УДК 6.62.620.66.66-6

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-4-28-48

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ, ВЛИЯЮЩИХ НА ОБРАЗОВАНИЕ ГРАННЫХ ФОРМ РОСТА В МОНОКРИСТАЛЛАХ

Юсим В. А., Саркисов С. Э., Калимуллин Р. К., Петров С. В., Клосс Ю. Ю.

Научный исследовательский центр «Курчатовский институт»

123182, г. Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1, Российская Федерация

Аннотация

Целью данной работы является исследование распределения неоднородности теплового поля в расплаве вдоль оси роста кристаллов для различных методов выращивания.

Процедура и методы. В рамках комплекса SolidWorks Premium в пакете Flow Simulation для построенных геометрических моделей кристаллизационных аппаратов методов Бриджмена, Чохральского и ГНК (горизонтальной направленной кристаллизации) была сформирована криволинейная блочно-структурированная базовая сетка и решалась сопряжённая задача в тепловом узле и водоохлаждаемой рубашке по исследованию процессов тепло-массопереноса и распределения неоднородности теплового поля в расплаве вдоль оси роста кристаллов для различных методов выращивания.

Результаты. Получены результаты компьютерного моделирования распределения профилей температур по вертикальным и поперечным сечениям кристаллов, выращиваемых методами Бриджмена и Чохральского, а также получены картины характерного расположения фасеток, которые полностью согласуются с известными соответствующими экспериментальными результатами для кристаллов иттрий-алюминиевого граната.

Теоретическая и практическая значимость. Анализ полученных результатов компьютерного моделирования, проведённый на основе рассмотрения общей теории механизмов роста кристаллов и морфологической неустойчивости фронта кристаллизации для трёх основных методов выращивания, подтвердил правильность полученных модельных картин возникновения форм гранного роста.

Ключевые слова: тепломассоперенос, моделирование, граничные условия

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке НИЦ «Курчатовский институт» (приказ № 1919 от 25.09.2020) и грантов РФФИ № 19-29-02007, 20-08-00278, 20-08-00211, 19-29-02018.

MODELING OF THERMAL PROCESSES AFFECTING THE ORIGIN OF FACIAL GROWTH FORMS IN SINGLE CRYSTALS

V. Yusim, S. Sarkisov, R. Kalimullin, S. Petrov, Y. Kloss

National Research Centre 'Kurchatov Institute'

pl. Akad. Kurchatova 1, 123182 Moscow, Russian Federation

Abstract

The aim of this work is to study the distribution of the thermal field inhomogeneity in the melt along the crystal growth axis for different growth methods.

Methodology. Within the framework of the SolidWorks Premium complex, in the Flow Simulation package for the constructed geometric models of the crystallization apparatus of the Bridgman, Czochralski and HDC (horizontal directional crystallization) methods, a curvilinear block-structured base mesh was formed. The conjugate problem was solved in the thermal unit and the water-cooled jacket to study the processes of heat-mass transfer and the distribution of the thermal field inhomogeneity in the melt along the crystal growth axis for different growth methods.

Results. The results of computer simulation of the distribution of temperature profiles over the vertical and cross sections of the crystals grown by the Bridgman and Czochralski methods are presented. Pictures of the characteristic arrangement of facets are obtained. The obtained data fully agree with the known corresponding experimental results for yttrium-aluminum garnet crystals.

Research implications. The analysis of the obtained results of computer simulation, carried out on the basis of consideration of the general theory of crystal growth mechanisms and morphological instability of the crystallization front for the three main methods of growth, confirmed the correctness of the obtained model pictures of the appearance of faceted growth forms.

Keywords: heat and mass transfer, modeling, boundary conditions.

Acknowledgments. This work was supported by the National Research Center 'Kurchatov Institute' (Order No. 1919 dated September 25, 2020) and the Russian Foundation for Basic Research (Grant Nos 19-29-02007, 20-08-00278, 20-08-00211, and 19-29-02018).

1. Введение

Известно, что особенности фронта роста монокристаллов, проявляющиеся в виде гранных и негранных форм роста, в значительной степени зависят от метода выращивания монокристаллов [1]. На возникновение подобных форм роста могут оказывать влияние как неоднородность расплава на фронте роста, зависящая от особенностей направленности гидродинамических потоков расплава, характерных для каждого метода выращивания, так и теплофизические причины [2]. Из-за различий в конвективных потоках в расплаве при выращивании монокристаллов по методу Бриджмена и Чохральского в условиях выпуклого фронта кристаллизации геометрия расположения гранных форм различна. К числу теплофизических причин следует отнести влияние переохлаждения расплава и энтропии плавления на поверхность фронта кристаллизации.

Настоящая работа посвящена математическому моделированию процессов тепло- и массопереноса и исследованию распределения неоднородности теплового поля в расплаве вдоль оси роста кристаллов для различных методов выращивания. Выявленная картина распределения областей переохлаждения в расплавах для рассмотренных методов Бриджмена, Чохральского и ГНК хорошо согласуется с известным специфическим характером геометрического расположения гранных форм роста в кристаллах, выращенных по каждому из методов.

2. Экспериментальная часть

Рассматриваемые в работе методы выращивания являются одними из основных и часто используемых методов направленной кристаллизации для получения монокристаллов из расплава [1; 3–7]. Наличие большого объёма общедоступных информационных ресурсов, включающих чертежи и конструктивно-компоновочные схемы как самих установок, так и тепловых узлов, позволяет построить достаточно точные геометрические модели [1; 8–10].

