

*Научная статья***Моделирование динамики температурного поля в нестационарном приближении при выращивании монокристаллов методом Чохральского***А.О. Гусев**Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Москва, Российская Федерация*

Рассматривается нестационарный осесимметричный процесс выращивания монокристаллов методом Чохральского с жидкостной герметизацией расплава. Математическая модель учитывает теплоперенос в системе тигель–кристалл–расплав–флюс, образование мениска у боковой поверхности кристалла, движение фронта кристаллизации, изменение радиуса кристалла. Для решения указанной задачи разработан новый вычислительный алгоритм, позволяющий определять форму боковой поверхности кристалла в ходе процесса. В основе предложенного численного подхода лежит геометрически консервативная разностная схема, гарантирующая выполнение законов сохранения массы и внутренней энергии. Для решения сеточных уравнений используется алгоритм расщепления по физическим процессам, который обеспечивает согласованный с законами сохранения расчет изменения положения фронта кристаллизации, боковой границы кристалла и мениска и позволяет исследовать длительные технологические режимы. Показано, что если на протяжении всего процесса температура нагревателя постоянна, то радиус кристалла уменьшается. Для изучения влияния внешнего температурного поля на форму боковой поверхности математическая модель процесса дополняется уравнением пропорционально-интегрального регулятора, связывающим изменение температуры нагревателя и радиус растущего кристалла. В общем случае применение управления такого вида приводит к тому, что радиус кристалла в ходе процесса колеблется в окрестности заданного значения; при этом частота и амплитуда его колебаний с течением времени увеличиваются. На основе результатов численных экспериментов находятся значения параметров пропорционально-интегрального регулятора, обеспечивающие рост кристалла практически постоянного радиуса. Данные нестационарных расчетов сопоставляются с данными, полученными в рамках квазистационарной модели процесса кристаллизации.

Ключевые слова: метод Чохральского, задача с движущимися границами, математическое моделирование, консервативная разностная схема

Получение: 20.05.2025 / *Публикация онлайн:* 30.07.2025

УДК 519.6

1. Введение

В работе рассматривается получение полупроводниковых монокристаллов методом Чохральского с жидкостной герметизацией расплава. Этот процесс является одним из вариантов направленной кристаллизации и состоит в следующем. Тигель, заполненный расплавом кристаллизующегося материала, находится в печи. Свободная поверхность расплава покрыта флюсом, который препятствует испарению компонентов из жидкой фазы. На начальной стадии в контакт со свободной поверхностью расплава приводится кристалл малого радиуса — затравка. После контролируемого расплавления ее небольшого объема инициируется процесс кристаллизации (Рис. 1а). Образующийся монокристалл медленно достается из жидкой фазы. За счет изменения скорости вытягивания и температуры теплового узла радиус кристалла увеличивается до номинального. На развитой стадии процесса в ростовой камере поддерживаются условия, обеспечивающие рост кристалла постоянного радиуса (Рис. 1б). Наиболее широко метод Чохральского с жидкостной герметизацией расплава применяется при производстве полупроводниковых монокристаллов арсенида галлия, использующихся в приборостроении.

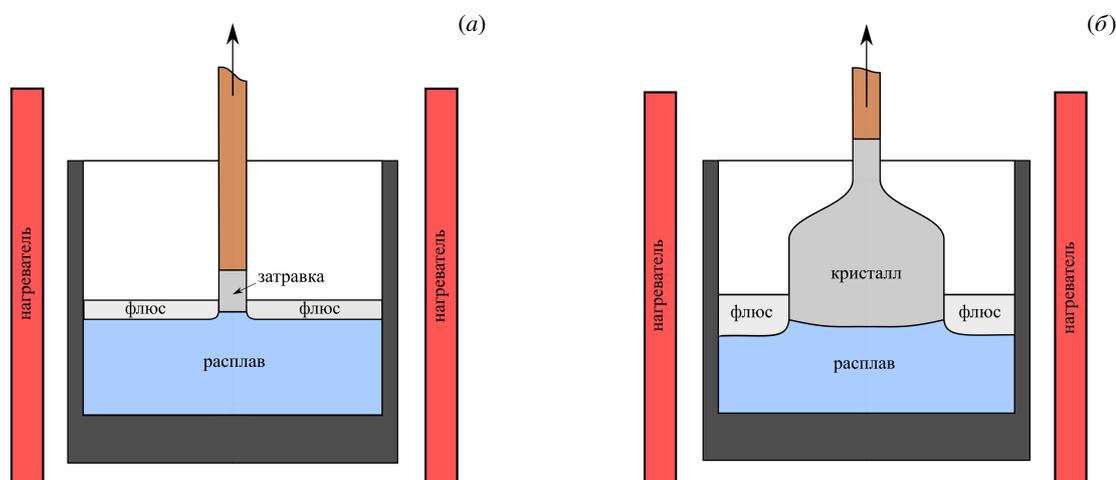


Рис. 1. Модельная система: начальная стадия процесса (а); развитая стадия (б)

Важнейшие параметры, характеризующие качество полупроводникового монокристалла — это однородность его состава, низкая плотность дислокаций, отсутствие дефектов. Основными источниками дислокаций служат температурные напряжения, возникающие в кристалле в ходе роста. Для повышения качества материалов необходимо осуществлять строгий контроль условий выращивания. Экспериментальная оптимизация технологических параметров является дорогостоящей и требует значительных временных затрат. Сократить число экспериментов в задачах кристаллизации позволяет математическое моделирование [1–4].

Форма растущего кристалла обуславливается сложным взаимодействием поверхностных процессов, протекающих на межфазных границах, а также тепло- и массопереносом внутри фаз. Уменьшение объема расплава при выращивании существенным образом сказывается на переносе энергии в системе. Для получения кристаллов постоянного радиуса на протяжении всего процесса необходимо динамически управлять температурой внутри ростовой камеры, что значительно усложняет подбор оптимальных параметров технологического режима.

Наиболее широкое распространение нашли математические модели, в которых не учитывается связь между формой боковой поверхности кристалла и полем температуры и предполагается, что радиус кристалла постоянен. В последние годы в рамках такого подхода достигнут ряд важных результатов. В работах [5–10] изучена структура и характер течения в расплаве. Численный анализ влияния магнитного поля на перенос в ростовой камере проводился в [11–16]. Связь формы фронта кристаллизации и напряжения с внешними факторами рассматривалась в [16–23]. Модели, включающие изменение радиуса кристалла при его росте, обсуждались в работах [24–29].

Характерные времена физических процессов в ростовой камере (конвекции в расплаве, переноса энергии и массы внутри фаз, поверхностных явлений) существенно различны, а в целом длительность технологического процесса велика. Вследствие этого численное изучение технологии получения объемных монокристаллов на основе трехмерных моделей, учитывающих теплоперенос в печи, расплаве, кристалле и флюсе, естественную и вынужденную конвекцию в жидкой фазе, движение границ кристалл/расплав и флюс/расплав, изменение формы боковой поверхности кристалла, требует проведения многочасовых расчетов на современной вычислительной технике. Поэтому до сих пор не потерял актуальность анализ технологических режимов в рамках упрощенных осесимметричных моделей. Он дает возможность получать важные с практической точки зрения сведения при относительно небольших затратах машинного времени.

Целью данной работы является описание алгоритма, позволяющего определять форму боковой поверхности кристалла по мере его роста. Алгоритм основан на математической модели, учитывающей теплоперенос в системе тигель–кристалл–расплав–флюс, образование мениска у боковой поверхности кристалла, движение фронта кристаллизации, изменение радиуса кристалла [25]. На этапе разработки и тестирования предлагаемого метода конвективное движение в расплаве исключается из рассмотрения. Безразмерный анализ задачи показывает, что для кристаллов GaAs число Прандтля и характерные значения чисел Марангони и Грасгофа, соответственно, равны:

$$\text{Pr} = \frac{\nu}{k^1/(c_p^1 \rho^1)} \approx 0.07, \quad \text{Ma} = -\sigma_T \frac{R_c \Delta T}{\nu k^1/c_p^1} \approx 3 \cdot 10^5 \div 6 \cdot 10^5, \quad \text{Gr} = \frac{R_c^3 \beta_T \Delta T g}{\nu^2} \approx 3.5 \cdot 10^7 \div 7 \cdot 10^7.$$

Здесь $\Delta T = 15 \div 30 \text{ K}$ — характерный перепад температуры между фронтом кристаллизации и боковой стенкой тигля (см., например, [30, 31]); $\sigma_T = \partial \sigma / \partial T = -1.2 \text{ г}/(\text{с}^2 \cdot \text{К})$, $\nu = 0.005 \text{ см}^2/\text{с}$ — кинематическая вязкость; $\beta_T = 18 \cdot 10^{-5} \text{ К}^{-1}$ — коэффициент температурного расширения. Значения остальных физических параметров приведены в таблице 1. Из экспериментов известно, что флюс, вязкость которого на три порядка выше вязкости расплава, стабилизирует движение жидкой фазы [32, 33]. Результаты прямого численного моделирования [9, 31, 34] свидетельствуют, что в рассматриваемом диапазоне параметров капиллярное течение имеет низкую скорость и практически не влияет на теплоперенос в системе. Анализ устойчивости движения жидкости, представленный в работах [7, 30], показывает, что при $\text{Gr} \sim 5 \cdot 10^7$ в расплаве наблюдается интенсивная тепловая конвекция, приводящая к значительному искривлению фронта кристаллизации. Таким образом, допущение об отсутствии естественной конвекции в расплаве, принятое в данной работе, справедливо лишь в условиях пониженной гравитации и в специальных случаях, когда для управления ростом кристалла применяется магнитное поле [35]. Вместе с тем надежность и гибкость предлагаемого алгоритма позволяют использовать его при более сложных моделях, учитывающих движение жидкости и капиллярные процессы на свободной поверхности расплава.

В основе обсуждаемого численного метода лежит геометрически консервативная разностная схема, гарантирующая выполнение законов сохранения массы и внутренней энергии. Для решения сеточных уравнений предложен специальный алгоритм расщепления по физическим процессам. Разработанный подход обеспечивает согласованный с законами сохранения расчет изменения положения фронта кристаллизации, боковой границы кристалла и мениска.

2. Постановка задачи

Математическое моделирование нестационарного процесса выращивания кристалла строится в предположении, что перенос тепла в ростовой установке осуществляется механизмами теплопроводности и излучения, конвективное движение расплава не учитывается. Поле температуры является осесимметричным. Расчет ведется в области, расположенной в плоскости (r, z) и состоящей из четырех подобластей (Рис. 2): тигля $\Omega_c(r, z) = \{(r, z) : r \in [0, R_c], z \in [Z_0, Z_1]\}$; расплава $\Omega_1(t, r, z) = \{(r, z) : r \in [0, R_c], z \in [Z_1, Z_2(t, r)]\}$,

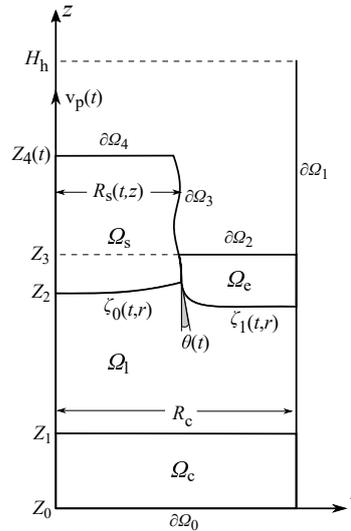


Рис. 2. Схема физической области задачи: Ω_c – тигель, Ω_1 – расплав, Ω_e – флюс, Ω_s – кристалл

где t — время; флюса $\Omega_e(t, r, z) = \{(r, z) : r \in [R_s(t, z), R_c], z \in [Z_2(t, r), Z_3(t),]\}$ и кристалла $\Omega_s(t, r, z) = \{(r, z) : r \in [0, R_s(t, z)], z \in [Z_2(t, r), Z_4(t),]\}$. В задаче присутствуют три подвижные границы: боковая поверхность кристалла, заданная уравнением $r = R_s(t, z)$; фронт кристаллизации $z = \zeta_0(t, r)$; граница между расплавом и флюсом — мениск $z = \zeta_1(t, r)$. Точка, в которой сходятся кривые $r - R_s(t, z) = 0$, $z - \zeta_0(t, r) = 0$ и $z - \zeta_1(t, r) = 0$, называется тройной. Угол, образующийся при контакте кристалла со смачивающим его расплавом, равен $\theta(t)$. Вытягивание кристалла из расплава осуществляется со скоростью $v_p(t)$. Физические параметры задачи приведены в таблице 1.

