# Н.А. Верезуб, А.И. Простомолотов

# ГИДРОМЕХАНИЧЕСКАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ В ПРОЦЕССЕ ВЫРАЩИВАНИЯ КРИСТАЛЛОВ МЕТОДОМ ЧОХРАЛЬСКОГО

Институт проблем механики им. А. Ю. Ишлинского РАН, г. Москва, Россия

Аннотация. Рассмотрен один из механизмов гидромеханической неустойчивости при выращивании кристаллов из расплава методом Чохральского, связанный с явлением образования «холодных термиков» в подкристальной области. С этой целью проанализированы результаты, полученные по двум математическим моделям: 1 – без и 2 – с учетом процесса кристаллизации. В первом случае модельной жидкостью был этанол, а положение фронта кристаллизации задавалось изотермой кристаллизации и было неизменным. В рамках такого подхода были исследованы особенности перехода от стационарного течения жидкости к его неустойчивым модам, сопровождающимся формированием, развитием и отрывом «холодного термика» от фронта (изотермы) кристаллизации. Во втором случае модельными расплавами были два материала с температурой плавления, близкой к комнатной: гептадекан и галлий, которые существенно различаются коэффициентами теплопроводности. В этом случае было изучено влияние термомеханических параметров на формирование формы фронта кристаллизации и возникновение гидромеханической неустойчивости в виде «холодных термиков».

**Ключевые слова**: выращивание кристаллов, метод Чохральского, моделирование, гидродинамика, теплоперенос, фронт кристаллизации

DOI: 10.37972/chgpu.2020.44.2.004

УДК: 621.315.592:548.4

### Введение

Проблема неустойчивости потока расплава при выращивании кристаллов по методу Чохральского (Cz) является предметом многих экспериментальных и теоретических работ, в которых анализируются флуктуации температуры в расплаве для конкретных условий роста кристаллов кремния (см., например, обзор [1]). Прямое численное

© Верезуб Н. А., Простомолотов А. И., 2020

Верезуб Наталия Анатольевна

Поступила 20.03.2020

e-mail: verezub@ipmnet.ru, кандидат физико-математических наук, доцент, старший научный сотрудник, Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва, Россия. Простомолотов Анатолий Иванович

e-mail: prosto@ipmnet.ru, доктор технических наук, доцент, ведущий научный сотрудник, Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва, Россия.

Работа выполнена в рамках Госзадания АААА-А20-120011690136-2 при поддержке гранта РФФИ № 18-02-00036.



Рис. 1.

моделирование неустойчивых течений на основе полных уравнений Навье-Стокса актуально и мало изучено для разных гидродинамических моделей, включая модель Cz.

Первые попытки таких вычислений методами конечных разностей [2] и конечных элементов [3] выявили значительное влияние параметров сетки. В последующие годы методы численного моделирования были улучшены путем применения консервативной и более точной аппроксимации уравнений. Увеличение компьютерных ресурсов позволило значительно увеличить количество узлов сетки и обеспечить существенное снижение «математической» вязкости. Прямое численное моделирование течения, соответствующее ламинарно-турбулентному переходу, стало возможным после долговременной проверки стационарных течений в Сz-модели [5,6]. Подобная работа опубликована в [10] с использованием данных физического моделирования [7].

Целью данной работы являлось изучение процессов конвективного теплообмена на двух моделях метода Чохральского: 1 – с использованием этанола в качестве модельной жидкости без учета процесса кристаллизации, 2 – с использованием в качестве модельных жидкостей материалов с температурой плавления, близкой к комнатной (гептадекан и галлий), с учетом процесса кристаллизации. Обсуждается явление образования «холодных термиков» под фронтом кристаллизации (ФК). Результаты математического моделирования верифицировались по данным лабораторных экспериментов [8,9].

# Математическое моделирование без учета процесса кристаллизации

Численное моделирование гидродинамических неустойчивых течений в Cz-осесимметричной модели на основе приближения Навье-Стокса-Буссинеска проводилось с последующим вычислением средней скорости, температурных полей и спектров флуктуаций. В зависимости от температуры тигля исследовались скорость, колебания температуры и динамика «холодных термиков».