Для математического описания геометрии каждой модели были построены условно однотипные углеграфитовые тепловые узлы, соответствующие прообразу каждого метода. Для данных узлов и кристаллизационных установок были заложены одинаковые материалы с сохранением приблизительных соотношений расстояний между компонентами углеграфитовых узлов, углеграфитового узла и кристаллизационной установки, нагревательных элементов и углеграфитового узла, а также нагревательных элементов и кристаллизуемого материала.

2.1. Геометрические модели и материалы

Геометрические модели углеграфитовых тепловых узлов [8–10], конструктивно-компоновочные схемы кристаллизационных аппаратов к данным узлам, чертежи отдельных модулей, а также различные эксплуатационные характеристики данных аппаратов, по которым строились геометрические модели, взяты из общедоступных информационных ресурсов [1; 13]. На рис. 1(а–в) показаны кристаллизационные аппараты для различных методов выращивания с углеграфитовыми тепловыми узлами.

Рис. 1. Вид кристаллизационных установок по методу Бриджмена-Стокбаргера (а), Чохральского (б) и ГНК (в) с тепловым узлом: 1) загрузочный модуль; 2) кристалл в тигле; 3) приёмный модуль; 4) нагреватели; 5) системы тепловых экранов / Fig. 1. Type of crystallization plants according to (a) Bridgman–Stockbarger, (b) Czochralski and (c) HDC methods with a heating unit: 1) loading module; 2) crystal in a crucible; 3) receiving module; 4) heaters; 5) heat shield systems.

Источник: данные авторов.

В данной работе кристалл флюорита CaF_2 , являющийся известным многофункциональным оптическим и лазерным материалом [11; 12] был выбран в качестве модельного объекта исследования.

Для расчётов по методам Чохральского и Бриджмена была выбрана площадь кристалла с одинаковым поперечным сечением 8036 мм^2 , что примерно соответствует крупногабаритному монокристаллу диаметром 101 мм. В методе ГНК площадь исследуемого сечения была аналогичной с габаритами 180 мм по ширине и 44 мм по высоте кристалла. В табл. 1 [14] приведены взятые для расчёта теплофизические характеристики исследуемого кристалла.

Расстояние между стенками тигля и нагревателем во всех методах было равным и составляло в среднем 40–50 мм. Системы экранов состояли из одинаковых по толщине внутренних экранов с размером 30 мм и внешних с размером 8–10 мм; расстояния между ними составляли 8–4 мм. Расстояние между системой экранов и нагревателем составляло в среднем 10–15 мм. Во всех трёх методах углеграфитовый узел отделён от водоохлаждаемой рубашки кристаллизационного аппарата слоем изолирующего графитового войлока толщиной 10–20 мм.

Ввиду особенности методов выращивания монокристаллов, кристаллизационные аппараты для расплавления шихты имеют различное количество нагревателей. Так, в методе ГНК используются два нагревателя, а в методе Бриджмена и Чохральского по одному. Конструкции нагревателей в методах Бриджмена и Чохральского однотипны, а в методе ГНК имеют Г-образную (верхний нагреватель) и перевёрнутую П-образную (нижний нагреватель) форму, которые, находясь друг над другом, образуют кольцо.

Теплофизические характеристики исследуемого кристалла приведены в табл. 1.

Таблица 1 / Table 1

Теплофизические характеристики исследуемого кристалла / Thermophysical characteristics of the crystal under study.

Плотность	3,18 г/см ³
Температура плавления	1418 °C
Коэффициент теплопроводности	9,71 Вт/(м К)
Коэффициент термического расширения	$18,5 \cdot 10^{-6}/\text{К}$
Твёрдость по Кнупу	158,3 кг/мм ² (100)
Удельная теплоёмкость	854 Дж/(кг · К)
°C Коэффициент излучения (степень черноты) ϵ	0,45–0,70(на графите)

Источник: [14].

Также в конструкциях используемых аппаратов применяются условно однотипные узлы и приспособления для зацепления и удержания монокристаллов, изготовленные из одинаковых тугоплавких металлов, медные шины и тоководы, вакуумные уплотнения и различный крепёж. Теплофизические характеристики

основных используемых материалов углеродистых тепловых узлов приведены в табл. 2 [14].

Таблица 2 / Table 2

Теплофизические характеристики основных используемых материалов / Thermophysical characteristics of the main materials used.

Материал	Теплопроводность λ [Вт/м · К]	Теплоёмкость [Дж/(кг · К)]	Плотность ρ [кг/м ³]	Степень черноты ϵ
Сталь 15-20	46	460	7874	0,4
Сталь 3-5	55	460	7874	0,4
Графит SGL Carbon R4550	105	840	1830	0,81
Графит МПГ-8,7	95	840	1850	0,8
Графитовый войлок МГВ	0,3	1000	97	0,9
SGL Carbon SIGRAFLEX	5	900	700	0,115
SGL Carbon SIGRABOND	13	800	1450	0,8
Вольфрам ВМ	129	129	19300	0,04
Медь М1, М3	386,1	400	8950	0,7
Молибден	138	195	10220	0,3

Источник: [14].

2.2. Расчётные сетки

После построения геометрических моделей кристаллизационных аппаратов была сформирована криволинейная блочно-структурированная базовая сетка с разделением физического объёма на ряд обособленных блоков, в каждом из которых разрешение локальной сетки подбиралось исходя из особенностей исследуемой области. На рис. 2 показаны расчётные сетки для кристаллизационных аппаратов с углеродистыми узлами.

На рис. 2а (метод Бриджмена) общее количество ячеек базовой сетки составило 4342596, в том числе ячеек в текучей среде – 1573114, ячеек в твёрдой среде – 2769482 и ячеек на границе раздела твёрдого тела с текучей средой – 1268100 с размерностью базовой сетки $N_x = 40$, $N_y = 124$, $N_z = 40$. Разрешение локальной сетки в выделенной области составляло (в данном расчёте область кристалла с тиглем) 137748 ячеек.