Таблица 1. Физические параметры задачи

Параметр, единица измерения	Подобласть	Обозначение	Значение
Плотность, г/см ³	Ω_c	ρ^c	1.75
	Ω_1	ρ^1	5.7
	Ω_e	ρ^e	2.2
	Ω_s	ρ^s	5.2
Удельная теплоемкость, Дж/(г·К)	Ω_c	c_p^c	1.05
	Ω_1	c_p^1	0.42
	Ω_e	c_p^e	1.8
	Ω_s	c_p^s	0.42
Коэффициент теплопроводности, Вт/(см·К)	Ω_c	k^c	0.32
	Ω_1	k^1	0.14
	Ω_e	k^e	0.02
	Ω_s	k^s	0.07
Степень черноты	Ω_e	ε^e	0.5
	Ω_s	ε^s	0.5
Температура плавления, К	-	T_{ph}	1511
Скрытая теплота плавления, Дж/г	-	λ	720
Коэффициент поверхностного натяжения, г/с ²	-	σ	700
Равновесный контактный угол, град	-	θ_{eq}	15
Радиус тигля, см	-	R_{cr}	7.5
Высота тигля, см	-	H_h	15
Скорость вытягивания, см/ч	-	$v_p(t)$	0.5

2.1. Основные уравнения и граничные условия

Математическая модель процесса кристаллизации записана далее в безразмерном виде. В качестве масштаба температуры выбрана температура плавления T_{ph} , пространственный масштаб определяется радиусом тигля R_c , масштаб времени — $t_z^s = R_c^2 / (k^s / (c_p^s \rho^s))$. Значения коэффициентов теплопроводности, плотности и удельной теплоемкости отнесены к соответствующим значениям твердой фазы, то есть $k^\gamma = k^\gamma / k^s$, $\rho^\gamma = \rho^\gamma / \rho^s$, $c^\gamma = c^\gamma / c_p^s$, где индекс γ принимает значения s, c, 1, e. Безразмерные параметры, характеризующие кристаллизацию материала GaAs, содержит таблица 2, где σ^* — постоянная Стефана–Больцмана, g — ускорение свободного падения.

Таблица 2. Безразмерные характеристики

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

Теплопередача в тигле, расплаве и флюсе описывается уравнением теплопроводности:

$$c^\gamma \rho^\gamma \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r k^\gamma \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(r k^\gamma \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right], \quad (r, z) \in \Omega_\gamma \quad (\gamma = e, l, c). \quad (1)$$

Перенос энергии в кристалле, движущемся со скоростью v_p , задается уравнением:

$$c^s \rho^s \frac{\partial T}{\partial t} + Pe \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{1}{r} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r k^s \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(r k^s \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right], \quad (r, z) \in \Omega_s. \quad (2)$$

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

Из симметрии задачи следует, что

$$\partial T / \partial r|_{r=0} = 0. \quad (3)$$

Дно тигля теплоизолировано:

$$-k^c \partial T / \partial n|_{\partial \Omega_0} = 0.$$

Температура боковой стенки тигля изменяется по закону:

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

Предполагается, что флюс является непрозрачным. Радиационный теплообмен между боковой стенкой тигля $\partial \Omega_1$, поверхностью флюса $\partial \Omega_2$ и поверхностью кристалла $\partial \Omega_3 \cup \partial \Omega_4$ определяется соотношениями:

$$-k^e \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{\partial \Omega_2} = Rad(T^4 - T_{eq}^4) \Big|_{\partial \Omega_2}, \quad -k^s \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_{\partial \Omega_3 \cup \partial \Omega_4} = Rad(T^4 - T_{eq}^4) \Big|_{\partial \Omega_3 \cup \partial \Omega_4}. \quad (5)$$

Здесь T_{eq} — эффективная температура поверхностей, участвующих в теплообмене, рассчитанная на основе угловых коэффициентов излучения $F_{\partial \Omega_\alpha - \partial \Omega_\beta}$, $\alpha, \beta = \overline{1, 4}$. Формулы для вычисления $F_{\partial \Omega_\alpha - \partial \Omega_\beta}$ представлены в работе [36].

2.2. Условия на фронте кристаллизации

Температура на фронте кристаллизации равна температуре плавления. В безразмерном виде получим

$$T(t, r, \zeta_0(t, r)) = 1. \quad (6)$$

Из закона сохранения внутренней энергии следует условие Стефана:

$$k^l (\partial T / \partial n) \Big|_{z=\zeta_0(r)-} - k^s (\partial T / \partial n) \Big|_{z=\zeta_0(r)+} = St [v_p(t) - \partial \zeta_0 / \partial t] (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_z). \quad (7)$$

Здесь $v_g(t) = v_p(t) - \partial \zeta_0 / \partial t$ — отклонение скорости фронта кристаллизации от скорости вытягивания; \mathbf{n} — вектор внешней нормали к фронту кристаллизации; \mathbf{e}_z — единичный орт, сонаправленный с осью Oz .

2.3. Мениск

Свободная поверхность жидкости вблизи границы расплав–кристалл искривляется и образует мениск. Средняя кривизна мениска, поверхностное натяжение жидкости и сила тяжести связаны уравнением Юнга–Лапласа для капиллярного давления: [25, 37]:

$$\zeta_1(t, r) = \frac{2}{Bo} \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right), \quad (8)$$

здесь R_1 и R_2 — главные радиусы кривизны мениска:

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

Граничные условия для уравнения (8) имеют вид:

$$\zeta_1(t, R) = \zeta_0(t, R), \quad \partial\zeta_1/\partial r|_{r=R} = 0, \quad (9)$$

где R — радиус тройной точки.

2.4. Изменение радиуса кристалла

Для определения радиуса тройной точки R используется условие, предложенное в работах [24, 25, 38]:

$$\frac{\partial R}{\partial t} = \left[v_p(t) - \frac{\partial\zeta_0}{\partial t} \right] \operatorname{tg}[\theta(t) - \theta_{\text{eq}}]. \quad (10)$$

Здесь θ_{eq} — равновесный угол смачивания. Из (10) следует, что при $\theta > \theta_{\text{eq}}$ радиус тройной точки увеличивается, а при $\theta < \theta_{\text{eq}}$ радиус уменьшается. Так как после затвердевания радиус точки, лежащей на поверхности кристалла, остается неизменным, форма боковой поверхности $R_s(t, z)$ может быть найдена из уравнения переноса:

$$\frac{\partial R_s}{\partial t} + v_p(t) \frac{\partial R_s}{\partial z} = 0, \quad (11)$$

дополненного соответствующим граничным условием (10).

2.5. Изменение объема расплава

Верхний торец кристалла движется со скоростью вытягивания

$$\frac{\partial Z_A}{\partial t} = v_p(t). \quad (12)$$

Из закона сохранения массы кристаллизующегося вещества

$$\frac{d}{dt} (\rho^l V^l + \rho^s V^s) = 0$$

следует уравнение, описывающее изменение объема расплава с течением времени:

$$\frac{dV^l}{dt} = -\frac{1}{\rho^l} \int_{\zeta_0(t, r)} [\nu_p(t) - \partial\zeta_0/\partial t] (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_z) d\gamma. \quad (13)$$

Таким образом, условия (6)–(13) полностью определяют динамику тройной точки и движущихся границ.

3. Метод решения

3.1. Преобразование системы координат

Основу метода решения задачи (1)–(13) составляет нестационарное преобразование системы координат [39]: физическая область $\Omega(t, r, z)$ отображается в расчетную область $\Omega(\tilde{t}, \xi, \eta)$ (см. Рис. 3). В новой системе положение границ $z = Z_\alpha(t, r)$, где $\alpha = 0, 4$, зафиксировано и совпадает с координатными линиями $\eta = \alpha$, а границы

$$R_0(t, z) = 0, \quad R_1(t, z) = \begin{cases} R, & z < \zeta_0(t, R), \\ R_s(t, z), & z > \zeta_0(t, R), \end{cases} \quad R_2(t, z) = 1,$$

соответственно, переходят в прямые $\xi = 0$, $\xi = 1$, $\xi = 2$. Подобласти $\Omega_{\alpha\beta}$ в новой системе координат (см. Рис. 3б) становятся прямоугольниками $S_{\alpha\beta}$, $\alpha = 0, 3$, $\beta = 0, 1$.

В общем случае системы координат (t, r, z) и (\tilde{t}, ξ, η) связаны выражениями:

$$t = \tilde{t}, \quad r = \chi(\tilde{t}, \xi, \eta), \quad z = \varphi(\tilde{t}, \xi, \eta). \quad (14)$$

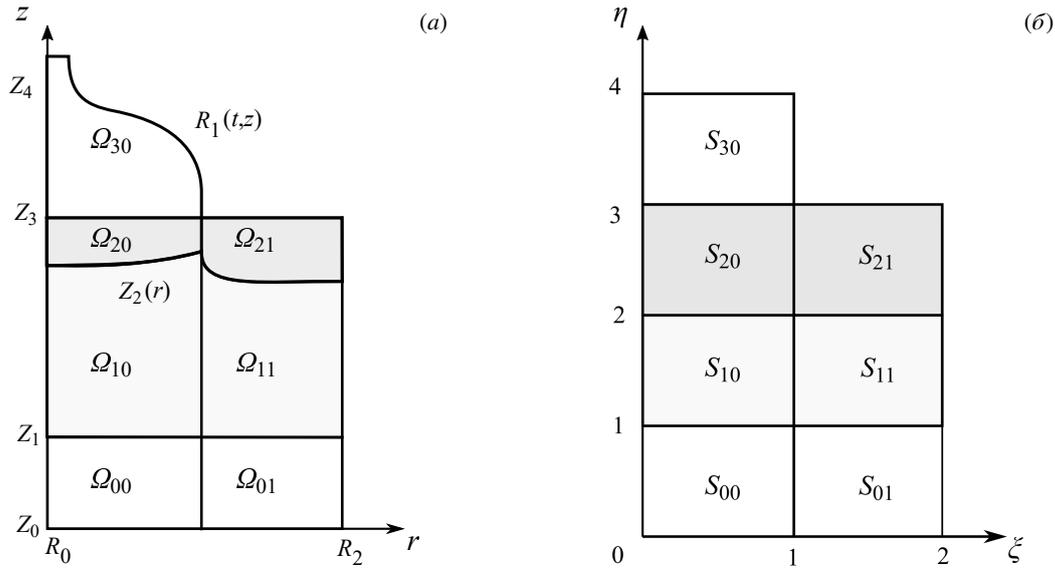


Рис. 3. Преобразование системы координат: физическая область (а); расчетная область (б)

При наличии в физической области твердой и жидкой фаз преобразование (14) является невырожденным, и якобиан $J = \partial(t, r, z) / \partial(\tilde{t}, \xi, \eta) = r_\xi z_\eta - r_\eta z_\xi$ не равен нулю.