Геометрия расчетной области, где 1 – тигель, 2 – модель кристалла в виде диска, 3 – свободная поверхность, и расположение контрольных точек  $S^{1}-S^{5}$  в жидкости для регистрации температурных пульсаций показаны на Рис. 1. Координаты точек [см]: 1) z = 9.82, r = 2.68; 2) z = 9.82, r = 5.36; 3) z = 5.16, r = 2.68; 4) z = 5.16, r = 14.25; 5) z = 0.50, r = 2.68.

Жидкость заполняет цилиндрический объем радиуса  $R_C = 14.75$  см до высоты H = 10.32 см. Диск радиуса  $R_S = 5.36$  см расположен на поверхности жидкости соосно с тиглем. Термические условия были следующими: температура диска  $T_S = 300$  K, дно тигля теплоизолировано, боковая стенка нагрета до температуры  $T_W = T_S + \Delta T$ .



Рис. 2.

Теплофизические параметры этанола:  $\rho = 0.79 \ r/cm^3 - плотность; \beta_T = 1.1 \times 10^{-3}$ 1/К – коэффициент объемного теплового расширения;  $\partial \sigma / \partial T = -0.083 \ дин/(cm \times K)$  – коэффициент поверхностного теплового расширения;  $\nu = 1.54 \times 10^{-2} \ cm^2/c$  – кинематическая вязкость;  $\lambda = 1.75 \times 10^3 \ \text{эрг}/(cm \times c \times K)$  – теплопроводность;  $C_P = 2.43 \times 10^7 \ \text{эрг}/(r \times K)$  – теплоемкость. В расчетах использовалась равномерная конечно-разностная сетка: для осесимметричного случая – 15750 узлов ( $r \times z$ : 150 × 105).

Структура течения обусловлена тепловой гравитационной и термокапиллярной конвекцией под действием сил на свободной поверхности жидкости. В данной работе изучался переход к гидродинамически неустойчивым течениям при изменении разности температур между боковой стенкой тигля и диском  $\Delta T$ . Анализ неустойчивости течения проводился на основе записей в каждой точке сетки для статистически однородного температурного поля в объеме жидкости с последующими усредняющими итерациями с течением времени, выполненными с шагом 0.01 с за 200 с. Одновременно вычислялись среднеквадратичные отклонения температурных пульсаций. Достижение статистически однородного температуры в контрольных точках (см.  $S^1-S^5$  на Рис. 1), для которых рассчитаны амплитудно-частотные характеристики пульсаций.

В графической форме визуализировалась эволюция «холодного термика»: образование, развитие и отрыв от поверхности диска, суть которой заключается в следующем. В гравитационном поле неоднородность распределения температуры в тигле вызывает движение расплава под действием гравитационной тепловой конвекции, которое усиливается дополнительным влиянием термокапиллярных сил на свободной поверхности жидкости. В результате жидкость поднимается около нагреваемой стенки бокового тигля, затем перемещается в радиальном направлении к холодному диску. Под диском наблюдается опускное движение охлажденной жидкости.

При увеличении  $\Delta T$  от 4 до 15 К структуры опускного течения под диском существенно изменяются. При малом значении  $\Delta T = 4$  К опускная струя достигает дна тигля, не теряя первоначальной формы. Существенные радиальные изменения ее формы становятся заметными при больших значениях  $\Delta T = 10$  и 15 К, они также изменяются во времени. Например, при  $\Delta T = 15$  К имеет место радиальный поворот струи от оси к боковой стенке, что заметно по изотермам вблизи дна тигля. На Рис. 2 приведена мгновенная картина изотерм при  $\Delta T = 15$  К, на которой процесс эволюции «холодного термика» под холодным диском хорошо заметен: его формирование вблизи края диска, увеличение по направлению к центру и затем отрыв от диска около центрального нисходящего потока.



Рис. 3.

Для анализа неустойчивых во времени течений и переноса тепла при  $\Delta T = 15$  К были рассчитаны средние значения пульсации температурного поля. Для поля средней температуры  $\langle T \rangle$  можно выделить три области: 1 – вблизи нагреваемой боковой стенки тигля, где подъемный поток образует пограничный слой; 2 – под свободной поверхностью, где большая часть объема жидкости имеет вертикальную температурную стратификацию; 3 – область под диском, где жидкость охлаждается и течет на дно с большой скоростью, делая на дне резкий поворот, что заметно по локальным изотермам. Максимальное значение пульсаций температуры  $\langle T_P \rangle = 1.4$  К имеет место вблизи диска и равно 9%  $\Delta T$ .