На рис. 2б (метод Чохральского) общее количество ячеек базовой сетки составило 8685192, в том числе ячеек в текучей среде – 3146228, ячеек в твёрдой среде – 5538964 и ячеек на границе раздела твёрдого тела с текучей средой – 1381026 с размерностью базовой сетки $N_x = 40$, $N_y = 156$, $N_z = 50$. Разрешение локальной сетки в выделенной области составляло (в данном расчёте область кристалла с тиглем) 1033110 ячеек.

На рис. 2в (метод ГНК) общее количество ячеек базовой сетки составило 4721500, в том числе ячеек в текучей среде – 1036504, ячеек в твёрдой среде – 3684996 и ячеек на границе раздела твёрдого тела с текучей средой – 1036504 с размерностью базовой сетки $N_x = 36$, $N_y = 30$, $N_z = 70$. Разрешение локальной

сетки в выделенной области составляло (в данном расчёте область кристалла с тиглем) 446727 ячеек.

Рис. 2. Объёмная расчётная сетка для кристаллизационных аппаратов с углеграфитовыми тепловыми узлами: а) для Бриджмена; б) для Чохральского; в) для ГНК / Fig. 2. Volumetric computational grid for the crystallization apparatus with graphite-carbon thermal units: a) for Bridgman; b) for Czochralski; c) for HDC.

Источник: данные авторов.

2.3. Описание экспериментальной процедуры

В данной работе исследовались процессы тепло- и массопереноса и распределения неоднородности теплового поля в расплаве вдоль оси роста кристаллов для различных методов выращивания. Для этого решалась сопряжённая задача в тепловом узле и водоохлаждаемой рубашке.

Углеграфитовый тепловой узел каждого исследуемого аппарата имеет сложную конструкцию, которая состоит из нагревателей, защитных слоёв из различных материалов, а также включает графитовый тигель с исследуемым монокристаллом. Температурное поле в такой конструкции определяется процессами теплопроводности и переизлучения между поверхностями. Углеграфитовые тепловые узлы находятся внутри вакуумной кристаллизационной камеры ростовой установки, имеющей водоохлаждающую рубашку (канальный теплообменник). В ходе эксперимента температура на нагревателях устанавливалась исходя из особенностей метода выращивания кристалла CaF_2 : так, для установки Чохральского была задана температура 1550 °С, в установке Бриджмена основной нагреватель – 1550 °С, нижний отжиговой – 1100 °С, в ГНК нижний 1550 °С и 1650 °С, соответственно. Температура теплоносителя на входе для всех методов была взята одинаковая и равнялась 20 °С при давлении 202,6 КПа и скорости напора 2 м/с. Температура окружающей среды, воздействующей на теплообменник, также равнялась 20 °С при 101,3 КПа. В качестве среды внутреннего объёма кристаллизационного аппарата (среда синтеза монокристалла) была принята атмосфера инертного газа аргона при избыточном давлении 202,6 КПа.

В данном исследовании необходимо было определить распределение температуры в монокристалле и форму фронта кристаллизации. Так, в связи с низкими скоростями кристаллизации от 1 до 3–5 мм/ч для всех трёх методов, тепловой процесс рассматривался как квазистационарный. Тигель с синтезируемым кристаллом устанавливался стационарно, через градиентное поле из зоны плавления в холодную зону отжига (рис. 1а–в), то есть в позицию при выходе на посто-

янный диаметр после начала роста, таким образом подвергаясь асимметричному нагреву. Также, для упрощения решаемой задачи пренебрегаем движением потока внутри расплава вследствие предельно малых скоростей. И как следствие, исследуемый монокристалл рассматриваем в единственном агрегатном состоянии – твёрдом.

Механизм переноса тепла в исследуемом монокристалле во всех трёх методах осуществляем с помощью механизмов молекулярной теплопроводности и радиации (радиационно-кондуктивный теплообмен). Сам монокристалл находился в состоянии конвективного теплообмена со средой в тепловом узле и лучистого теплообмена с окружающими его поверхностями. В расчётную математическую модель для данного монокристалла для всех трёх методов использовали: уравнение энергии, уравнения переноса тепла и излучения, граничные условия теплопроводности и излучения на границах кристалла. Также данная модель является частью полной модели тепло- и массопереноса для обобщённого цикла.

Уравнение переноса энергии при направлении нормали к поверхности в объём среды для данной модели записывалось следующим образом [13]:

$$\frac{d\varepsilon}{d\tau} = \operatorname{div} \mathbf{q}_E + e_0, \quad \varepsilon = \varepsilon_C + \varepsilon_R, \quad \mathbf{q}_E = \mathbf{q}_C + \mathbf{q}_R \quad (1)$$

где $\mathbf{q}_E$, $\mathbf{q}_C$, $\mathbf{q}_R$ – векторы переноса энергии общей, теплопроводностью и излучением, ε , ε_C , ε_R – объёмные плотности энергий общей, внутренней и радиационной, e_0 – объёмная мощность источников энергии.

Уравнение переноса энергии теплопроводностью [13]:

$$\mathbf{q}_C = -\lambda \operatorname{grad} t, \quad (2)$$

а излучением [13]:

$$\frac{dI_s}{dS} = -kI_s + \eta, \quad (3)$$

где I_s – интенсивность излучения в направлении S ; η – объёмный коэффициент собственного излучения среды. При этом значения ε_R опускаем в связи с малыми величинами.

