~0,16 Гц. Это свидетельствует о том, что на динамику «холодных» термиком и связанную с ней частоту колебаний температуры вблизи ФК существенное влияние оказывает скорость вращения диска.

Более подробно влияние скорости вращения кристалла было исследовано в серии параметрических расчетов по кристаллизации галлия, который, как металлы и полупроводники, обладает высокой теплопроводностью и, следовательно, малым числом Прандтля Pr = 0,026. Температура плавления галлия выше (302,8 К), чем для гептадекана, поэтому тепловые условия несколько отличались от предыдущего

случая и были следующими:  $T_S = 299,43$  К,  $T_W = 303,8$  К (т. е.  $\Delta T = 4,37$ ). Скорость вращения диска  $\Omega_s$  изменяли: 0,9, 1,8, 3,6, 5,4 и 7,2 рад/с. Термокапиллярную конвекцию на свободной поверхности расплава не учитывали. Число Грасгофа было постоянным: Gr =  $7,6 \cdot 10^7$ , но число Рейнольдса было, соответственно, переменным: Re ·  $10^{-4}$ : 0,8, 1,6, 2,2, 3,2, 4,8 и 6,4.

Изменения формы ФК при увеличении числа Re можно видеть на рис. 9, а, где для сравнения пунктиром 1 показано также ее положение в режиме теплопроводности — при отсутствии конвекции (Gr = Re = 0). Можно заметить, что без конвекции кристаллическая часть занимает большую центральную часть тигля, но действие тепловой конвекции и вращения кристалла при Re =  $8 \cdot 10^3$  приводит к ее ограничению выпуклой формой ФК (кривая 2). При увеличении Re до  $3,2 \cdot 10^4$  эта форма ФК несколько радиально сужается (кривые 3—5), а дальнейшее увеличение Re до  $6,4 \cdot 10^4$  приводит еще и к ее осевому сжатию (кривые 6, 7).

Возвращаясь к началу обсуждения влияния критерия  $\gamma$  на форму ФК, можно проанализировать рассчитанную для кристаллизации галлия зависимость числа Nu от разных чисел Re. Она приведена на рис. 9, б в виде графика интегрального числа Нуссельта на охлаждаемом диске: Nu( $\gamma^*$ ). Параметр  $\gamma^*$  является произведением  $\gamma$  и  $(H/R_C) \cdot (R_C/R_S)^2$ . Это более логично и означает, что в масштабе длины для тепловой конвекции учтена глубина расплава H и радиус тигля  $R_C$ , а не только радиус кристалла  $R_S$ . Значения числа Nu были вычислены по результатам расчетных вариантов (1—7), соответствующих данным рис. 8, а. Приводимые на рис. 8, б значения числа Нуссельта были нормированы на его величину в режиме теплопроводности (без конвекции).

Зависимость Nu( $\gamma^*$ ) является немонотонной с минимумом при  $\gamma^* \approx 1$ , что может быть подтверждением правильности выбора такого критерия. При  $\gamma^* \gg 1$  вихрь от действия тепловой конвекции обтекает ФК (рис. 9, а, кривая 2), при  $\gamma^* \ll 1$  (см. рис. 9, а, кривые 6 и 7), вихрь от вращения кристалла противоположного направления преобладает в тигле и обтекает ФК. В рамках рассматриваемой модели кристаллизации галлия на охлаждаемый диск (см. рис. 1 и 2) это проявляется в осевом сжатии выпуклой в расплав кристаллической области, хотя при направленной кристаллизации в реальном процессе Чохральского это может соответствовать существенному спрямлению ФК.

### Заключение

Работа является продолжением цикла исследований конвективного теплопереноса при выращивании кристаллов методом Чохральского на основе единой расчетно-экспериментальной модели. Ранее моделирование проводили на модельной жидкости

(этиловом спирте) без учета процесса кристаллизации. На данном этапе конвективный теплоперенос исследовали с использованием веществ, кристаллизующихся при температурах, близких к комнатным (гептадекана и галлия).

В отличие от современных сопряженных математических моделей, которые перегружены большим числом недостаточно точно известных физических коэффициентов, имеющих весьма косвенное подтверждение результатами натуральных измерений, предложена упрощенная модель, рассчитывающая форму ФК, которая опирается на достаточно проверенные табличные теплофизические данные и надежные данные лабораторного моделирования, выполненные в четком соответствии с параметрами расчетной модели.

Расчетная модель разработана с помощью программного комплекса *AnsysFluent* и написанных авторами пользовательских подпрограмм, позволивших кардинально расширить базовые возможности этого пакета, в частности, для правильного учета вращения кристаллизующейся фракции.