На Рис. 3 показаны осевые профили средней температуры  $\langle T \rangle$  и пульсаций  $\langle T_P \rangle$ в среднем поперечном сечении ( $r = R_S/2$ ) при  $\Delta T = 15$  K (здесь:  $S^1$  – контрольная точка из Рис. 1). В осевых распределениях можно заметить пограничные слои у диска. Изменение температуры в пограничном слое ( $\sim 12$  K) существенно превышает такое же изменение в пограничном слое вблизи дна тигля. Максимальное значение  $\langle T_P \rangle$ наблюдается в средней части пограничного слоя около диска ( $\sim 1.4$  K), вблизи дна оно меньше ( $\sim 0.6$  K). Толщина пограничного слоя у диска составляет  $\sim 1.1$  см.

Соответствующая спектральная мощность флуктуаций температуры в контрольной точке  $S^1$  показана на Рис. 4.

Спектр флуктуаций температуры заметно дискретен, в нем выделяются частоты с наивысшей спектральной мощностью. Экспериментальные данные [8], соответствующие дискретному спектру ламинарно-турбулентного перехода, хорошо согласуются с этими результатами расчетов.

# Математическое моделирование с учетом процесса кристаллизации

В отличие от предыдущей части, данная модель учитывает процесс кристаллизации. Схема математической модели показана на Рис. 5: расплавленная (1) и кристаллическая (2) части модельного материала; поверхность (3) диска (4), термостатированная при  $T_S$ ; цилиндрический тигель (5) с боковой стенкой, термостатированной при  $T_W > T_S$ , и теплоизолированным дном; форма ФК при температуре плавления  $T_M$  (6); датчики температуры  $S^1-S^3$ .



Рис. 4.



Рис. 5.

Размеры: цилиндрический тигель ( $R_C = 14.75$  см, H = 10.32 см,  $H/R_C = 0.7$ ), коаксиальный диск ( $R_S = 5.36$  см,  $R_C/R_S = 2.75$ ). Расположение датчиков температуры (z, r) [см]:  $S^{1}$ -(5.16, 1.34);  $S^{2}$ -(0.5, 1.34);  $S^{3}$ -(5.16, 14.25).

Расплавленная фракция (1) кристаллизуется при температуре плавления  $T_M$ . Расплавленное состояние обеспечивается нагреванием боковой стенки (5) до температуры  $T_W > T_M$ . Дно тигля и свободная поверхность расплава (пунктирная линия) являются адиабатическими. Центральную часть поверхности расплава закрыта твердым диском (4), коаксиальным тиглю, его температура  $T_S < T_M$  по всей поверхности (3). Этот диск можно вращать со скоростью  $\Omega_S$ . Охлаждение диска приводит к кристаллизации расплавленного материала под его поверхностью с образованием твердой области (2). Три датчика  $(S^1-S^3)$  помещены в расплав для регистрации изменений температуры и спектрального анализа.

При учете процесса кристаллизации полагается зависимость от температуры плотности  $\rho(T)$ , теплопроводности  $\lambda(T)$  и динамической вязкости жидкости  $\mu(T)$ .

Предполагается, 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.

Для твердой фракции и области кристаллизации при  $T < T_{LIQ}$  решается уравнение теплопереноса, а для жидкой фракции решаются совместно уравнение теплопереноса и уравнения Навье-Стокса в приближении Буссинеска.

Изучались изменения формы  $\Phi K$  в зависимости от задаваемых температур  $T_W$ ,  $T_S$  и скорости вращения диска  $\Omega_S$  для двух режимов конвективного теплообмена: 1 – при тепловой конвекции, 2 – при тепловой конвекции и вращении кристалла.