Составляющие векторов переноса по направлению n имеют вид [13]:

$$q_{cn} = -\lambda \frac{\partial t}{\partial n}, \quad (4)$$

$$q_{Rn} = \int_{4\pi} I_s \cos(n, s) d\omega. \quad (5)$$

В уравнениях (1), (3), (5) значения ε_R , q_R , I_s , k , η относятся к спектральному и интегральному излучениям или к зоне прозрачности монокристалла.

Граничные условия задавались различными, так на фиксированной поверхности кристалла для элементарной площадки dS_K^C с центром в точке M и записывались при направлении нормали n внутрь кристалла (рис. 3а) [13]:

$$-\frac{dt_K}{dn} = \frac{1}{\lambda_K} (\alpha(t_K - t_f) + E_C - aE_i - q_R), \quad (6)$$

где α – коэффициент теплообмена; t_K – температура кристалла; t_f – температура среды в тепловом узле; λ_K – коэффициент теплопроводности материала кристалла; E_C и E_i – плотности собственного и падающего потоков интегрального излучения; q_R – плотность результирующего потока излучения в интервале частичной прозрачности кристалла $\delta\lambda^t$ на внутренней оболочке кристалла; a – степень черноты излучения стенки контейнера.

На свободной поверхности в зоне непрозрачности кристалла для элементарной площадки dS_K^C с центром в точке N (рис. 3б) [13]:

$$-\frac{dt_K}{dn} = \frac{1}{\lambda_K} (\alpha(t_K - t_f) + E_C'' - a''E_i''), \quad (7)$$

где E_C'' и E_i'' – собственные и падающие поверхностные плотности потока излучения в зоне непрозрачности кристалла.

В зоне частичной прозрачности кристалла (рис. 3б) на внутренней границе площадки dS_K^F [13]:

$$I_{1S(\varphi_1)} = \bar{I}_{1S(\varphi_1)} R + I_{2S(\varphi_2)} (1 - R) \frac{n_2^2}{n_1^2}, \quad \text{при } \varphi_1 < \varphi_{BR}, \quad (8)$$

$$I_{1S(\varphi_3)} = \bar{I}_{1S(\varphi_3)}, \quad \text{при } \varphi_3 > \varphi_{BR},$$

на внешней границе площадки dS_K^F [13]:

$$\bar{I}_{2S(\varphi_2)} = I_{2S(\varphi_2)} R + \bar{I}_{1S(\varphi_1)} (1 - R) \frac{n_2^2}{n_1^2}, \quad \text{при } 0 < \varphi_2 < \frac{\pi}{2}, \quad (9)$$

где n_1 и n_2 – коэффициенты преломления материала кристалла и среды в тепловом узле; I_{1S} и I_{2S} – интенсивности излучения в интервале $\delta\lambda^t$ в кристалле и среде теплового узла; направление S определяется углом φ ; R – коэффициент отражения свободной поверхности кристалла.

Из (6) видно, что при отсутствии зоны непрозрачности в кристалле в тепловом узле соблюдалось условие:

$$\frac{dt_K}{dn} = 0.$$

Рассмотренная выше стационарная, трёхмерная математическая модель тепло- и массопереноса для обобщённого цикла направленной кристаллизации даёт общее представление о протекании процессов тепло- и массопереноса в монокристалле во всех трёх методах.

Рис. 3. а) Схема к формулировке математической модели, где: 1 – тепловая система; 2 – тепловой узел; 3 – кристалл; 4 – расплав; 5 – исходный материал; F – фронт кристаллизации; G – граница плавления исходного материала; S, S_K, S_K^F, S_K^C – общая поверхность тепловой системы, поверхности кристалла: общая, свободная и фиксированная; линии ab и bp условно изображают свободную и фиксированную поверхности; n – нормали к поверхности; б) Схема к формулировке граничного условия на свободной поверхности кристалла: $I_{1S}, I_{2S}, \varphi_1, \varphi_2$ – интенсивности излучения и углы их падения в кристалле и окружающей среде; n_1, n_2 – коэффициенты преломления кристалла и окружающей среды; φ_{BR} – угол Брюстера [13] /

Fig. 3. а) Diagram for the formulation of a mathematical model, where: 1 – heat system; 2 – heating unit; 3 – crystal; 4 – fusion; 5 – basic material; F – crystallization front; G – fusion boundary of basic material; S, S_K, S_K^F, S_K^C – total surface of the thermal system, crystal surface: total, free and fixed; lines ab and bp conventionally represent a free and fixed surface; n – normal to the surface; б) Scheme for the formulation of the boundary condition on the free surface of the crystal: $I_{1S}, I_{2S}, \varphi_1, \varphi_2$ – radiation intensities and angles of their incidence in the crystal and the environment; n_1, n_2 – refractive indices of the crystal and of the environment: φ_{BR} – Brewster angle.

Источник: [13]

Для тепловых узлов, помещённых в кристаллизационные аппараты, численное моделирование течения хладагента, механизма теплопередачи и теплопроводности в твёрдых телах тепловых узлов и окружающей его стальной водоохлаждаемой стенки проводилось по аналогии с расчётами работы [14]. Соответствующие расчёты распределения температурных неоднородностей в тепловых полях, возникающих в результате процессов тепло- и массопереноса, были выполнены по методике расчёта сопряжённого теплопереноса с использованием CFD-кода SolidWorks Premium в пакете Flow Simulation. На рис. 4 показаны распределения температур в продольных сечениях исследуемых углеродистых узлов кристаллизационных аппаратов различного типа.

Рис. 4. Вид распределения температуры твёрдого тела для кристаллизационной установки с тепловыми узлами: а) Бриджмена-Стокбаргера; б) Чохральского; в) ГНК / Fig. 4. Type of temperature distribution of a solid for a crystallization unit with thermal units: а) Bridgman–Stockbarger; б) Czochralski; в) HDC.