Показано, что важным преимуществом проведенного лабораторного эксперимента было использование прозрачного расплава гептадекана. Это дало возможность визуализировать как структуры течения расплава, так и закристаллизовавшуюся часть. Получены данные, необходимые для тестирования расчетной модели, с помощью которых были верифицированы расчетные структуры течения, параметры теплоотдачи в охлаждаемый диск и степени выпуклости формы ФК. Это было сделано для двух режимов теплопереноса: только при тепловой (термогравитационной и термокапиллярной) конвекции и при смешанной (термогравитационной и вынужденной от вращения кристалла) конвекции.

Для режима тепловой конвекции установлено, что на форму ФК влияет не только ее интенсивность, зависящая от числа  $Gr$  и определяемая разностью температур между нагреваемой боковой стенкой тигля и температурой кристаллизации, но и температура охлаждаемого диска. По результатам расчетов сделаны количественные обобщения. Графики наиболее важных характеристик (выпуклости ФК и числа  $Nu$  на диске) построены в зависимости от числа  $Gr$  для различных температур охлаждаемого диска, а также для больших и малых чисел  $Pr$ .

Показано хорошее соответствие результатов расчетов данным лабораторного эксперимента для кристаллизации гептадекана (при большом числе Прандтля  $Pr = 66,37$ ). Установлено, что в этом случае интенсивности вихрей от действия вынужденной и тепловой конвекции изменяются колебательно во времени. Причем колебательная неустойчивость такого двувихревого течения визуально проявляется в периодическом возникновении, развитии и отрыве «холодных» термик вблизи ФК. Выявлено, что на динамику «холодных» термик и связанную с ней

частоту колебаний температуры вблизи ФК существенное влияние оказывает скорость вращения диска.

Расширено понимание вопроса о влиянии вращения кристалла на форму ФК, который обсуждается уже много лет. Проанализировано влияние критерия  $\gamma = Gr/Re^2$  на форму ФК галлия. Для обработки был взят модифицированный параметр  $\gamma^*$ . Зависимость интегрального числа Нуссельта от этого параметра на охлаждаемом диске немонотонна с минимумом при  $\gamma^* \approx 1$ . Это согласуется с общими выводами других работ, что при  $\gamma^* \gg 1$  вихрь от действия тепловой конвекции обтекает ФК, а при  $\gamma^* \ll 1$  вихрь от вращения кристалла противоположного направления преобладает в тигле и обтекает ФК. В рамках рассматриваемой модели кристаллизации галлия это проявляется в виде осевого сжатия выпуклой в расплав кристаллической области, хотя при направленной кристаллизации в реальном процессе Чохральского это может отвечать существенному спрямлению ФК.

#### Библиографический список

1. **Berdnikov, V. S.** The phenomenon of «cold plume» instability in Czochralski hydrodynamic model: Physical and numerical simulation / V. S. Berdnikov, A. I. Prostomolotov, N. A. Verezub // *J. Cryst. Growth*. – 2014. – V. 401. – P. 106–110.
2. *Ansys CFD* // Lisence of IPMech RAS, No 659778–23–Aug–2011.
3. **Berdnikov, V. S.** Complex simulation of crystal pulling from the melt / V. S. Berdnikov, V. V. Vinokourov, V. A. Gaponov, V. A. Markov // *Proc. Fourth Internat. Conf. «Single crystal growth and heat and mass transfer»*. – Obninsk: SSC RF IPPE, 2001. – V. 1. – P. 80–106.
4. **Бабичев, А. П.** Физические величины: Спр. / А. П. Бабичев, Н. А. Бабушкина, А. М. Братковский, М. Е. Бродов, М. В. Быстров, Б. В. Виноградов, Л. И. Винокурова, Э. Б. Гельман, А. П. Геппе, И. С. Григорьев, К. Г. Гуртовой, В. С. Егоров, А. В. Елецкий, Л. К. Зарембо, В. Ю. Иванов, В. Л. Иващенко, В. В. Игнатьев, Р. М. Имамов, А. В. Инюшкин, Н. В. Кадобнова, И. И. Карасик, К. А. Кикоин, В. А. Криворучко, В. М. Кулаков, С. Д. Лазарев, Т. М. Лифшиц, Ю. Э. Любарский, С. В. Марин, И. А. Маслов, Е. З. Мейлихов, А. И. Мигачев, С. А. Миронов, А. Г. Мусатов, Ю. П. Никитин, Л. А. Новицкий, А. И. Обухов, В. И. Ожогин, Р. В. Писарев, Ю. В. Писаревский, В. С. Пугский, А. А. Радциг, В. П. Рудаков, Б. Д. Сумм, Р. А. Сюняев, М. Н. Хлопкин, И. Н. Хлюстиков, В. М. Черепанов, А. Г. Чертов, В. Г. Шапиро, В. М. Шустряков, С. С. Якимов, В. П. Яновский. / под ред. И. С. Григорьевой, Е. З. Мейлихова. – М.: Энергатоиздат, 1991. – 1232 с.
5. **Бердников, В. С.** Общие закономерности конвективно-го теплообмена в системе тигель–расплав–кристалл в методе Чохральского и их влияние на формы фронта кристаллизации / В. С. Бердников, В. А. Винокуров, В. В. Винокуров, В. А. Гапонов, В. А. Марков // *Вестник НГУ им. Лобачевского, МЖГ*. – 2011. – № 4(3). – С. 641–643.
6. **Бердников, В. С.** Гидродинамика и теплообмен при вытягивании кристаллов из расплава. Ч. 1. Экспериментальные исследования режима свободной конвекции / В. С. Бердников // *Изв. вузов. Материалы электрон. техники*. – 2007. – № 4. – С. 19–27.
7. **Carruthers, J. R.** Flow transitions and interface shapes in Czochralski growth of oxide crystals / J. R. Carruthers // *J. Cryst. Growth*. – 1976. – V. 36, N 2. – P. 212–214.
8. **Brandle, C. D.** Flow transitions in Czochralski oxide melts / C. D. Brandle // *J. Cryst. Growth*. – 1982. – V. 57. – P. 65–70.
9. **Nikolov, V.** Relationship between the hydrodynamics in the melt and the shape of the crystal/melt interface during Czochralski growth of oxide single crystals: II. Determination of the critical rotation rate from physical simulation data on growth in the presence of simultaneous free and forced convections; comparison with ex-