3.2. Основные уравнения в расчетной системе координат

Уравнение теплопроводности в расплаве, тигле и флюсе (1) в расчетной системе координат принимает вид [40, 41]:

$$c_p \rho \left[\frac{\partial(rJT)}{\partial \tilde{t}} - \frac{\partial(rUT)}{\partial \xi} - \frac{\partial(rVT)}{\partial \eta} \right] = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(K^{\xi\xi} \frac{\partial T}{\partial \xi} + K^{\xi\eta} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(K^{\eta\xi} \frac{\partial T}{\partial \xi} + K^{\eta\eta} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right). \tag{15}$$

Здесь U и V — контравариантные скорости: $U = r_t z_\eta - z_t r_\eta$, $V = r_t z_\xi - z_t r_\xi$. Коэффициенты $K^{\xi\xi}$, $K^{\xi\eta}$, $K^{\eta\xi}$, $K^{\eta\eta}$ из (15) вычисляются следующим образом: $K^{\xi\xi} = kr (r_\eta^2 + z_\eta^2) / J$, $K^{\eta\eta} = kr (r_\xi^2 + z_\xi^2) / J$, $K^{\xi\eta} = K^{\eta\xi} = -kr (r_\xi r_\eta + z_\xi z_\eta) / J$. Аналогичным образом преобразуются уравнение теплопроводности в кристалле (2) и граничные условия (3)–(5). Условие Стефана (7) в расчетной системе координат становится следующим:

$$\left(K^{\eta\xi} \frac{\partial T}{\partial \xi} + K^{\eta\eta} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) \Big|_{\eta=2-0} - \left(K^{\eta\xi} \frac{\partial T}{\partial \xi} + K^{\eta\eta} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) \Big|_{\eta=2+0} = \text{Str} r_\xi [v_p(t) - \partial \zeta_0 / \partial t].$$

Якобиан преобразования системы координат и контравариантные скорости не являются независимыми величинами и связаны уравнением:

$$\frac{\partial(rJ)}{\partial \tilde{t}} = \frac{\partial(rU)}{\partial \xi} + \frac{\partial(rV)}{\partial \eta}, \tag{16}$$

выражающим закон изменения площади в физической системе координат.

3.3. Приближенное выражение формы мениска

Решение уравнения Лапласа для капиллярного давления (8), записанного в расчетной системе координат, является отдельной трудоемкой задачей. Поэтому в данной работе для определения формы мениска используются приближенные аналитические выражения, полученные в [42] из уравнения (8). Соответствующие формулы связывают высоту мениска h , радиус тройной точки R и величину контактного угла θ :

$$h = \sqrt{\text{Bo}(1 - \cos \alpha) + (\text{Bo} \sin \alpha / 4R)^2} - \text{Bo} \sin \alpha / 4R, \quad \alpha = \pi / 2 - \theta, \tag{17}$$

а также форму мениска $z = \zeta_1(t, r)$, радиус тройной точки и контактный угол:

$$r = f_{\text{мен}}(z, R(t), \theta(t)). \tag{18}$$

Конкретное выражение для $f_{\text{мен}}$ опущено в силу его громоздкости (см. [42], формула (18)).

При заданных h и R контактный угол может быть вычислен из уравнения (17). Форма мениска, соответствующая полученным параметрам, определяется выражением (18). В работе [42] показано, что в диапазоне физических параметров, характерном для материала GaAs и исследуемого технологического процесса, результаты, рассчитанные по приближенным формулам (17), (18), хорошо согласуются с численным решением уравнения (8).

Уравнения (10)–(12), представляющие изменение положения боковой границы и верхнего торца кристалла, рассматриваются в физической системе координат (t, r, z) .

3.4. Разностная схема

Разностная схема для уравнений, описывающих теплообмен в расчетной системе координат (\tilde{t}, ξ, η) , получена с помощью метода конечных объемов на неподвижной прямоугольной сетке. Подробное описание техники построения разностной схемы для моделирования роста кристаллов постоянного радиуса содержится в работе [43]. Консервативная разностная схема для задачи Стефана в области с искривленной боковой границей в декартовой системе координат предложена в работе [44]. Полученные здесь разностные алгоритмы в данной работе обобщаются на случай динамического учета изменения радиуса растущего кристалла. В кратком изложении характерные особенности используемого алгоритма расчета заключаются в следующем.

При аппроксимации производной по времени в уравнении теплопроводности (15) якобиан преобразования $J = r_\xi z_\eta - r_\eta z_\xi$ и контравариантные скорости $U = r_t z_\eta - z_t r_\eta$, $V = r_t z_\xi - z_t r_\xi$ вычисляются таким образом, чтобы они удовлетворяли дискретному аналогу закона сохранения площади (16). Нарушение этого условия приводит к возникновению в аппроксимации уравнения (15) схемных источников/стоков внутренней энергии, пропорциональных шагу интегрирования по времени [45, 46]. При расчете длительных режимов выращивания искусственный источник/сток тепла может существенно исказить динамику процесса. В работе [44] из закона изменения площади контрольного объема в физической области получены явные выражения для вычисления J , U и V , тождественно удовлетворяющие неявной аппроксимации уравнения переноса якобиана в декартовой системе координат. При построении формул применялось дискретное преобразование системы координат. После проведения аналогичных несложных, но громоздких выкладок удается построить выражения отыскания J , U , V в цилиндрической системе координат, удовлетворяющие полностью неявной аппроксимации уравнения (16).

Аппроксимация диссипативных членов в уравнении (15) производится с помощью самосопряженного, отрицательно определенного разностного оператора, рассмотренного в работах [43, 44, 47].

Аппроксимации условий на границе раздела фаз и границах области согласованы с аппроксимациями соответствующих уравнений во внутренних узлах сетки, поэтому на разностном уровне выполнен закон сохранения внутренней энергии. В расчетах используется неявная разностная схема 2-го порядка точности по пространству и 1-го порядка точности по времени.

3.5. Вычислительный алгоритм

Алгоритм решения системы нелинейных сеточных уравнений, полученной при аппроксимации задачи (1)–(13) в расчетной системе координат, основан на специальной схеме расщепления по физическим процессам. Предложенный итерационный процесс может быть использован независимо от нахождения температурных полей внутри ростовой камеры.

На каждом шаге по времени $t = t_k$ сначала проводится расчет теплопереноса в системе тигель–флюс–расплав–кристалл. Моделирование теплообмена осуществляется в области с неподвижными границами, положение которых установлено на предыдущем шаге по времени $t = t_{k-1}$. Из разностных аналогов уравнений (1)–(7) с помощью метода Ньютона определяется поле температуры в расчетной области и скорость движения фронта кристаллизации. Итерационная процедура метода Ньютона состоит из следующих этапов:

- 1) По известному с предыдущего шага по времени (или с предшествующей итерации) распределению температуры на поверхности кристалла, флюса и нагревателя вычисляется эквивалентный поток излучения $q_{\text{eq}} = \text{Rad}(T^4 - T_{\text{eq}}^4)$, падающий на границы $\partial\Omega_2$, $\partial\Omega_3$, $\partial\Omega_4$.
- 2) Из разностных аналогов уравнений теплопроводности (1), (2), дополненных условиями на границах (3)–(5) и на фронте кристаллизации (6), (7), рассчитывается поле температуры внутри области Ω и скорость перемещения границы кристалл/расплав v_g .

Затем этапы 1 и 2 повторяются. Итерации продолжаются до достижения сходимости.

Вектор скорости фронта кристаллизации $\mathbf{v}_g(t_k)$, полученный на предыдущем временном шаге алгоритма, используется для определения нового положения тройной точки и формы движущихся границ. Соответствующая процедура состоит из следующих шагов:

- 1) Вычисляется проекция $v_g(t_k) := v_g^z(t_k)$ скорости фронта кристаллизации на ось Oz . Значение $v_g(t_k)$ при $r = R(t_{k-1})$ используется для определения перемещения тройной точки в вертикальном направлении и, как следствие, подъема $h(t_k)$ мениска над уровнем расплава.
- 2) По известным радиусу $R(t_{k-1})$ и подъему $h(t_k)$ из уравнения (17) определяется контактный угол $\theta(t_k)$. С помощью метода Эйлера из уравнения (10), связывающего dR/dt с $v_g(t_k)$ и $\text{tg}(\theta(t_k) - \theta_{\text{eq}})$, рассчитывается новый радиус тройной точки — $R(t_k)$. Форма мениска задается приближенной формулой (18):

$r = f_{\text{мен}}(z, R(t_k), \theta(t_k))$. Из равенства $\partial \zeta_0 / \partial t = v_p(t_k) - v_g(t_k)$ устанавливается новое положение фронта кристаллизации $\zeta_0(t_k)$.

- 3) Положение верхнего торца кристалла вычисляется из аппроксимации уравнения (12). Форма боковой поверхности кристалла $R_s(t_k)$ перестраивается в соответствии с аналитическим решением уравнения переноса (11). Из закона сохранения массы (13) следует изменение высоты раслава $\Delta h^1(t_k)$, вызванное кристаллизацией. Положение движущихся границ корректируется: вертикальные координаты фронта кристаллизации, мениска, боковой поверхности и верхнего торца кристалла уменьшаются на величину $\Delta h^1(t_k)$. Затем происходит переход на новый временной слой.

Решение модельных задач показало, что разностные аналоги законов сохранения внутренней энергии и площади ячейки выполняются в дискретной среде с высокой точностью, несмотря на существенную деформацию сетки в физической области.

4. Результаты численного моделирования

4.1. Управление изменением радиуса кристалла

Изменение объема твердой и жидкой фаз в ходе выращивания кристаллов методом Чохральского существенным образом влияет на теплоперенос в ростовой камере. Для того чтобы поддерживать рост кристалла постоянного радиуса в течение всего процесса, необходимо динамически управлять температурой нагревателя и/или скоростью вытягивания. Однако для снижения температурных напряжений, возникающих в твердой фазе, кристаллы GaAs обычно выращивают с низкой скоростью: $v_g < 1$ см/ч. Таким образом, скорость вытягивания нельзя использовать в качестве управляющего параметра.

Изменение температуры нагревателя, в отличие от скорости вытягивания, влияет на радиус тройной точки с задержкой: соответствующим возмущениям требуется время для того, чтобы проникнуть вглубь флюса и расплава и достичь поверхности кристалла. Данное обстоятельство усложняет процесс управления и влияет на его устойчивость.

Описанная выше математическая модель может быть использована для анализа методов управления выращиванием с помощью внешнего температурного поля. Для этого систему (1)–(13) необходимо дополнить уравнением, связывающим изменение температуры нагревателя $T_c(t)$ в граничном условии (4) с отклонением радиуса тройной точки R от заданного значения R_{set} :

$$\frac{dT_c}{dt} = g_P \frac{dR}{dt} + g_I (R - R_{\text{set}}), \quad (19)$$

где g_P и g_I — параметры управления.

В теории управления выражение вида (19) называется пропорционально–интегральным регулятором. Его эффективность и устойчивость определяются соотношением характерных времен теплопроводности в кристалле $t_{\text{ж}}^s$, расплаве $t_{\text{ж}}^l$ и флюсе $t_{\text{ж}}^e$ и времени t_{PI} , обуславливающего скорость, с которой регулятор (19) стремится изменить температуру нагревателя и обеспечить выполнение равенства $R = R_{\text{set}}$. Если $t_{PI} \ll t_{\text{ж}}$, то радиус тройной точки реагирует на изменение внешнего температурного поля с существенной задержкой, и с течением времени управление ростом кристалла может потерять устойчивость. Поэтому веса g_P и g_I в уравнении (19) необходимо выбирать таким образом, чтобы выполнялось соотношение: $t_{PI} \sim t_{\text{ж}}$.