Источник: данные авторов.

3. Обсуждение результатов

3.1. Метод Бриджмена

На рис. 5(а, б) показаны результаты компьютерного моделирования распределения температур твёрдого тела в продольном (рис. 5а) и поперечном сечении (рис. 5б) кристалла CaF_2 с тиглем при выращивании кристаллов методом Бриджмена. Как следует из рис. 5б, в сечении А-А на фронте кристаллизации имеет место неравномерный прогрев стенки тигля по окружности в силу характерных конструкторских особенностей, присущих графитовым нагревателям сопротивления в форме «корзинки», обусловленных перегревом их токоподводящих частей (сегментов).

Подобный неравномерный прогрев вызывает конвекцию расплава у стенок тигля и соответствующую в этих местах флуктуацию температуры в расплаве. Здесь можно рассматривать энергетическую природу тепловых флуктуаций в макроскопической системе и её влияние на температурное изменение и величины различных термодинамических параметров, например, теплоёмкости, энтальпии, энтропии плавления, определяющих кинетику и морфологические особенности растущих кристаллов [15]. В работе Джексона [16] приводятся корреляции значений энтропии плавления ΔS с изометричным, либо гранным ростом кристаллов. Согласно [17] при $\Delta S < 1$ имеет место изометричный рост без ячеек и дендритов, но при $\Delta S > 4$ – всегда образуются грани. Обнаруженные корреляции можно связать со степенью беспорядка (ΔS) в системе, которому способствуют, в том числе, вызываемые тепловой флуктуацией сильные конвекционные потоки в расплаве.

Рис. 5. Результат компьютерного моделирования распределения температуры по вертикальному (а) и поперечному (б) сечению в процессе кристаллизации по методу Бриджмена и картины характерного расположения фасеток (в) в кристаллах иттрий-алюминиевого граната / Fig. 5. Result of computer simulation of the temperature distribution over the vertical (a) and transverse (b) sections during crystallization by the Bridgman method and the pattern of the characteristic arrangement of facets (c) in yttrium-aluminum garnet crystals.

Источник: [1].

В полученной компьютерной модели наглядно проявляется анизотропия в распределении температурного поля в расплавном сегменте по направлениям X и Z в сечении $A-A$ на рис. 5б в области фронта кристаллизации. Разница в температурах расплава у стенок тигля в указанных направлениях достигает до 10–15 градусов.

Неоднородность прогрева тигля, вызывающая тепловые флуктуации в краевых областях расплава, прилегающих к стенкам тигля, формирует под углом 90 градусов симметричное чередование участков с повышенной и пониженной температурой. При дальнейшем понижении общей температуры расплава до температуры кристаллизации T_0 , при $T = T_0 - \Delta T_{max}$ (где ΔT_{max} – максимальное переохлаждение расплава на фронте роста) на F- участках (рис. 5б) изотермической поверхности фронта роста создаются теплофизические условия образования гранных форм [2].

Аналогичная картина расположения зон гранных форм роста по периферии кристаллов иттрий-алюминиевого граната, выращенных методом Бриджмена с выпуклым фронтом роста в сторону расплава, указывалась в [1] и для сравнения показана на фото на рис. 6.

Рис. 6. Вид дефектов (отмечены кружками) в поляризованном свете вдоль образца кристалла иттрий-алюминиевого граната, выращенного методом Бриджмена: картины гранной формы роста (а) и связанными остаточными механическими напряжениями (б) / Fig. 6. Type of defects (marked in cercles) in polarized light along a sample of an yttrium-aluminum garnet crystal grown by the Bridgman method: patterns of faceted growth (a) and associated residual mechanical stresses (b).

Источник: [1], данные авторов.

3.2. Метод Чохральского

Исследования морфологической неустойчивости фронта роста кристаллов иттрий-алюминиевого граната ($\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$) при выращивании методом Чохральского показывают, что гранный рост проявляется в центре кристаллической були [1]. Результаты проведённого нами компьютерного моделирования распределения тепловых полей в расплаве и растущем кристалле для метода Чохральского, представленные на рис. 7(а, б), абсолютно коррелируют с данными ростовых экспериментов [7].

В методе Чохральского, в отличие от метода Бриджмена, растущий кристалл не контактирует со стенками тигля. Поэтому влияние, связанное с переносом тепла от стенок тигля и воздействием тепловых флуктуаций непосредственно на растущий кристалл со стороны тигля, отсутствуют. Тепловые флуктуации в объёме расплава связаны с существованием конвекционных потоков, на которые активным образом оказывает влияние перемешивание расплава вращающимся кристаллом. Благодаря этому, в методе Чохральского формируется более устойчивая однородная тепловая конвекция в расплаве вокруг растущего кристалла, тогда как в методе Бриджмена имеет место неустойчивая нерегулярная конвекция. Энергичное перемешивание расплава способствует снижению тепловых флуктуаций, вызываемых нерегулярной конвекцией.

Рис. 7. Результат компьютерного моделирования распределения температуры при выращивании кристаллов методом Чохральского в вертикальном (а) и поперечном на фронте роста (б) сечениях кристалла CaF_2 с тиглем / Fig. 7. Result of computer simulation of the temperature distribution during crystal growth by the Czochralski method in vertical (a) and transverse at the growth front (b) sections of a CaF_2 crystal with a crucible.

Источник: данные авторов.

На рис. 8а показана схема роста кристалла по Чохральскому с указанием особенностей распределения тепловых потоков в температурном поле в расплаве и по кристаллу, которые объясняют специфику морфологической неустойчивости на поверхности раздела фаз в данном методе.