perimental data on crystal growth / V. Nikolov, K. Iliev, P. Peshev // *J. Cryst. Growth*. – 1988. – V. 89, N 2–3. – P. 324–330.

10. Basu, B. Effect of crystal rotation on the three-dimensional mixed convection in the oxide melt for Czochralski growth / B. Basu, S. Enger, M. Breuer, F. Durst // *J. Cryst. Growth*. – 2001. – V. 230. – P. 148–154.

11. Везеуб, Н. А. Конвективный теплообмен в расплаве при выращивании монокристаллов гранатовой структуры методом Чохральского / Н. А. Везеуб, М. Н. Нуцубидзе, А. И. Простомолов // *Изв. РАН. МЖТ*. – 1995. – № 4. – С. 29–38.

12. Miller, D. C. Fluid flow patterns in a simulated garnet melt / D. C. Miller, T. L. Pernell // *J. Cryst. Growth*. – 1982. – V. 58. – P. 253–260.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты: 12–08–00487, 14–08–00454) и СО РАН (проект III.18.2.5 № Гос. регистр. 01201350443).

Статья поступила в редакцию 27 января 2015 г.

ISSN 1609–3577 *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki* = *Materials of Electronic Technics*. 2014, vol. 17, no. 4, pp. 257–267.

### Numerical and Experimental Study of the Influence of Thermal Processes on the Shape of Solidification Front in Czochralski Model for Heptadecane and Gallium

**Nataliya Anatol'evna Verezub**<sup>1</sup> — Senior Researcher, Cand. Sci. (Phys.–Math.) (verezub@ipmnet.ru); **Anatoly Ivanovich Prostomolotov**<sup>1</sup> — Leading Researcher, Dr. Sci. (Eng.) (prosto@ipmnet.ru); **Vladimir Stepanovich Berdnikov**<sup>2</sup> — Header of Laboratory, Dr. Sci. (Phys.–Math.) (berdnikov@itp.nsc.ru); **Viktor Aleksandrovich Vinokurov**<sup>2</sup> — Researcher, Cand. Sci. (Phys.–Math.).

<sup>1</sup>*Institute for Problems in Mechanics (IPMech) of Russian Academy of Sciences*  
101 Bldg. 1, prospekt Vernadskogo, 119526 Moscow, Russia

<sup>2</sup>*Institute of Thermophysics, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences*  
1 Akademika Lavrent'eva Ave., 630090 Novosibirsk, Russia

**Abstract.** Convective heat transfer and solidification have been studied using a simplified but unified simulation/experimental model of the Czochralski method for two materials with melting points close to room temperature: heptadecane (low heat conductivity) and gallium (high heat conductivity). Due to the transparency of the heptadecane melt we have been able to visualize the melt flow patterns and the solidified structures in a laboratory experiment to provide the simulation model with source data. Based on calculations we have studied the parameters of melt flow patterns, heat flows on the cooled disc and the dependence of solidification front shape for both materials on convective heat transfer modes: thermogravity and mixed (i.e. with additional crystal rotation) convection.