Параметр	Гептадекан	Галлий
$T_M$ [K]	295	302.8
температура плавления		
<i>р</i> [г/см3]	0.787 (273 K),	5.904 (298 K),
ПЛОТНОСТЬ	0.778 (295 K),	6.093 (303 K)
	0.769 (303 K)	
$\beta_T [1/\mathrm{K}]$	$1.17 \times 10^{-3}$	$1.21 \times 10^{-3}$
коэф. теплового расширения		
$\nu  [\mathrm{cm}^2/\mathrm{c}]$	$5.187 \times 10^{-2} (295 \text{ K})$	$3.24 \times 10^{-3} (323 \text{ K})$
кинематическая вязкость		
<i>б</i> [дин/см]	28.1 (295 K),	706 (323 K),
поверхностное натяжение	21.4 (373 K)	705 (373 K)
$\partial\sigma/\partial T$ [дин/см $ imes$ К]	$8.38 \times 10^{-2}$	$2 \times 10^{-2}$
изменение пов. натяжения		
$\lambda \; [epr/c  imes cm  imes K]$	$1.368 \times 10^3 (295 \text{ K}),$	$2.81 \times 10^5 (300 \text{ K}),$
теплопроводность	$1.319 \times 10^3 (313 \text{ K})$	$2.60 \times 10^5 (304 \text{ K})$
$C_p [epr/r \times K)]$	$2.247 \times 10^{7}$	$3.73 \times 10^{6}$
теплоемкость		
Q  [ m epr/r]	$3.2 \times 10^9$	$8.0 \times 10^{8}$
скрытая теплота плавления		
$Pr = \nu \rho C_p / \lambda$	66	0.03
число Прандтля		
$Gr = g\beta_T R_S^3 \Delta T / \nu^2$	$2.21 \times 10^5$	$7.60 \times 10^{7}$
число Грасгофа		
$Mn = (\partial \sigma / \partial T) R_S C_P \Delta T / \nu \lambda$	$4.79 \times 10^4$	—
число Марангони		
$Re = R_S^2 \Omega_S / \nu$	$5.54 \times 10^{2}$	$8.0 \times 10^{3}$
число Рейнольдса		

Таблица 1.

Расчеты были проведены для двух материалов с температурой плавления, близкой к температуре окружающей среды: гептадекана при  $T_{\rm M} = 295$  К и галлия при  $T_{\rm M} = 302.8$  К. Теплофизические параметры и критерии подобия для этих материалов приведены в Таблице 1. Значения критериев вычислены для фиксированной разности температур между боковой стенкой и диском  $\Delta T = 3.37$  К.

Нагрев боковой стенки тигля приводит к возникновению тепловой конвекции в гравитационном поле, нагретый расплав движется вверх вдоль стенки к охлажденному



Рис. 6.

диску. Это движение усиливается действием термокапиллярных сил на свободной поверхности расплава. При этом у диска кристаллизуется твердая фракция (2) (см. Рис. 5), объем и форма которой зависят от конвективного режима. В соответствии с экспериментом [9] режим тепловой конвекции в гептадекане рассматривался при  $T_S = 292.3$  К – на диске,  $T_W = 295.9$  К – на боковой стенке тигля. В качестве формы ФК бралась форма изотермы  $T_{SOL}$ .

Результаты расчетов показали, что при кристаллизации гептадекана возникает одновихревой стационарный поток, при этом модуль скорости достигает максимального значения  $V_m = 1.01 \text{ см/c}$  в нисходящем потоке вблизи оси. Однако скорость потока вблизи боковой стенки тигля гораздо меньше:  $V_m \simeq 5.1 \times 10^{-2} \text{ см/c}$ . Формируется вертикальная стратификация температурного поля согласно распределению изотерм на Рис. 6, которая характеризуется тем, что верхние поверхностные слои становятся более нагретыми, чем нижние. Существенная температурная неоднородность возникает в области, где охлажденный расплав течет вдоль ФК.

Для поиска возможностей управления формой  $\Phi K$  были рассчитаны различные режимы тепловой конвекции в зависимости от числа Gr и разности температур  $\Delta T$ .