Для изучения влияния алгоритма управления (19) на радиус кристалла проведена серия вычислительных экспериментов, в которых использованы физические параметры кристалла, расплава, тигля и флюса, представленные в работах [5, 48, 49]. Предполагалось, что в тигель с отношением сторон $H_h/R_c \approx 2$ загружается 4 кг поликристаллического GaAs и 0.5 кг порошка борного ангидрида. Температура нагревателя повышается, в результате чего образуется расплав арсенида галлия, покрытый слоем флюса. В начальный момент времени затравка — кристалл радиусом $0.5R_c$ и высотой $R_c/3$, приводилась в контакт с расплавом. В качестве начального распределения температуры в расчетной области и на нагревателе использовалось решение стационарной задачи теплопроводности, в которой боковая поверхность кристалла считалась неподвижной. Характерные времена процессов в системе составляли: $t_g = R_c/v_p \approx 4 \cdot 10^4$ с, $t_{\text{ж}}^s = R_c^2/\kappa^s \approx 5 \cdot 10^2$ с, $t_{\text{ж}}^l = R_c^2/\kappa^l \approx 10^3$ с. Шаг по времени равнялся $\tau \approx 0.01 t_{\text{ж}}^l$.

В расчетах внутри фаз применялась сетка, равномерная в радиальном направлении (50 узлов в кристалле, 50 узлов во флюсе). Сетка в вертикальном направлении внутри расплава, кристалла и флюса сгущалась к межфазным границам (40 узлов в тигле, 100 узлов в расплаве, 100 узлов в кристалле и 30 узлов во флюсе). Для того чтобы подтвердить достоверность полученных результатов, численные эксперименты были также проведены на двух более подробных сетках: число узлов в каждом направлении увеличивалось в 2 и 4 раза соответственно. Расчеты показали, что результаты, полученные на основной и подробной сетках, отличаются менее чем на 1%.

4.2. Рост кристалла при постоянной температуре нагревателя

На рисунке 4 приведены результаты моделирования режима выращивания, в котором на протяжении всего процесса температура нагревателя не изменялась, то есть $g_P = g_I = 0$ и $dT_c/dt = 0$. Динамика движения тройной

точки определяется в этом случае преимущественно переносом энергии в системе — количеством теплоты, поступающим к фронту из жидкой фазы, отводом тепла через боковую стенку кристалла, выделением энергии в ходе кристаллизации:

$$k^l(\partial T/\partial n)|_{z=\zeta_0(t,r)-} - St[v_p(t) - \partial\zeta_0/\partial t](\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_z) = k^s(\partial T/\partial n)|_{z=\zeta_0(t,r)+} \quad (20)$$

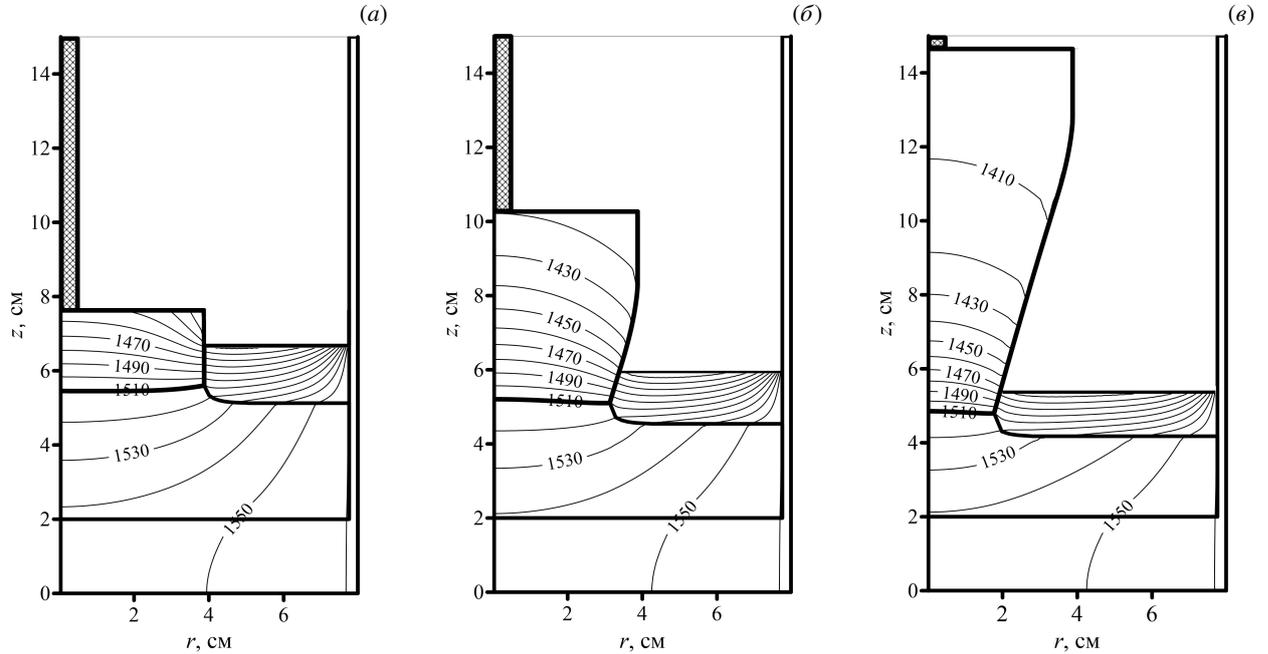


Рис. 4. Распределение размерной температуры в кристалле, расплаве, флюсе и тигле на начальной (а), развитой (б) и конечной (в) стадиях процесса

Результаты расчетов показывают, что увеличение площади боковой поверхности кристалла в ходе роста приводит к тому, что поток тепла через стенку и, как следствие, градиент температуры в твердой фазе в окрестности фронта кристаллизации также увеличиваются. При этом поток тепла, поступающий к фронту из жидкой фазы, на протяжении всего процесса остается практически постоянным. В этом случае, в соответствии с балансным соотношением для внутренней энергии (20), количество кристаллизующегося материала, а значит, и радиус кристалла уменьшаются.

На развитой стадии процесса контактный угол, образующийся между расплавом и кристаллом, также почти не изменяется, и радиус кристалла уменьшается с постоянной скоростью (см. Рис. 4в). Предложенный вычислительный алгоритм не допускает образования мениска, форма которого определяется многозначной функцией. Однако в реальном процессе контактный угол может принимать отрицательные значения, поэтому уменьшение радиуса кристалла будет происходить быстрее.

4.3. Применение интегрального регулятора температуры

Для получения кристалла постоянного радиуса при его вытягивании из расплава необходимо специальным образом понижать температуру внутри ростовой камеры. При условии $g_p = 0$ управление (19) принимает вид:

$$\frac{dT_c}{dt} = g_I(R - R_{set}). \quad (21)$$

Такой регулятор температуры называется интегральным. Из уравнения (21) следует, что при $R < R_{set}$ температура на стенке тигля автоматически понижается, а при $R > R_{set}$ — повышается.

Моделирование показывает, что при интегральном регулировании температуры радиус тройной точки в ходе процесса колеблется в окрестности заданного значения $R = R_{set}$. Характерное поведение системы при некотором значении $g_I = g_I^*$ приведено на рисунке 5, на котором видно, что частота и амплитуда колебаний радиуса с течением времени увеличиваются. Изменение температуры, происходящее на стенке тигля, проникает вглубь ростовой камеры и влияет на радиус кристалла с запаздыванием. Колебания температуры нагревателя и радиуса кристалла сдвинуты относительно друг друга по фазе (Рис. 5б). Постепенное увеличение сдвига фаз приводит к тому, что со временем амплитуда колебаний существенно возрастает, и процесс теряет устойчивость. При увеличении веса g_I наблюдается рост частоты и амплитуды колебаний радиуса кристалла.

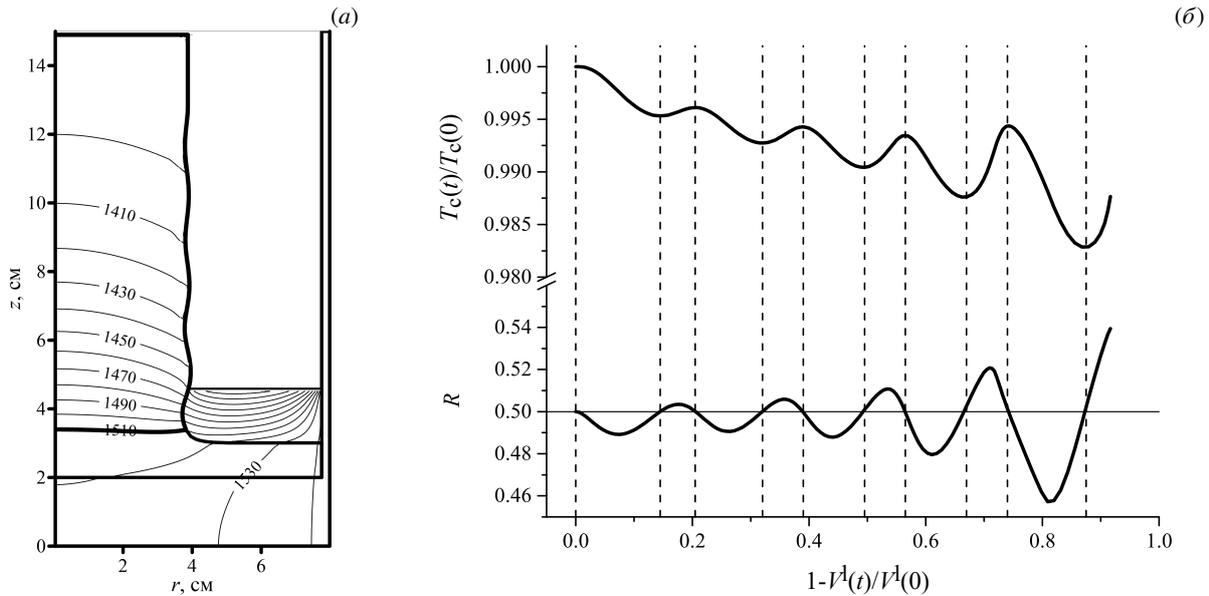


Рис. 5. Интегральное регулирование температуры, $g_1 = g_1^*$: распределение размерной температуры на поздней стадии процесса кристаллизации (а); зависимость безразмерной температуры нагревателя T_c и безразмерного радиуса тройной точки R от доли кристаллизовавшегося расплава (б)

На рисунке 6 представлены результаты расчетов, полученные при разных g_1 : $g_1^*/2$, $g_1^*/4$, $g_1^*/8$. С уменьшением веса g_1 процесс выращивания становится более устойчивым, так как в этом случае, увеличивается характерное время t_{PI} , изменение температуры нагревателя происходит более плавно, частота колебаний радиуса кристалла снижается. Однако на начальной стадии процесса эффективность управления падает, что приводит к росту максимального отклонения радиуса кристалла от R_{set} .