**Keywords:** simulation, crystallization, hydrodynamics, heat transfer, Czochralski model.

#### References

- Berdnikov V. S., Prostomolotov A. I., Verezub N. A. The phenomenon of «cold plume» instability in Czochralski hydrodynamic model: Physical and numerical simulation. *J. Cryst. Growth*. 2014, vol. 401, pp. 106–110. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2013.12.055>
- Ansys CFD. *Lisence of IPMech RAS*, no. 659778–23–Aug–2011.
- Berdnikov V. S., Vinokourov V. V., Gaponov V. A., Markov V. A. Complex simulation of crystal pulling from the melt. *Proc. Fourth Internat. Conf. «Single crystal growth and heat and mass transfer»*. Obninsk: SSC RF IPPE, 2001, vol. 1. Pp. 80–106.
- Babichev A. P., Babushkina N. A., Bratkovskii A. M., Brodov M. E., Bystrov M. V., Vinogradov B. V., Vinokurova L. I., Gel'man E. B., Gepe A. P., Grigor'ev I. S., Gurtovoi K. G., Egorov V. S., Elets'kii A. V., Zarembo L. K., Ivanov V. Yu., Ivashintseva V. L., Ignat'ev V. V., Imamov R. M., Inyushkin A. V., Kadobnova N. V., Karasik I. I., Kikoin K. A., Krivoruchko V. A., Kulakov V. M., Lazarev S. D., Lifshits T. M., Lyubarskii Yu. E., Marin S. V.,

Maslov I. A., Meilikhov E. Z., Migachev A. I., Mironov S. A., Musatov A. L., Nikitin Yu. P., Novitskii L. A., Obukhov A. I., Ozhogin V. I., Pisarev R. V., Pisarevskii Yu. V., Ptuskun V. S., Radtsig A. A., Rudakov V. P., Summ B. D., Syunyaev R. A., Khlopkin M. N., Khlyustikov I. N., Cherepanov V. M., Chertov A. G., Shapiro V. G., Shustraykov V. M., Yakimov S. S., Yanovskii V. P. Pod. red. I. S. Grigor'eva, E. Z. Meilikhova. *Fizicheskie velichiny: Spr.* [Physical quantities: B.R.] Moscow: Energoizdat, 1991. 1232 p. (In Russ.)

5. Berdnikov V. S., Vinokourov V. A., Vinokourov V. V., Gaponov V. A., Markov V. A. General regularities of convective heat transfer in the crucible melt–crystal system of Czochralski method and their influence on the solidification front shape. *Vestnik of the Lobachevsky NSU*. 2011, no. 4(3), pp. 641–643. (In Russ.). <http://www.vestnik.unn.ru/nomera?anum=7076>

6. Berdnikov V. S. Hydrodynamics and heat transfer in crystal pulling from the melt. Part 1. Experimental studies of the regime of free convection. *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki* = *Materials of Electronics Engineering*. 2007, no. 4. pp. 19–27. (In Russ.)

7. Carruthers J. R. Flow transitions and interface shapes in Czochralski growth of oxide crystals. *J. Cryst. Growth*. 1976, vol. 36, no. 2, pp. 212–214. DOI: 10.1016/0022-0248(76)90280-3

8. Brandle C. D. Flow transitions in Czochralski oxide melts. *J. Cryst. Growth*. 1982, vol. 57, pp. 65–70. DOI:10.1016/0022-0248(82)90249-4

9. Nikolov V., Iliev K., Peshev P. Relationship between the hydrodynamics in the melt and the shape of the crystal/melt interface during Czochralski growth of oxide single crystals: II. Determination of the critical rotation rate from physical simulation data on growth in the presence of simultaneous free and forced convections; comparison with experimental data on crystal growth. *J. Cryst. Growth*. 1988, vol. 89, no. 2–3, pp. 324–330. DOI: 10.1016/0022-0248(88)90417-4

10. Basu B., Enger S., Breuer M., Durst F. Effect of crystal rotation on the three-dimensional mixed convection in the oxide melt for Czochralski growth. *J. Cryst. Growth*. 2001, vol. 230, pp. 148–154. DOI:10.1016/S0022-0248(01)01351-3

11. Verezub N. A., Nutsbidze M. N., Prostomolotov A. I. Convective heat transfer in the melt during the growth of single crystals of garnet structure by the Czochralski method. *Fluid Dynamics*. 1995, no. 4, pp. 29–38. (In Russ.)

12. Miller D. C., Pernell T. L. Fluid flow patterns in a simulated garnet melt. *J. Cryst. Growth*. 1982, vol. 58, pp. 253–260. DOI: 10.1016/0022-0248(82)90233-0

**Acknowledgements.** This work was supported by the Russian Fundamental Research Fund (Grants 12–08–00487 and 14–08–00454) and by the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (Project III.18.2.5, State Reg. No. 01201350443).

Received January 27, 2015