В первом случае при  $\Delta T = 3.37$  K, когда число Gr изменялось в пределах: 22.1–2.21 × 10<sup>5</sup>, установлено, что при низких числах Gr скорость потока мала и теплопередача выполняется в режиме теплопроводности, а твердая фаза охватывает всю центральную область материала. Однако с увеличением числа Gr происходит уменьшение закристаллизовавшейся части. Стоит отметить, что при  $\Delta T = 1.6$  K и  $Gr = 1.1 \times 10^5$ , соответствовавших  $T_W = 295.9$  K и  $T_S = 294.3$  K, конвективный режим отличался небольшим повышением температуры диска, что выпрямляло форму ФК. Поэтому можно сказать, что форма ФК зависит не только от интенсивности тепловой конвекции (или числа Gr) и разности температур  $\Delta T$ , но и от температуры диска  $T_S$ .

Интересны также закономерности изменения формы ФК для материалов с более высокой теплопроводностью. С этой целью выполнены расчеты для галлия (здесь для сравнения результатов у галлия предполагалось  $T_M = 295$  K). В этом случае число Pr для расплавленной части было уменьшено до 0.03, что отвечает значениям для расплавленных металлов и полупроводников. Использованы примерно те же температурные параметры, что и для гептадекана:  $\Delta T = 3.37$  K,  $T_W = 295.9$  K,  $T_S = 292.53$ К и в пределах того же диапазона чисел  $Gr: 380–3.8 \times 10^5$ . Изотермы и форма ФК для такого варианта показаны на Рис. 7.

Для небольшого числа  $Gr = 3.8 \times 10^2$  закристаллизовавшаяся часть занимает только центр тигля, на Рис. 7 соответствующий контур ФК показан пунктирной линией. В этом случае поток слабый, а теплопередача соответствует режиму теплопроводности.



Рис. 7.

Однако поток становится сильнее при большом числе  $Gr = 3.8 \times 10^5$ , что приводит к существенному нагреву центра тигля. Это видно по существенному искривлению изотерм в направлении течения, показанным сплошными линиями на Рис. 7.

Можно отметить некоторые различия в форме  $\Phi K$  по сравнению с гептадеканом. Например, при больших числах Gr закристаллизовавшаяся часть охватывает больший объем центра тигля. Поэтому можно сказать, что зависимость формы  $\Phi K$  от тепловой конвекции для веществ с высокой теплопроводностью (металлы, полупроводники) значительно ниже, чем для органических и оксидных веществ с низкой теплопроводностью.



Рис. 8.

Графики наиболее важных характеристик были построены в зависимости от числа Грасгофа для различных температур  $T_S$  охлаждаемого диска, а также для больших и малых чисел Прандтля. Боковая стенка тигля рассматривалась как источник нагрева, а охлаждаемый диск – часть радиатора. Расчеты выполнялись до достижения теплового баланса, когда интегральный тепловой поток на боковой стенке отличался от

потока на диске не более, чем на 5%. Эти графики показаны на Рис. 8 для величины выпуклости  $\Delta \Phi K$ : 1–Pr = 66,  $T_S = 292.53$  K; 2–Pr = 66,  $T_S = 294.23$  K; 3–Pr = 0.03,  $T_S = 292.53$  K; 4–Pr = 0.05 [9].

Тепловой поток на диске выражается относительным интегральным значением числа Нуссельта Nu, которое рассчитывается как отношение интегрального теплового потока для конкретного числа Gr к его значению в режиме теплопроводности [9]. Следует отметить, что величина  $\Delta$  уменьшается вместе с увеличением числа Gr. Ее большие значения соответствуют меньшему числу Pr (см. кривые 1 и 3). Например, при  $Gr = 10^4$  значения отличаются в 2.5 раза:  $\Delta = 3.5$  см для больших Pr = 66и  $\Delta = 8.7$  см при малых Pr = 0.03. Как отмечено выше, изменение температуры охлаждаемого диска  $T_S$  вызывает значительное уменьшение выпуклости  $\Phi$ К. Для  $Gr = 10^5$  и большего числа Pr значения  $\Delta$  отличаются в 5 раз:  $\Delta = 2.5$  см для  $T_S = 292.53$  К и  $\Delta = 0.5$  см для  $T_S = 294.3$  К (см. кривую 1 и метку 2). Теплоотвод от диска увеличивается при увеличении числа Gr, причем этот рост намного выше для больших чисел Pr (см. кривые 1, 3, 4). При  $Gr = 10^5$  значения отличаются примерно в 1.7 раза (Nu = 3.1 для Pr = 66 и Nu = 1.8 для Pr = 0.03).