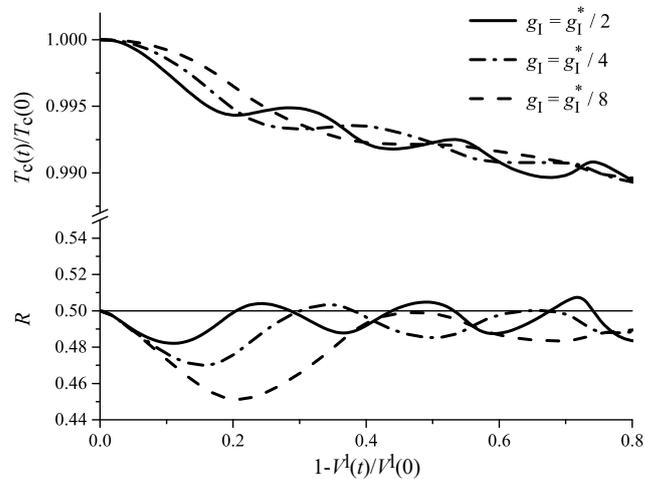


Рис. 6. Зависимость безразмерной температуры нагревателя T_c и радиуса кристалла R от доли кристаллизовавшегося расплава при различных значениях веса g_1

Колебания радиуса, аналогичные наблюдаемым в расчетах, описаны в классической экспериментальной работе, посвященной автоматическому управлению температурой нагревателя на основе измерений массы растущего кристалла [50].

4.4. Пропорционально-интегральное регулирование температуры

Пропорциональный член $g_P dR/dt$ в регуляторе (19) тормозит изменение температуры нагревателя в том случае, если dR/dt и $(R - R_{set})$ имеют разный знак, что позволяет увеличить характерное время t_{PI} без снижения эффективности управления.

Результаты моделирования применения пропорционально-интегрального регулятора температуры представлены на рисунке 7. Вес $g_P = g_P^*$ в уравнении (19) выбран таким, чтобы подавить колебания радиуса кристалла, возникающие при использовании чисто интегрального регулятора, то есть когда $g_I = g_I^*$. Рисунок 7б

демонстрирует, что в ходе процесса температура нагревателя монотонно убывает, тем самым компенсируется изменение объема твердой и жидкой фаз. На развитой стадии происходит рост кристалла практически постоянного радиуса. Уменьшение веса g_P приводит к тому, что, как и ранее, радиус растущего кристалла колеблется в окрестности заданного значения $R = R_{set}$ (см. Рис. 8а). При этом, в отличие от расчета с интегральным регулятором температуры, частота и амплитуда колебаний с течением времени практически не изменяются.

Применение чисто пропорционального регулирования ($g_I = 0$) при умеренных значениях параметра g_P имеет следствием уменьшение радиуса кристалла (Рис. 8б). Вместе с тем при $g_P \geq 10g_P^*$ в ходе процесса радиус кристалла медленно увеличивается.

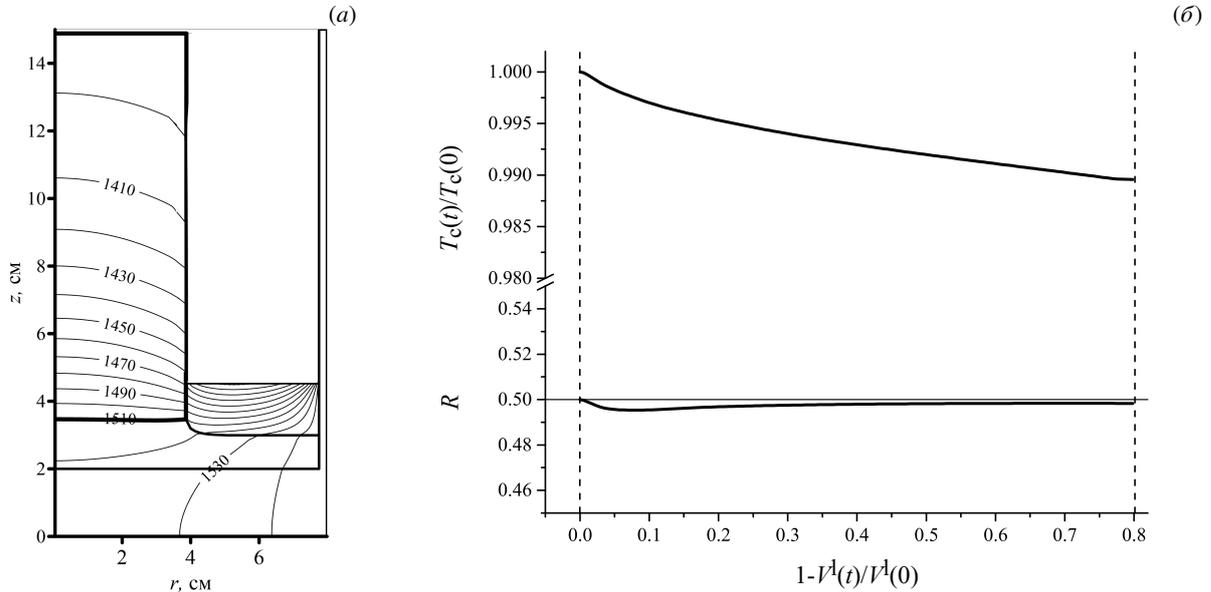


Рис. 7. Пропорционально–интегральное регулирование температуры: распределение размерной температуры в области на поздней стадии процесса кристаллизации (а); зависимость безразмерной температуры нагревателя T_c и безразмерного радиуса тройной точки R от доли кристаллизовавшегося расплава (б)

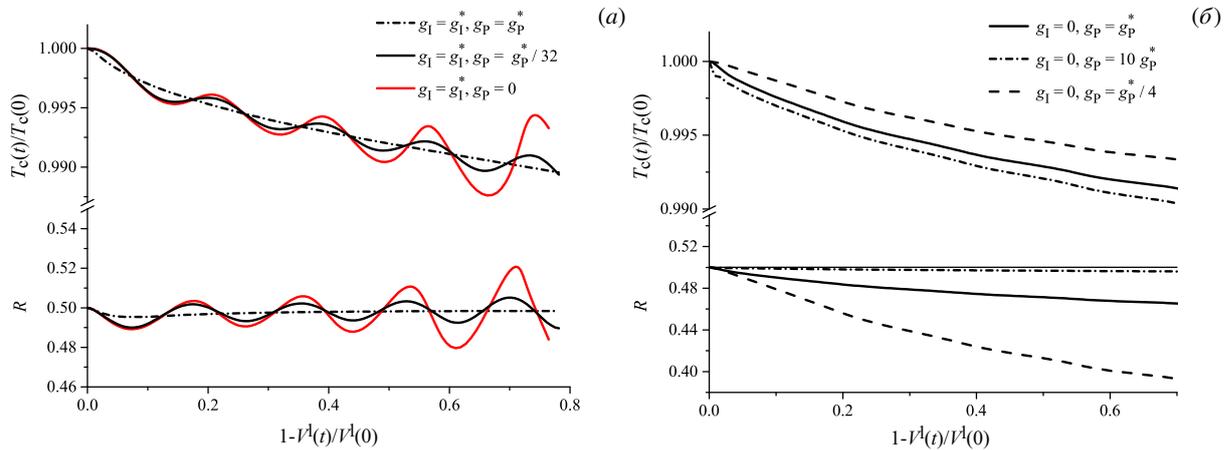


Рис. 8. Зависимость безразмерной температуры нагревателя T_c и безразмерного радиуса тройной точки R от доли кристаллизовавшегося расплава при различных значениях веса g_P : пропорционально–интегральный регулятор (а), пропорциональный регулятор (б)

Результаты расчетов показывают, что нестационарная модель процесса (1)–(13), дополненная уравнением (19), может быть использована для получения приближенных зависимостей температуры нагревателя от объема расплава, обеспечивающих рост кристалла постоянного радиуса.

4.5. Квазистационарная модель процесса. Сопоставление результатов расчетов

Процессы теплопереноса в рассматриваемой системе протекают существенно быстрее, чем изменяются параметры фаз (их объем, форма межфазных границ), так как имеет место условие: $t_g \gg t_x$. Поэтому для

изучения внешнего температурного режима, обеспечивающего рост кристалла постоянного радиуса, также может применяться квазистационарная модель процесса [37, 48]. В рамках квазистационарного приближения процесс кристаллизации рассматривается как серия стационарных состояний, однозначно определяющихся внешним температурным полем, скоростью вытяжки и объемом расплава. При этом предполагается, что рост кристалла постоянного радиуса осуществляется со скоростью, равной скорости вытягивания.

Моделирование каждого из стационарных состояний осуществляется в области, изображенной на рисунке 2 при $R_s(t, z) \equiv R$. В силу закона сохранения массы геометрическая конфигурация стационарных задач однозначно определяется объемом расплава V^1 . Для описания процессов теплопереноса в тигле, флюсе, расплаве и кристалле подходят уравнения (1), (2), записанные в стационарной форме, и граничные условия (3)–(5). В рамках квазистационарного приближения справедливы равенство $\partial \zeta_0 / \partial t = 0$ и условие Стефана (7), имеющее вид:

$$k^l (\partial T / \partial n) \Big|_{z=\zeta_0(r)-} - k^s (\partial T / \partial n) \Big|_{z=\zeta_0(r)+} = \text{St} v_g (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_z). \quad (22)$$

Предполагается, что скорость роста равна скорости вытягивания, то есть $v_g = v_p$. Форма мениска определяется уравнением Юнга–Лапласа (8) с граничными условиями (9). Условием роста кристалла постоянного радиуса является равенство контактного угла равновесному:

$$\theta = \theta_{\text{eq}}. \quad (23)$$

Как и ранее, при заданных радиусе кристалла R_{set} и подъеме h тройной точки над уровнем расплава, реальный контактный угол θ может быть вычислен с помощью приближенной формулы (17) (соответствующий корень при фиксированных R , v_g и T_c обозначен далее как $\theta(R, v_g, T_c)$). Таким образом, условие для определения радиуса кристалла (23) записывается в виде:

$$\theta(R, v_g, T_c) = \theta_{\text{eq}}. \quad (24)$$

В реальном процессе скорость роста кристалла отличается от скорости вытягивания. В работе [51] для плоского фронта кристаллизации из закона сохранения массы расплава (13) получена приближенная формула, связывающая скорости v_p и v_g :

$$v_g = v_p \left[1 - \frac{1}{\rho^1} \frac{R}{R_c} \right]^{-1}. \quad (25)$$

Из оценки (25) следует, что для $R_{\text{set}} = 0.5 R_c$ и $1/\rho^1 = 1.05$ реальная скорость роста превышает скорость вытягивания: $v_g \approx 1.3 v_p$. Поэтому, наряду с классической квазистационарной моделью, описанной выше, рассмотрена модифицированная модель, в которой скорость роста в условии Стефана (22) находится по формуле (25).

Вычислительный алгоритм решения квазистационарной задачи подробно рассмотрен в работе [52]. Ее реализация состоит из внешнего и внутреннего итерационных процессов:

– во внутренних итерациях при фиксированных значениях управляющих параметров (R^* , v_g^* , T_c^*) из разностных аналогов нелинейных уравнений, описывающих динамику системы, 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 $\theta(R^*, v_g^*, T_c^*)$;

– во внешнем цикле осуществляется поиск температуры нагревателя, обеспечивающей при фиксированных R^* и v_g^* выполнение условия (24). Для решения нелинейного уравнения (24) используется метод Ньютона:

$$\frac{\theta(R^*, v_g^*, T_c^k + \delta) - \theta(R^*, v_g^*, T_c^k)}{\delta} \Delta T = -[\theta(R^*, v_g^*, T_c^k) - \theta_{\text{eq}}], \quad T_c^{k+1} = T_c^k + \Delta T.$$

Здесь k — номер итерации; δ — шаг численного дифференцирования; значения $\theta(R^*, v_g^*, T_c^k + \delta)$ и $\theta(R^*, v_g^*, T_c^k)$ определяются численно из решения соответствующих задач во внутреннем цикле итераций.