При выращивании тепловые потери Q_z происходят за счёт теплопроводности кристалла, укрепленного на охлаждаемом штоке. Тепловые потери из расплава Q_m и от кристалла Q_s происходят путём излучения. Поскольку выпуклый фронт кристаллизации образуется при осевом температурном градиенте, превосходящем радиальный, то на практике будет выполняться неравенство $Q_z \gg Q_m$ и Q_s . Тепловой поток потерь вдоль кристалла уменьшает температуру T_1 в центральной точке S диаметра фронта кристаллизации растущего кристалла и приводит к тому, что кроме осевого температурного градиента dT/dz возникает небольшая разница температур в области фронта между краем кристалла и центром. На изотермической поверхности T_1 раздела расплав-кристалл возникает небольшой радиальный градиент dT/dx , направленный к центру растущего кристалла, который повышает в центральной области фронта начала кристаллизации S энтропию плавления [17]. Согласно температурной зависимости энтропии плавления ΔS [18]:

$$\Delta S = \frac{\lambda_F}{kT_{\text{пл}}}, \quad (12)$$

где λ_F – скрытая теплота плавления, k – постоянная Больцмана, $T_{\text{пл}}$ – температура плавления, чем выше перегрев расплава, тем меньше энтропия на межфазной границе роста кристалла и, соответственно, вероятность образования граней на поверхности растущего кристалла.

Рис. 8. Схема выращивания кристаллов по методу Чохральского, а) схема процессов теплопереноса в методе Чохральского: Q_z – тепловые потери вдоль кристалла; Q_m – тепловые потери из расплава; Q_c – тепловые потери от кристалла; T_1 и T_2 – изотермические поверхности; $T_1 = T_0$ (температура кристаллизации); $T_2 = T_0 - \Delta T_{max}$ (ΔT_{max} – максимально допустимое переохлаждение на фронте кристаллизации); dT/dz – осевой температурный градиент; dT/dx – радиальный температурный градиент на фронте кристаллизации; F и S – точки начала формирования области гранного роста; R_F – радиус кривизны фронта роста; d_F – размер грани (заштрихованная область); б) картина характерного распределения фасеток в кристаллах иттрий-алюминиевого граната / Fig. 8. Scheme of growing crystals by the Czochralski method, а) a diagram of heat transfer processes in the Czochralski method: Q_z – heat losses along the crystal; Q_m – heat loss from the melt; Q_c – heat losses from the crystal; T_1 and T_2 – isothermal surfaces; $T_1 = T_0$ (crystallization temperature); $T_2 = T_0 - \Delta T_{max}$ (ΔT_{max} is the maximum permissible overcooling at the crystallization front); dT/dz – axial temperature gradient; dT/dx – radial temperature gradient at the crystallization front; F and S – points of the beginning of the formation of the faceted growth area; R_F – radius of curvature of the growth front; d_F – face size (shaded area); б) a picture of the characteristic distribution of facets in yttrium-aluminum garnet crystals.

Источник: [1].

Переохлаждение, создаваемое осевым градиентом dT/dz в F -области изотермической поверхности T_2 вместе с радиальным градиентом dT/dx , повышает энтропию плавления [18] на границе раздела фаз расплав-кристалл и за счёт формирования беспорядка, то есть шероховатости на поверхности роста, создаёт условия для образования фасеток [1] в осевом направлении растущего кристалла (рис. 8б). При этом размер грани определяется из соотношения [1]:

$$d_F = 2\sqrt{\frac{R_F \Delta T_{max}}{G}}, \quad (13)$$

где G – общий градиент температуры на фронте кристаллизации равный сумме градиентов в кристалле и расплаве.

3.3. Метод ГНК

В методе горизонтально направленной кристаллизации (ГНК) тигель в форме лодочки с шихтой исходных материалов перемещается горизонтально через

градиентное поле из зоны плавления в холодную зону отжига. Расплав обычно составляет 1/3 часть лодочки. Отличительной особенностью этого метода от прочих расплавных является то, что в нём высота расплава намного меньше площади его поверхности. Для корректного сравнения полученных результатов математического моделирования по каждому из методов в исходные данные расчётов закладывались одинаковые поперечные сечения получаемых кристаллов и их объёмы. Так, если в случае метода Бриджмена кристаллы имели размеры длиной 345 мм и в диаметре 92 мм, то кристаллы по ГНК имели высоту 38 мм, ширину 183 мм и длину 346 мм. Таким образом, в процессе роста по методу Бриджмена, высота кристалла равнялась 345 мм, то есть в 9 раз больше, чем в случае ГНК. Значительная высота столба расплава по сравнению с площадью его поперечного сечения наряду с неоднородным нагревом на краях приводит к интенсивной неустойчивой нерегулярной конвекции расплава вдоль стенок тигля и образованию в этих местах гранных форм роста. Формируемые интенсивной тепловой конвекцией гидродинамические потоки расплава отесняют области с нарушенным морфологическим составом к периферии в случае метода Бриджмена (рис. 5б), и к центру (рис. 7б) в случае метода Чохральского [1]. В методе ГНК при небольшой высоте расплава, большой длине и большой площади поверхности расплава, открытой по отношению к нагревателю, возникают температурные условия мягкой естественной конвекции [7] ламинарного характера в придонной части и по поверхности расплава без вихревых потоков (рис. 9), что исключает образование интенсивных гидродинамических и конвективных потоков, влияющих на степень стабильности процесса кристаллизации и морфологическую устойчивость фронта кристаллизации.

На рис. 9 приведена схема распределения придонных, поверхностных и в объёме расплава конвекционных потоков в горизонтальном контейнере при выращивании кристаллов по методу ГНК [7].