Согласно [9], данные для кривой 4 были получены при малых значениях числа Прандтля (Pr = 0.05). Они хорошо соответствуют результатам этой работы при Pr = 0.03 (кривая 3). Изменения температуры  $T_S$  на диске также приводят к определенным различиям. Например, для  $Gr \simeq 10^5$  и большого числа Pr значения Nu различаются примерно в 1.1 раза: Nu = 3.1 при  $T_S = 292.53$  K, Nu = 3.4 при  $T_S = 294.3$  K (см. кривую 1 и метку 2). Такое увеличение теплоотвода объясняется влиянием небольшого увеличения  $T_S$  на 1.77 K, что существенно меньше уменьшения величины выпуклости  $\Phi$ K, вызванного им.

Влияние вращения кристалла на форму ФК обсуждалось в течение длительного времени (начиная с публикации [4]). Оно основано на идее ламинарного двухвихревого потока в тигле. Один вихрь вызван тепловой конвекцией в нагретом тигле, а другой вихрь, имеющий противоположное направление движения, вызван вращением кристалла. При этих аргументах форма ФК не вычисляется, а ее выпуклость или вогнутость оценивается качественно на основе отношения чисел Грасгофа и Рейнольдса следующим образом:  $\gamma = Gr/Re^2$ . Обычно предполагается, что при  $\gamma > 1$  преобладает тепловая конвекция и имеет место выпуклая форма ФК, а для  $\gamma < 1$  – вынужденная конвекция, вызванная вращением кристалла, обеспечивает вогнутую форму ФК. Эти взгляды были полезны и экспериментально протестированы много раз. В частности, оценивался критический радиус кристалла, соответствующий инверсии формы ФК (от сильно выпуклой до слегка вогнутой для стадии роста конусной части монокристалла).

В данной работе такая проверка проведена на основе экспериментальных данных о кристаллизации гептадекана, характеризующегося большим значением числа Прандтля (аналогично оксидным, органическим материалам): Pr = 66. Тепловые условия следующие:  $T_S = 292.53$  К – на диске,  $T_W = 295.9$  К – на боковой стенке тигля (разность температур  $\Delta T = 3.37$  К). Рассмотрено комбинированное действие термогравитационной и термокапиллярной конвекции наряду с вынужденной конвекцией, вызванной вращением диска с угловой скоростью  $\Omega_S = 1$  рад/с. Значения теплофизических параметров и рассчитанных критериев подобия приведены в Таблице 1.

В соответствии со структурой течения, приведенной на Рис. 9, основное подъемное движение, вызванное термогравитационной конвекцией, имеет место вблизи боковой



Рис. 9.



Рис. 10.

стенки тигля. Его средняя скорость достигает  $7.7 \times 10^{-2}$  см/с. Поток несколько усиливается за счет влияния термокапиллярных сил под свободной поверхностью расплава в радиальном направлении к  $\Phi K$ .

По распределению изотерм [K] на Рис. 10 можно сказать, что охлаждение диска приводит к кристаллизации расплавленной части, расположенной под ним, с образованием выпуклой затвердевшей области.

Однако вращение диска с этой затвердевшей областью сильно влияет на течение расплава в тигле. Центробежные силы при вращении твердой выпуклой области вызывают вихревое движение, направленное против вихря тепловой конвекции. Скорость вращения достигает большого значения (5.56 см/с) и весь объем расплава оказывается вовлеченным во вращательное движение. Однако интенсивность меридионального потока (радиальная и осевая компоненты скорости) значительно ниже. Рядом с осью тигля расплав движется вверх с осевой скоростью 0.414 см/с, а затем отбрасывается в радиальном направлении от центра центробежными силами, что влияет на конфигурацию затвердевающей поверхности. Поток противоположного направления приводит к уменьшению влияния тепловой конвекции на форму ФК и создает в ее центре прогиб вверх, такую форму обычно называют W-образной. В этом случае  $\gamma = 0.72$ , что соответствует преобладанию вынужденной конвекции ( $\gamma < 1$ ). В целом, структура течения сохраняется, но интенсивности вихрей подвержены колебаниям. Это вызваю периодическим возникновением и отрывом «холодных термиков» от ФК.