Итерационный процесс ведется до достижения сходимости. Результаты расчетов, представленные в работе [52], показывают, что метод Ньютона сходится, как правило, за 8–10 итераций.

Для сопоставления результатов расчетов для $R_{\text{set}} = 0.5 R_c$ в рамках нестационарного приближения ($g_p = g_p^*$, $g_l = g_l^*$), с результатами вычислений по классической и модифицированной квазистационарным моделям при различных значениях V^1 во всех рассмотренных случаях использовалась одинаковая пространственная сетка. Соответствующие зависимости температуры нагревателя от объема расплава приведены на рисунке 9. Как показывают результаты расчетов, для кристаллизации 80% расплава температура нагревателя в процессе должна быть понижена на 20 К, что составляет приблизительно 1% от ее начального значения. В работе [26] рассматривался рост кристалла GaAs в близких условиях (при аналогичных геометрии тигля, массах кристалла, расплава и флюса, свойствах фаз). Падение температуры нагревателя при выращивании кристалла с $R_{\text{set}} = 0.5 R_{\text{cr}}$ также составило примерно 20 К.

Несмотря на то, что модифицированная квазистационарная модель не учитывает ряд важных особенностей технологического процесса, результаты, полученные с ее помощью, хорошо согласуются с данными нестационарного моделирования. Время счета для одного стационарного состояния даже на персональном

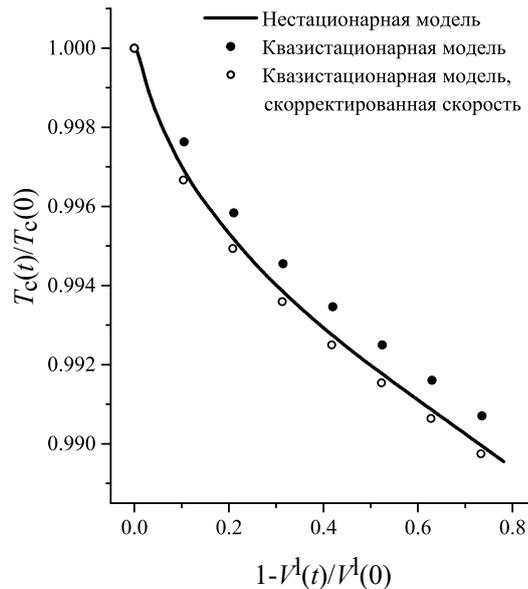


Рис. 9. Зависимости безразмерной температуры нагревателя от доли кристаллизованного расплава расплава, $R_{\text{set}} = 0.5R_c$

компьютере составляет доли секунды. Поэтому в рамках области своего применения квазистационарная математическая модель процесса является одним из наиболее эффективных инструментов предварительного анализа технологии процесса. Более сложные и затратные с вычислительной точки зрения нестационарные модели следует применять при изучении длительных процессов, в которых форма кристалла значительно изменяется и существенную роль играет интенсивное конвективное движение в расплаве.

5. Заключение

Рассмотрена нестационарная осесимметричная математическая модель процесса выращивания монокристаллов методом Чохральского, учитывающая теплоперенос в системе тигель–кристалл–расплав–флюс, образование мениска у боковой поверхности кристалла, движение фронта кристаллизации, изменение радиуса кристалла в ходе процесса. Для решения задачи с внутренними подвижными границами разработан численный алгоритм, в основе которого лежит метод выпрямления фронта и геометрически консервативная разностная схема, обеспечивающая выполнение законов сохранения массы и внутренней энергии. Предложенный подход позволяет исследовать длительные технологические режимы, в которых существенную роль играют нестационарные процессы, протекающие внутри фаз и на межфазных границах, а форма кристалла значительно изменяется по мере его роста.

В настоящей работе вычислительный алгоритм применялся для изучения методов управления радиусом кристалла с помощью внешнего температурного поля. Показано, что, если температура нагревателя на протяжении всего процесса остается неизменной, радиус кристалла с течением времени уменьшается. Использование в рамках модели интегрального регулятора температуры приводит к тому, что радиус тройной точки колеблется в окрестности заданного значения; при этом частота и амплитуда колебаний радиуса с течением времени увеличиваются. Применение пропорционально-интегрального регулятора позволяет поддерживать рост кристалла практически постоянного радиуса. В этом случае процессы переноса протекают в системе существенно быстрее, чем изменяются параметры фаз, и для описания роста кристалла можно прибегнуть к упрощенной квазистационарной постановке задачи. Вычислительные эксперименты показали, что в рассмотренном диапазоне параметров результаты, полученные в рамках квазистационарной модели, хорошо согласуются с результатами нестационарного моделирования роста кристалла постоянного радиуса. Однако детальное изучение влияния конвекции в расплаве, внешних температурных полей, скорости вытягивания и других условий выращивания на свойства полученного материала требует применения нестационарных самосогласованных моделей кристаллизации.

Автор признателен профессору О.С. Мажоровой (ИПМ им. М.В. Келдыша РАН) за обсуждение результатов и ценные замечания.

Литература

1. Любимова Т.П., Паршакова Я.Н. Влияние вращательных вибраций на течения и теплообмен при выращивании кристаллов германия вертикальным методом Бриджмена // Вычислительная механика сплошных сред. 2008. Т. 1, № 1. С. 57–67. DOI: 10.7242/1999-6691/2008.1.1.6

2. Любимова Т.П., Файзрахманова И.С. Численное моделирование влияния магнитного поля на процесс выращивания кристаллов вертикальным методом Бриджмена // Вычислительная механика сплошных сред. 2008. Т. 1, № 3. С. 85–95. DOI: 10.7242/1999-6691/2008.1.3.30
3. Любимова Т.П., Скуридин Р.В. Управление термо- и концентрационно-капиллярными течениями при выращивании кристаллов методом жидкой зоны в условиях высокочастотного вибрационного воздействия // Вычислительная механика сплошных сред. 2016. Т. 9, № 1. С. 109–120. DOI: 10.7242/1999-6691/2016.9.1.10
4. Вереzub Н.А., Простомолотов А.И. Гидромеханика при выращивании кристаллов из водно-солевых растворов // Вычислительная механика сплошных сред. 2022. Т. 15, № 1. С. 98–114. DOI: 10.7242/1999-6691/2022.15.1.8
5. Smirnova O.V., Kalaev V.V. 3D unsteady numerical analysis of conjugate heat transport and turbulent/laminar flows in LEC growth of GaAs crystals // International Journal of Heat and Mass Transfer. 2004. Vol. 47, no. 2. P. 363–371. DOI: 10.1016/S0017-9310(03)00404-6
6. Fainberg J., Vizman D., Friedrich J., Mueller G. A new hybrid method for the global modeling of convection in CZ crystal growth configurations // Journal of Crystal Growth. 2007. Vol. 303. P. 124–134. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2006.11.346
7. Бессонов О.А., Полежаев В.И. Карта режимов и пространственные эффекты конвективных взаимодействий в гидродинамической модели метода Чохральского // Известия Российской академии наук. Механика жидкости и газа. 2014. № 2. С. 16–28.
8. Chen S., Li S., Tan X. 3D Unsteady Simulation of the Transport Characteristics in the LEC Melt of In-Doped GaAs // International Journal of Multimedia and Ubiquitous Engineering. 2016. Vol. 11. P. 21–30. DOI: 10.14257/ijmue.2016.11.5.03
9. Faiez R., Najafi F., Rezaei Y. Convection interaction in GaAs/LEC growth model // International Journal of Computational Engineering Research. 2015. Vol. 5. P. 12–23. URL: https://www.ijceronline.com/papers/Vol5%5C_issue7/C0507012023.pdf
10. Verezub N., Prostromolotov A. Growth chamber gas dynamics in Cz silicon single crystal growth process // Modern Electronic Materials. 2024. Vol. 10. P. 185–193. DOI: 10.3897/j.moe.10.3.140627
11. Cen X., Li Y.S., Zhan J. Three dimensional simulation of melt flow in Czochralski crystal growth with steady magnetic fields // Journal of Crystal Growth. 2012. Vol. 340. P. 135–141. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2011.11.029
12. Atia A., Ghernaout B., Bouabdallah S., Bessaih R. Three-dimensional oscillatory mixed convection in a Czochralski silicon melt under the axial magnetic field // Applied Thermal Engineering. 2016. Vol. 105. P. 704–715. DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2016.03.087
13. Kondratyev A., Demina S., Smirnov A., Kalaev V., Ratnieks G., Kadinski L., Sattler A. 3D unsteady and steady modeling of heat and mass transfer during Cz Si crystal growth with a horizontal magnetic field // International Journal of Heat and Mass Transfer. 2021. Vol. 178. 121604. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2021.121604
14. Ding J., Li Y., Liu L. Effect of cusp magnetic field on the turbulent melt flow and crystal/melt interface during large-size Czochralski silicon crystal growth // International Journal of Thermal Sciences. 2021. Vol. 170. 107137. DOI: 10.1016/j.ijthermalsci.2021.107137
15. Chen S., Liu W., Wen Z., Liu Y., Jiang F., Xue Z., Wei X., Li W. Effects of Induced Current in Crystals on the Melt Flow and the Melt–Crystal Interface during Industrial 300 mm Czochralski Silicon Crystal Growth under a Transverse Magnetic Field // Crystal Growth & Design. 2023. Vol. 23. P. 4480–4490. DOI: 10.1021/acs.cgd.3c00227
16. Простомолотов А.И., Вереzub Н.А. Механика процессов получения кристаллических материалов. М.: НИТУ «МИСиС», 2023. 568 с.
17. Wang Z., Brown R.A. Simulation of almost defect-free silicon crystal growth // Journal of Crystal Growth. 2001. Vol. 231. P. 442–447. DOI: 10.1016/S0022-0248(01)01433-6
18. Kumar M.A., Srinivasan M., Ramasamy P. Numerical simulation of thermal stress distributions in Czochralski-grown silicon crystals // AIP Conference Proceedings. 2018. Vol. 1942. 100004. DOI: 10.1063/1.5028969
19. Wang Z., Ren Y., Ma W., et al. Crystal surface heat transfer during the growth of 300mm monocrystalline silicon by the Czochralski process // International Journal of Heat and Mass Transfer. 2025. Vol. 236. 126259. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2024.126259
20. Mukaiyama Y., Sueoka K., Maeda S., Iizuka M., Mamedov V.M. Unsteady numerical simulations considering effects of thermal stress and heavy doping on the behavior of intrinsic point defects in large-diameter Si crystal growing by Czochralski method // Journal of Crystal Growth. 2020. Vol. 532. 125433. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2019.125433
21. Chatelain M., Albaric M., Pelletier D., Veirman J., Letty E. Numerical method for thermal donors formation simulation during silicon Czochralski growth // Solar Energy Materials and Solar Cells. 2021. Vol. 219. 110785. DOI: 10.1016/j.solmat.2020.110785
22. Li Z., Smirnov A. Application of computer modeling to pulling rate and productivity of Czochralski pullers in PV Si crystal growth // Journal of Crystal Growth. 2023. Vol. 611. 127178. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2023.127178
23. Tang X., Chappa G.K., Vieira L., Holena M., Dropka N. Decision Tree-Supported Analysis of Gallium Arsenide Growth Using the LEC Method // Crystals. 2023. Vol. 13. 1659. DOI: 10.3390/cryst13121659
24. CROWLEY A.B. Mathematical Modelling of Heat Flow in Czochralski Crystal Pulling // IMA Journal of Applied Mathematics. 1983. Vol. 30. P. 173–189. DOI: 10.1093/imamat/30.2.173
25. Derby J.J., Brown R.A. On the dynamics of Czochralski crystal growth // Journal of Crystal Growth. 1987. Vol. 83. P. 137–151. DOI: 10.1016/0022-0248(87)90514-8