Рис. 9. Схема распределения придонных, поверхностных и в объёме расплава конвекционных потоков в горизонтальном контейнере при выращивании кристаллов по методу ГНК. / Fig. 9. Scheme of distribution of near-bottom and surface convection flows as well as convection flows in the volume of the melt in a horizontal container when growing crystals by the HDC method.

Источник: [7].

В результате, наличие слабой флуктуации температуры расплава вблизи межфазной границы практически не должно вызывать флуктуации скорости роста [7]. В нашем случае симметричное температурное поле, необходимое для создания морфологически устойчивого фронта кристаллизации, создавалось с

использованием двух графитовых ленточных дуговых нагревателей с отдельным управлением по мощности. При этом верхний над поверхностью шихты (и, соответственно, расплава) имел плоскую форму, а нижний имел перевернутую П-образную форму и размещался под тиглем (лодочкой) и обеспечивал равномерный прогрев как дна, так и боковых стенок тигля [19]. Как показано на рис. 10 (а, б), создаваемые тепловые условия обеспечивают слегка выпуклую изотерму фронта роста и, благодаря отдельному управлению нагревателей по мощности, нужный угол наклона вертикального градиента, что позволяет выращивать оптически совершенные кристаллы [1; 19].

Рис. 10. Результат компьютерного моделирования распределения температуры по продольному (а) и поперечному (б) сечению кристалла CaF_2 с тиглем в процессе кристаллизации по методу ГНК / Fig. 10. Result of computer simulation of the temperature distribution over the longitudinal (a) and transverse (b) sections of a CaF_2 crystal with a crucible in the process of crystallization by the HDC method.

Источник: данные авторов.

На практике в кристаллах, выращенных методом ГНК, оптические дефекты, связанные с гранным ростом, замечены не были [1]. Полученные результаты математического моделирования процесса роста для данного метода также подтверждают эту особенность.

4. Заключение

Проведённые исследования путём математического моделирования в области высокотемпературного роста кристаллов из расплава показали хорошее совпадение полученных результатов анализа процессов, влияющих на морфологическую устойчивость фронта кристаллизации, с известными экспериментальными данными для основных расплавных методов выращивания кристаллов.

Анализ результатов проведённых исследований указывает на преимущественные особенности метода ГНК по сравнению с остальными рассмотренными ростовыми методами по целому ряду актуальных вопросов.

1. Однородное тепловое поле вдоль оси роста кристалла при выпуклом фронте кристаллизации не создаёт предпосылок образования гранных форм роста. Указывает на значительное влияние теплофизических причин в образовании гранного роста.

2. В методе Бриджмена неравномерный прогрев вызывает конвекцию расплава у стенок тигля и соответствующую в этих местах флуктуацию температу-

ры в расплаве, что оказывает влияние на температурное изменение и величину энтропии плавления, которая в числе прочих термодинамических параметров определяет кинетику и морфологические особенности растущих кристаллов, связанных с гранным ростом кристаллов. Согласно [7] при $\Delta S < 1$ имеет место изометричный рост без ячеек и дендритов, но при $\Delta S > 4$ – всегда образуются грани. Указанные корреляции можно связать со степенью беспорядка (ΔS) в системе, которому способствуют, в том числе, вызываемые тепловой флуктуацией сильные конвекционные потоки в расплаве. В вертикальном методе кристаллизации по Бриджмену при переходе от кристаллов большого диаметра к меньшему из-за изменения плотности потока излучения I от нагревателя до тигля с веществом, в соответствии с зависимостью $I \sim (1/R^2)$, для поддержания постоянных энергетических затрат на получение расплава необходимо изменить конструкцию теплового узла, соответственно приблизив нагреватель к тиглю для уменьшения расстояния R . В противном случае необходимо значительно увеличить энергетические затраты на нагрев.

3. В методе Чохральского тепловые флуктуации в объёме расплава связаны с существованием конвекционных потоков, на которые активным образом оказывает влияние перемешивание расплава вращающимся кристаллом. Благодаря этому, в методе Чохральского формируется более устойчивая однородная тепловая конвекция в расплаве вокруг растущего кристалла, в отличие от метода Бриджмена, в котором имеет место неустойчивая нерегулярная конвекция. Однако переохлаждение, создаваемое в центре изотермической поверхности фронта роста, повышает энтропию плавления на границе раздела фаз расплава-кристалл и за счёт формирования беспорядка, то есть шероховатости на поверхности роста, создаёт условия для образования фасеток в осевом направлении растущего кристалла.

4. В методе ГНК при небольшой высоте расплава, большой длине и большой площади поверхности расплава, открытой по отношению к нагревателю, возникают температурные условия мягкой естественной конвекции ламинарного характера в придонной части и по поверхности расплава без вихревых потоков, что исключает образование интенсивных гидродинамических и конвективных потоков, влияющих на степень стабильности процесса кристаллизации и морфологическую устойчивость фронта кристаллизации. Специфика выращивания кристаллов горизонтальным методом не требует изменения конструкции теплового узла для получения расплава при выращивании кристаллов любого размера в пределах длины нагревательного модуля. При ГНК-методе расстояние между нагревателем и тиглем с плавящимся веществом остаётся неизменным независимо от размера выращиваемого кристалла и, следовательно, плотность потока излучения, приходящегося на поверхность вещества от источника (нагревателя), не будет изменяться, как в случае метода Бриджмена.

Статья поступила в редакцию 29.11.2020 г.