#### Заключение

Представленный в статье метод Чохральского является основной технологией выращивания монокристаллов, дефектообразование в которых при их выращивании зависит от гидромеханической неустойчивости термомеханических процессов вблизи ФК на стадии, предшествующей кристаллизации. С использованием двух гидромеханических моделей (1 – без и 2 – с учетом процесса кристаллизации) показано, что одним из важных механизмов гидромеханической неустойчивости является явление образования «холодных термиков» вблизи ФК. В статье проанализированы амплитудно-частотные характеристики, связанные с длительностью возникновения, развития и отрыва «холодных термиков» от ФК в зависимости от тепловых параметров ( $\Delta T$  и Gr).

Показано, что в первой модели, использующей в качестве модельной жидкости этанол, при  $\Delta T = 15$  К гидромеханическая неустойчивость соответствует ламинарнотурбулентному переходу с явно выраженным дискретным спектром колебаний температуры в области существования «холодных термиков».

На основе второй модели, использующей материалы, кристаллизующиеся при температуре, близкой к комнатной (гептадекан и галлий), показано формирование формы  $\Phi$ K в зависимости от интенсивности вихрей, вызванных действием тепловой и вынужденной конвекции. Представленные графики выпуклости  $\Phi$ K и числа Nu на  $\Phi$ K построены для различных чисел Gr и температур охлаждаемого диска  $T_S$ , а также для больших и малых значений числа Pr. В условиях кристаллизации расплава гептадекана подтверждено явление образования, развития и отрыва «холодных термиков» от  $\Phi$ K. Установлено, что динамика поведения «холодных термиков» и соответствующая частота температурных колебаний у  $\Phi$ K существенно зависят от скорости вращения диска.

### ЛИТЕРАТУРА

- Miller W. Numerical simulation of bulk crystal growth on different scales: silicon and GeSi // Physica Status Solidi (B). 2010. Vol. 247, no. 4. P. 885–869.
- [2] Convection during crystal growth on earth and in space / V. I. Polezhayev, K. G. Dubovik, S. A. Nikitin et al. // Journal of Crystal Growth. 1981. Vol. 52. P. 465–470.
- [3] Finite-element simulation of Czochralski bulk flow / M. J. Crochet, P. J. Wouters, F. T. Geyling et al. // Journal of Crystal Growth. 1983. Vol. 65, no. 1-3. P. 153–165.
- [4] Carruthers J. R. Flow transitions and interface shapes in the Czochralski growth of oxide crystals // Journal of Crystal Growth. 1976. Vol. 36, no. 2. P. 212–214.
- [5] Nikitin N., Polezhaev V. Direct simulations and stability analysis of the gravity driven convection in a Czochralski model // Journal of Crystal Growth. 2001. Vol. 230, no. 1-2. P. 30–39.
- [6] Convective interaction and instabilities in GaAs Czochralski model / V. I. Polezhaev, O. A. Bessonov, N. V. Nikitin et al. // Journal of Crystal Growth. 2001. Vol. 230, no. 1-2. P. 40–47.
- [7] Teitel M., Schwabe D., Gelfgat A. Y. Experimental and computational study of flow instabilities in a model of Czochralski growth // Journal of Crystal Growth. 2008. Vol. 310, no. 7-9. P. 1343–1348.
- [8] Berdnikov V. S., Prostomolotov A. I., Verezub N. A. The phenomenon of "cold plume" instability in Czochralski hydrodynamic model: Physical and numerical simulation // Journal of Crystal Growth. 2014. Vol. 401. P. 106–110.
- Heptadecane and Gallium Crystallization in Hydrodynamic Czochralski Model / V. Berdnikov, A. Prostomolotov, N. Verezub et al. // Journal of Materials Science and Engineering A. 2015. Vol. 5, no. 10. P. 351–360.
- [10] Bessonov O. A., Polezhaev V. I. Unsteady nonaxisymmetric ows in the hydrodynamic Czochralski model at high Prandtl numbers // Fluid Dynamics. 2011. Vol. 46, no. 5. P. 684–698.