26. *Thomas P.D., Derby J.J., Atherton L.J., Brown R.A., Wargo M.J.* Dynamics of liquid-encapsulated czochralski growth of gallium arsenide: Comparing model with experiment // *Journal of Crystal Growth*. 1989. Vol. 96, no. 1. P. 135–152. DOI: 10.1016/0022-0248(89)90284-4
27. *Van den Bogaert N., Dupret F.* Dynamic global simulation of the Czochralski process I. Principles of the method // *Journal of Crystal Growth*. 1997. Vol. 171. P. 65–76. DOI: 10.1016/S0022-0248(96)00488-5
28. *Raufeisen A., Breuer M., Botsch T., Delgado A.* Transient 3D simulation of Czochralski crystal growth considering diameter variations // *Journal of Crystal Growth*. 2009. Vol. 311. P. 695–697. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2008.09.073
29. *Sabanskis A., Bergfelds K., Muiznieks A., Schröck T., Krauze A.* Crystal shape 2D modeling for transient CZ silicon crystal growth // *Journal of Crystal Growth*. 2013. Vol. 377. P. 9–16. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2013.04.055
30. *Polezhaev V.I., Bessonov O.A., Nikitin N.V., Nikitin S.A.* Convective interaction and instabilities in GaAs Czochralski model // *Journal of Crystal Growth*. 2001. Vol. 230, no. 1/2. P. 40–47. Proceedings of the Third International Workshop on Modeling in Crystal Growth. DOI: 10.1016/S0022-0248(01)01317-3
31. *Li M., Hu W., Chen N., Zeng D., Tang Z.* Numerical analysis of LEC growth of GaAs with an axial magnetic field // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2002. Vol. 45, no. 13. P. 2843–2851. DOI: 10.1016/S0017-9310(01)00355-6
32. *Биберин В.И., Освенский В.Б., Смирнов В.А.* Исследование гидродинамики расплава в процессе выращивания арсенида галлия по Чохральскому из-под слоя флюса // *Кристаллография*. 1985. Т. 30. С. 980–985.
33. *Kakimoto K., Eguchi M., Watanabe H., Hibiya T.* Direct observation by X-ray radiography of convection of boric oxide in the GaAs liquid encapsulated czochralski growth // *Journal of Crystal Growth*. 1989. Vol. 94, no. 2. P. 405–411. DOI: 10.1016/0022-0248(89)90015-8
34. *Geng X., Wu X.B., Guo Z.Y.* Numerical simulation of combined flow in Czochralski crystal growth // *Journal of Crystal Growth*. 1997. Vol. 179, no. 1/2. P. 309–319. DOI: 10.1016/S0022-0248(97)00109-7
35. *Hjelling L.N., Walker J.S.* Melt motion in a Czochralski crystal puller with an axial magnetic field: motion due to buoyancy and thermocapillarity // *Journal of Fluid Mechanics*. 1987. Vol. 182. P. 335–368. DOI: 10.1017/S0022112087002362
36. *Берлинер Л.Б., Гвелесиани Л.А.* Численный расчет радиационного теплообмена для направленной кристаллизации CdZnTe // *Вестник МИТХТ им. М.В. Ломоносова*. 2010. Т. 5, № 5. С. 13–18.
37. *Derby J.J., Brown R.A., Geysling F.T., Jordan A.S., Nikolakopoulou G.A.* Finite Element Analysis of a Thermal-Capillary Model for Liquid Encapsulated Czochralski Growth // *Journal of The Electrochemical Society*. 1985. Vol. 132, no. 2. P. 470–482. DOI: 10.1149/1.2113867
38. *Surek T., Coriell S.R., Chalmers B.* The growth of shaped crystals from the melt // *Journal of Crystal Growth*. 1980. Vol. 50. P. 21–32. DOI: 10.1016/0022-0248(80)90227-4
39. *Landau H.G.* Heat conduction in a melting solid // *Quarterly of Applied Mathematics*. 1950. Vol. 8. P. 81–94. DOI: 10.1090/qam/33441
40. *Vinokur M.* Conservation equations of gasdynamics in curvilinear coordinate systems // *Journal of Computational Physics*. 1974. Vol. 14. P. 105–125. DOI: 10.1016/0021-9991(74)90008-4
41. *Steger J.L.* Implicit Finite-Difference Simulation of Flow about Arbitrary Two-Dimensional Geometries // *AIAA Journal*. 1978. Vol. 16, no. 7. P. 679–686. DOI: 10.2514/3.7377
42. *Hurle, D. T. J.* Analytical representation of the shape of the meniscus in Czochralski growth // *Journal of Crystal Growth*. 1983. Vol. 63, no. 1. P. 13–17. DOI: 10.1016/0022-0248(83)90421-9
43. *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. 104501. DOI: 10.1016/j.compfluid.2020.104501
44. *Гусев А.О., Мажорова О.С.* Геометрическая консервативность разностных методов решения задачи Стефана на подвижных и фиксированных сетках // *Дифференциальные уравнения*. 2024. Т. 60, № 7. С. 911–927. DOI: 10.31857/S0374064124070059
45. *Thomas P.D., Lombard C.K.* Geometric Conservation Law and Its Application to Flow Computations on Moving Grids // *AIAA Journal*. 1979. Vol. 17. P. 1030–1037. DOI: 10.2514/3.61273
46. *Demirdžić I., Perić M.* Space conservation law in finite volume calculations of fluid flow // *International Journal for Numerical Methods in Fluids*. 1988. Vol. 8. P. 1037–1050. DOI: 10.1002/flid.1650080906
47. *Гусев А.О., Щерица О.В., Мажорова О.С.* О свойствах одного разностного метода решения двухфазной задачи Стефана // *Дифференциальные уравнения*. 2022. Т. 58, № 7. С. 930–946. DOI: 10.31857/S0374064122070068
48. *Derby J.J., Brown R.A.* Thermal-capillary analysis of Czochralski and liquid encapsulated Czochralski crystal growth: I. Simulation // *Journal of Crystal Growth*. 1986. Vol. 74, no. 3. P. 605–624. DOI: 10.1016/0022-0248(86)90208-3
49. *Motakef S.* Thermoelastic analysis of GaAs in lec growth configuration: II. Temporal evolution of the stress field // *Journal of Crystal Growth*. 1988. Vol. 88, no. 3. P. 341–352. DOI: 10.1016/0022-0248(88)90006-1
50. *Bardsley W., Hurle D.T.J., Joyce G.C., Wilson G.C.* The weighing method of automatic Czochralski crystal growth: II. Control equipment // *Journal of Crystal Growth*. 1977. Vol. 40. P. 21–28. DOI: 10.1016/0022-0248(77)90028-8
51. *Derby J.J., Brown R.A.* On the quasi-steady-state assumption in modeling Czochralski crystal growth // *Journal of Crystal Growth*. 1988. Vol. 87, no. 2/3. P. 251–260. DOI: 10.1016/0022-0248(88)90172-8

52. Гусев А.О., Мажорова О.С. Численное моделирование процесса выращивания монокристаллов методом Чохральского в квазистационарном приближении // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2023. № 59. С. 1–20. DOI: 10.20948/prepr-2023-59

Сведения об авторах:

Гусев Андрей Олегович (корр.), кфмн, нс, Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН (ИПМ им. М.В.Келдыша РАН), 125047, г. Москва, Миусская пл., д. 4; e-mail: aogus@mail.ru; ORCID: 0000-0003-4113-1130

Research article

Modeling the temperature field dynamics during the Czochralski single crystal growth in a non-stationary approximation

A.O. Gusev

Keldysh Institute of Applied Mathematics RAS, Moscow, Russian Federation

The transient process of growing axisymmetric crystals by the liquid-encapsulated Czochralski method is considered. The mathematical model accounts for heat transfer in the crucible–crystal–melt–encapsulant, formation of the melt/encapsulant meniscus, crystallization interface movement, and changes in crystal radius. A new algorithm was developed to determine the lateral surface shape of the crystal during the process. The proposed numerical approach utilizes a geometrically conservative difference scheme that guarantees the fulfillment of conservation laws of energy and mass. The special splitting technique is used to solve the corresponding set of finite difference equations. The proposed approach ensures the consistency of crystal shape evolution with conservation laws. The designed numerical procedure is used to evaluate the impact of external thermal regime on the shape of the growing crystal. When the heater temperature is maintained constant, the crystal radius gradually decreases over time. To study the influence of the external temperature field on the shape of the lateral surface, the mathematical model is supplemented with a proportional-integral temperature controller equation that links the change in heater temperature to the radius of the growing crystal. In a general case, the application of an integral temperature controller leads to fluctuations in the crystal radius around a set value, with both the frequency and amplitude of fluctuations increasing progressively. Based on the results of the numerical experiments, the parameter values for a proportional-integral temperature controller that ensure the growth of crystals with a nearly constant radius are determined. The results of transient numerical simulations are compared with the results obtained using the quasi-steady-state model of crystal growth.

Keywords: Czochralski crystal growth, moving boundary problem, mathematical modeling, conservative numerical scheme

Received: 20.05.2025 / *Published online:* 30.07.2025

References

1. Lyubimova T.P., Parshakova Ya.N. Influence of rotational vibrations on heat and mass transfer during vertical Bridgman growth of germanium crystals. *Computational continuum mechanics*. 2008. Vol. 1, no. 1. P. 57–67. DOI: 10.7242/1999-6691/2008.1.1.6
2. Lyubimova T.P., Fayzrakhmanova I.S. Numerical modeling of magnetic field influence on vertical Bridgman crystal growth. *Computational continuum mechanics*. 2008. Vol. 1, no. 3. P. 85–95. DOI: 10.7242/1999-6691/2008.1.3.30
3. Lyubimova T.P., Skuridin R.V. Control of thermo and solutocapillary flows in FZ crystal growth by high-frequency vibrations. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*. 2017. Vol. 58. P. 1159–1170. DOI: 10.1134/S0021894417070070
4. Verezub N.A., Prostomolotov A.I. Hydromechanics for crystal growth from water solutions. *Computational continuum mechanics*. 2022. Vol. 15, no. 1. P. 98–114.
5. Smirnova O.V., Kalaev V.V. 3D unsteady numerical analysis of conjugate heat transport and turbulent/laminar flows in LEC growth of GaAs crystals. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2004. Vol. 47, no. 2. P. 363–371. DOI: 10.1016/S0017-9310(03)00404-6
6. Fainberg J., Vizman D., Friedrich J., Mueller G. A new hybrid method for the global modeling of convection in CZ crystal growth configurations. *Journal of Crystal Growth*. 2007. Vol. 303. P. 124–134. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2006.11.346
7. Bessonov O.A., Polezhaev V.I. Regime diagram and three-dimensional effects of convective interactions in the hydrodynamic Czochralski model. *Fluid Dynamics*. 2014. Vol. 49. P. 149–159. DOI: 10.1134/S0015462814020045
8. Chen S., Li S., Tan X. 3D Unsteady Simulation of the Transport Characteristics in the LEC Melt of In-Doped GaAs. *International Journal of Multimedia and Ubiquitous Engineering*. 2016. Vol. 11. P. 21–30. DOI: 10.14257/ijmue.2016.11.5.03
9. Faiez R., Najafi F., Rezaei Y. Convection interaction in GaAs/LEC growth model. *International Journal of Computational Engineering Research*. 2015. Vol. 5. P. 12–23. URL: https://www.ijceronline.com/papers/Vol5%5C_issue7/C0507012023.pdf
10. Verezub N., Prostomolotov A. Growth chamber gas dynamics in Cz silicon single crystal growth process. *Modern Electronic Materials*. 2024. Vol. 10. P. 185–193. DOI: 10.3897/j.moem.10.3.140627

11. *Cen X., Li Y.S., Zhan J.* Three dimensional simulation of melt flow in Czochralski crystal growth with steady magnetic fields. *Journal of Crystal Growth*. 2012. Vol. 340. P. 135–141. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2011.11.029
12. *Atia A., Ghernaout B., Bouabdallah S., Bessaih R.* Three-dimensional oscillatory mixed convection in a Czochralski silicon melt under the axial magnetic field. *Applied Thermal Engineering*. 2016. Vol. 105. P. 704–715. DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2016.03.087
13. *Kondratyev A., Demina S., Smirnov A., Kalaev V., Ratnieks G., Kadinski L., Sattler A.* 3D unsteady and steady modeling of heat and mass transfer during Cz Si crystal growth with a horizontal magnetic field. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2021. Vol. 178. 121604. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2021.121604
14. *Ding J., Li Y., Liu L.* Effect of cusp magnetic field on the turbulent melt flow and crystal/melt interface during large-size Czochralski silicon crystal growth. *International Journal of Thermal Sciences*. 2021. Vol. 170. 107137. DOI: 10.1016/j.ijthermalsci.2021.107137
15. *Chen S., Liu W., Wen Z., Liu Y., Jiang F., Xue Z., Wei X., Li W.* Effects of Induced Current in Crystals on the Melt Flow and the Melt–Crystal Interface during Industrial 300 mm Czochralski Silicon Crystal Growth under a Transverse Magnetic Field. *Crystal Growth & Design*. 2023. Vol. 23. P. 4480–4490. DOI: 10.1021/acs.cgd.3c00227
16. *Prostomolotov A.I., Verezub N.A.* *Mekhanika protsessov polucheniya kristallicheskih materialov*. Moscow, NITU «MISiS», 2023. 568 p.
17. *Wang Z., Brown R.A.* Simulation of almost defect-free silicon crystal growth. *Journal of Crystal Growth*. 2001. Vol. 231. P. 442–447. DOI: 10.1016/S0022-0248(01)01433-6
18. *Kumar M.A., Srinivasan M., Ramasamy P.* Numerical simulation of thermal stress distributions in Czochralski-grown silicon crystals. *AIP Conference Proceedings*. 2018. Vol. 1942. 100004. DOI: 10.1063/1.5028969
19. *Wang Z., Ren Y., Ma W., et al.* Crystal surface heat transfer during the growth of 300mm monocrystalline silicon by the Czochralski process. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2025. Vol. 236. 126259. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2024.126259
20. *Mukaiyama Y., Sueoka K., Maeda S., Iizuka M., Mamedov V.M.* Unsteady numerical simulations considering effects of thermal stress and heavy doping on the behavior of intrinsic point defects in large-diameter Si crystal growing by Czochralski method. *Journal of Crystal Growth*. 2020. Vol. 532. 125433. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2019.125433
21. *Chatelain M., Albaric M., Pelletier D., Veirman J., Letty E.* Numerical method for thermal donors formation simulation during silicon Czochralski growth. *Solar Energy Materials and Solar Cells*. 2021. Vol. 219. 110785. DOI: 10.1016/j.solmat.2020.110785
22. *Li Z., Smirnov A.* Application of computer modeling to pulling rate and productivity of Czochralski pullers in PV Si crystal growth. *Journal of Crystal Growth*. 2023. Vol. 611. 127178. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2023.127178
23. *Tang X., Chappa G.K., Vieira L., Holena M., Dropka N.* Decision Tree-Supported Analysis of Gallium Arsenide Growth Using the LEC Method. *Crystals*. 2023. Vol. 13. 1659. DOI: 10.3390/cryst13121659
24. *CROWLEY A.B.* Mathematical Modelling of Heat Flow in Czochralski Crystal Pulling. *IMA Journal of Applied Mathematics*. 1983. Vol. 30. P. 173–189. DOI: 10.1093/imamat/30.2.173
25. *Derby J.J., Brown R.A.* On the dynamics of Czochralski crystal growth. *Journal of Crystal Growth*. 1987. Vol. 83. P. 137–151. DOI: 10.1016/0022-0248(87)90514-8
26. *Thomas P.D., Derby J.J., Atherton L.J., Brown R.A., Wargo M.J.* Dynamics of liquid-encapsulated czochralski growth of gallium arsenide: Comparing model with experiment. *Journal of Crystal Growth*. 1989. Vol. 96, no. 1. P. 135–152. DOI: 10.1016/0022-0248(89)90284-4
27. *Van den Bogaert N., Dupret F.* Dynamic global simulation of the Czochralski process I. Principles of the method. *Journal of Crystal Growth*. 1997. Vol. 171. P. 65–76. DOI: 10.1016/S0022-0248(96)00488-5
28. *Raufeisen A., Breuer M., Botsch T., Delgado A.* Transient 3D simulation of Czochralski crystal growth considering diameter variations. *Journal of Crystal Growth*. 2009. Vol. 311. P. 695–697. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2008.09.073
29. *Sabanskis A., Bergfelds K., Muiznieks A., Schröck T., Krauze A.* Crystal shape 2D modeling for transient CZ silicon crystal growth. *Journal of Crystal Growth*. 2013. Vol. 377. P. 9–16. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2013.04.055
30. *Polezhaev V.I., Bessonov O.A., Nikitin N.V., Nikitin S.A.* Convective interaction and instabilities in GaAs Czochralski model. *Journal of Crystal Growth*. 2001. Vol. 230, no. 1/2. P. 40–47. *Proceedings of the Third International Workshop on Modeling in Crystal Growth*. DOI: 10.1016/S0022-0248(01)01317-3
31. *Li M., Hu W., Chen N., Zeng D., Tang Z.* Numerical analysis of LEC growth of GaAs with an axial magnetic field. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2002. Vol. 45, no. 13. P. 2843–2851. DOI: 10.1016/S0017-9310(01)00355-6
32. *Biberin V.I., Osvensky V.B., Smirnov V.A.* Issledovaniye gidrodinamiki rasplava v protsesse vyrashchivaniya arsenida galliya po Chokhral'skomu iz-pod sloya flyusa. *Crystallography*. 1985. Vol. 30. P. 980–985.
33. *Kakimoto K., Eguchi M., Watanabe H., Hibiya T.* Direct observation by X-ray radiography of convection of boric oxide in the GaAs liquid encapsulated czochralski growth. *Journal of Crystal Growth*. 1989. Vol. 94, no. 2. P. 405–411. DOI: 10.1016/0022-0248(89)90015-8
34. *Geng X., Wu X.B., Guo Z.Y.* Numerical simulation of combined flow in Czochralski crystal growth. *Journal of Crystal Growth*. 1997. Vol. 179, no. 1/2. P. 309–319. DOI: 10.1016/S0022-0248(97)00109-7

35. *Hjellming L.N., Walker J.S.* Melt motion in a Czochralski crystal puller with an axial magnetic field: motion due to buoyancy and thermocapillarity. *Journal of Fluid Mechanics*. 1987. Vol. 182. P. 335–368. DOI: 10.1017/S0022112087002362
36. *Berliner L.B., Gvelesiani L.A.* Numeric computation of the radiative heat transfer for vertical crystal growth of CdZnTe single-crystals. *Fine Chemical Technologies*. 2010. Vol. 5, no. 5. P. 13–18.
37. *Derby J.J., Brown R.A., Geyling F.T., Jordan A.S., Nikolakopoulou G.A.* Finite Element Analysis of a Thermal-Capillary Model for Liquid Encapsulated Czochralski Growth. *Journal of The Electrochemical Society*. 1985. Vol. 132, no. 2. P. 470–482. DOI: 10.1149/1.2113867
38. *Surek T., Coriell S.R., Chalmers B.* The growth of shaped crystals from the melt. *Journal of Crystal Growth*. 1980. Vol. 50. P. 21–32. DOI: 10.1016/0022-0248(80)90227-4
39. *Landau H.G.* Heat conduction in a melting solid. *Quarterly of Applied Mathematics*. 1950. Vol. 8. P. 81–94. DOI: 10.1090/qam/33441
40. *Vinokur M.* Conservation equations of gasdynamics in curvilinear coordinate systems. *Journal of Computational Physics*. 1974. Vol. 14. P. 105–125. DOI: 10.1016/0021-9991(74)90008-4
41. *Steger J.L.* Implicit Finite-Difference Simulation of Flow about Arbitrary Two-Dimensional Geometries. *AIAA Journal*. 1978. Vol. 16, no. 7. P. 679–686. DOI: 10.2514/3.7377
42. *Hurle, D. T. J.* Analytical representation of the shape of the meniscus in Czochralski growth. *Journal of Crystal Growth*. 1983. Vol. 63, no. 1. P. 13–17. DOI: 10.1016/0022-0248(83)90421-9
43. *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. 104501. DOI: 10.1016/j.compfluid.2020.104501
44. *Gusev A.O., Mazhorova O.S.* Geometric Conservation Law for Finite Volume Discretization of the Stefan Problem on Boundary-Fitted Grids. *Differential Equations*. 2024. Vol. 60, no. 7. P. 900–915. DOI: 10.1134/S0012266124070061
45. *Thomas P.D., Lombard C.K.* Geometric Conservation Law and Its Application to Flow Computations on Moving Grids. *AIAA Journal*. 1979. Vol. 17. P. 1030–1037. DOI: 10.2514/3.61273
46. *Demirdžić I., Perić M.* Space conservation law in finite volume calculations of fluid flow. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*. 1988. Vol. 8. P. 1037–1050. DOI: 10.1002/flid.1650080906
47. *Gusev A.O., Shcheritsa O.V., Mazhorova O.S.* On the Properties of Conservative Finite Volume Scheme for the Two-Phase Stefan Problem. *Differential Equations*. 2022. Vol. 58, no. 7. P. 918–936. DOI: 10.1134/S0012266122070060
48. *Derby J.J., Brown R.A.* Thermal-capillary analysis of Czochralski and liquid encapsulated Czochralski crystal growth: I. Simulation. *Journal of Crystal Growth*. 1986. Vol. 74, no. 3. P. 605–624. DOI: 10.1016/0022-0248(86)90208-3
49. *Motakef S.* Thermoelastic analysis of GaAs in lec growth configuration: II. Temporal evolution of the stress field. *Journal of Crystal Growth*. 1988. Vol. 88, no. 3. P. 341–352. DOI: 10.1016/0022-0248(88)90006-1
50. *Bardsley W., Hurle D.T.J., Joyce G.C., Wilson G.C.* The weighing method of automatic Czochralski crystal growth: II. Control equipment. *Journal of Crystal Growth*. 1977. Vol. 40. P. 21–28. DOI: 10.1016/0022-0248(77)90028-8
51. *Derby J.J., Brown R.A.* On the quasi-steady-state assumption in modeling Czochralski crystal growth. *Journal of Crystal Growth*. 1988. Vol. 87, no. 2/3. P. 251–260. DOI: 10.1016/0022-0248(88)90172-8
52. *Gusev A.O., Mazhorova O.S.* Quasi-steady-state numerical simulation of Czochralski single crystal growth. *Keldysh Institute Preprints*. 2023. No. 59. P. 1–20. DOI: 10.20948/prepr-2023-59