### N.A. Verezub, A.I. Prostomolotov

# HYDROMECHANIC INSTABILITY OF CRYSTALS GROWTH BY CZOCHRALSKI METHOD

### Ishlinsky Institute for Problems in Mechanics of the RAS, Moscow, Russian Federation

Abstract. The mechanism of hydromechanical instability during Czochralski crystal growth from a melt is considered, which is associated with the formation of "cold plumes" under the crystal. For this purpose, the results obtained by two mathematical models: 1 – without and 2 – taking into account the crystallization process are analyzed. In the first case, an ethanol was as the model fluid, and the position of the crystallization front was set by the crystallization isotherm and was unchanged. Within the framework of this approach, the features of a transition from a stationary fluid flow to its unstable modes were studied, which are accompanied by the formation, development, and separation of "cold plumes" from the crystallization front (isotherm). In the second case, the model melts were as two materials with a melting point close to room temperature: heptadecane and gallium, which significantly differ in thermal conductivity. In this case, the influence of thermomechanical parameters on the formation of the crystallization front shape and the occurrence of hydromechanical instability in the form of "cold plumes" was studied.

**Keywords**: crystal growth, Czochralski method, simulation, fluid dynamics, heat transfer, cold plumes, crystallization front.

### REFERENCES

- Miller W. Numerical simulation of bulk crystal growth on different scales: silicon and GeSi // Physica Status Solidi (B). 2010. Vol. 247, no. 4. P. 885–869.
- [2] Convection during crystal growth on earth and in space / V. I. Polezhayev, K. G. Dubovik, S. A. Nikitin et al. // Journal of Crystal Growth. 1981. Vol. 52. P. 465–470.
- [3] Finite-element simulation of Czochralski bulk flow / M. J. Crochet, P. J. Wouters, F. T. Geyling et al. // Journal of Crystal Growth. 1983. Vol. 65, no. 1-3. P. 153–165.
- [4] Carruthers J. R. Flow transitions and interface shapes in the Czochralski growth of oxide crystals // Journal of Crystal Growth. 1976. Vol. 36, no. 2. P. 212–214.
- [5] Nikitin N., Polezhaev V. Direct simulations and stability analysis of the gravity driven convection in a Czochralski model // Journal of Crystal Growth. 2001. Vol. 230, no. 1-2. P. 30–39.
- [6] Convective interaction and instabilities in GaAs Czochralski model / V. I. Polezhaev, O. A. Bessonov, N. V. Nikitin et al. // Journal of Crystal Growth. 2001. Vol. 230, no. 1-2. P. 40–47.
- [7] Teitel M., Schwabe D., Gelfgat A. Y. Experimental and computational study of flow instabilities in a model of Czochralski growth // Journal of Crystal Growth. 2008. Vol. 310, no. 7-9. P. 1343–1348.
- [8] Berdnikov V., Prostomolotov A., Verezub N. The phenomenon of "cold plume" instability in Czochralski hydrodynamic model: Physical and numerical simulation // Journal of Crystal Growth. 2014. Vol. 401. P. 106–110.
- Heptadecane and Gallium Crystallization in Hydrodynamic Czochralski Model / V. Berdnikov, A. Prostomolotov, N. Verezub et al. // Journal of Materials Science and Engineering A. 2015. Vol. 5, no. 10. P. 351–360.
- [10] Bessonov O. A., Polezhaev V. I. Unsteady nonaxisymmetric ows in the hydrodynamic Czochralski model at high Prandtl numbers // Fluid Dynamics. 2011. Vol. 46, no. 5. P. 684–698.

Verezub Nataliya A.

e-mail: verezub@ipmnet.ru, candidate of physical-mathematical sciences, assistant professor, senior researcher, Ishlinsky Institute for Problems in Mechanics of RAS, address: 101, bl. 1, Vernadskii avenue, Moscow, 119526, Russia.

Prostomolotov Anatoly I.

e-mail: prosto@ipmnet.ru, doctor of technical sciences, assistant professor, leading researcher, Ishlinsky Institute for Problems in Mechanics of RAS, address: 101, bl. 1, Vernadskii avenue, Moscow, 119526, Russia.