ЛИТЕРАТУРА

1. Багдасаров Х. С. Высокотемпературная кристаллизация из расплава. М.: Физматлит, 2004. 162 с.
2. Чернов А. А. Теория устойчивости гранных форм кристаллов // Кристаллография. 1971. Т. 16. № 4. С. 842–863.
3. The Bridgman Method Growth and Spectroscopic Characterization of Calcium Fluoride Single Crystals / Elswie H. I., Lazarević Z. Ž., Radojević V., Gilić M., Rabasović M., Šević D., Romčević N. Ž. // Science of Sintering. 2016. Vol. 48. Iss. 3. P. 333–341. DOI: 10.2298/SOS1603333E.
4. Nicoara I., Stef M., Pruna A. Growth of YbF₃+ -doped CaF₂+ crystals and characterization of Yb³⁺/Yb²⁺ conversion // Journal of Crystal Growth. 2008. Vol. 310. Iss. 7–9. P. 1470–1475. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2007.11.066.
5. Czochralski growth of UV-grade CaF₂ single crystals using ZnF₂ additive as scavenger / Ko J. M., Tozawa S., Yoshikawa A., Inaba K., Shishido T., Oba T., Oyama Y., Kuwabara T., Fukuda T. // Journal of Crystal Growth. 2001. Vol. 222. Iss. 1–2. P. 243–248. DOI: 10.1016/S0022-0248(00)00928-3.
6. Mazelsky R., Hopkins R. H., Kramer W. E. Czochralski-growth of calcium fluorophosphates // Journal of Crystal Growth. 1968. Vol. 3–4. P. 260–264. DOI: 10.1016/0022-0248(68)90145-0.
7. Лодиз Р., Паркер Р. Рост монокристаллов. М.: Мир, 1974. 540 с.
8. Тепловой узел установки для выращивания галоидных кристаллов методом горизонтально направленной кристаллизации. Патент РФ № 2643980 от 02.06.2018 г. / Юсим. В. А., Калиммулин Р. К., Рябченков В. В., Саркисов С. Э.
9. Соболев Б. П., Ломова В. И., Каримов Д. Н. Установка для выращивания кристаллов. Патент РФ № 120658 от 27.09.2012 г.
10. Алимов О. М., Аношин К. Е., Ежлов В. С. Устройство для выращивания монокристаллов из расплава методом Чохральского. Патент РФ № 2534103 от 27.11.2014 г.
11. Блистанов А. А. Кристаллы квантовой и нелинейной оптики: учебное пособие для вузов. М.: Наука, МИСИС, 2000. 432 с.
12. Сцинтилляционные детекторы на основе монокристаллов CaF₂-Eu / Шульгин Б. В., Бузмакова С. И., Викторов Л. В., Крымов А. Л., Петров В. Л., Подуровский С. В., Козлов А. А. и др. // Атомная энергия. 1993. Т. 75. № 1. С. 28–33.
13. Багдасаров Х. С. Горяинов Л. А. Тепло- и массоперенос при выращивании монокристаллов направленной кристаллизацией. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. 224 с.
14. Mathematical modeling of heat and mass transfer processes in the graphite thermal unit of the crystallization apparatus for Horizontal directional solidification method / Yusim V. A., Sarkisov S. E., Ryabchenkov V. V., Kloss Yu. Yu., Govorun I. V., Ivanova L. V., Sakmarov A. V. // Journal of Physics: Conference Series. 2020. Vol. 1560: International Interdisciplinary Scientific Conference “Advanced Element Base of Micro- and Nano-Electronics” (20–23 April 2020, Moscow, Russian Federation). P. 012060. DOI: 10.1088/1742-6596/1560/1/012060.
15. Velazquez L., Curilef S. A thermodynamic fluctuation relation for temperature and energy // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. 2009. Vol. 42. No. 9. P. 095006–095025. DOI: 10.1088/1751-8113/42/9/095006.
16. Jackson K. A. Single Crystal Growth // Crystal Growth: Proceedings of an International Conference on Crystal Growth (Boston, 20–24 June, 1966). Supplement to the Journal of Physics and Chemistry of Solids / ed. H. S. Peiser. New York: Pergamon Press, 1967. P. 17.
17. Tiller W. A. Crystal Growth from the melt // The art and Science of Growing Crystals / ed. J. J. Gilman. New York: John Wiley and Sons, Inc., 1963. P. 277.

18. Utech H. P., Brower W. S., Early J. G. Thermal correction and crystal growth in horizontal boats, from pattern, velocity measurement, and solid distributions // *Crystal Growth: Proceedings of an International Conference on Crystal Growth (Boston, 20–24 June, 1966). Supplement to the Journal of Physics and Chemistry of Solids B29* / ed. H. S. Peiser. New York: Pergamon Press, 1967. P. 201–205.
19. Sarkisov S. E., Ryabchenkov V. V. A device for producing single crystals of refractory fluorides. RF patent № 2608891, 26.01.2017.

REFERENCES

1. Bagdasarov Kh. S. *Vysokotemperaturnaya kristallizatsiya iz rasplava* [High temperature crystallization from the melt]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2004. 162 p.
2. Chernov A. A. [Stability theory of faceted crystal shapes]. In: *Kristallografiya* [Crystallography Reports], 1971, vol. 16, no. 4, pp. 842–863.
3. Elswie H. I., Lazarević Z. Ž., Radojević V., Gilić M., Rabasović M., Šević D., Romčević N. Ž. The Bridgman Method Growth and Spectroscopic Characterization of Calcium Fluoride Single Crystals. In: *Science of Sintering*, 2016, vol. 48, iss. 3, pp. 333–341. DOI: 10.2298/SOS1603333E.
4. Nicoara I., Stef M., Pruna A. Growth of YbF₃+doped CaF₂+ crystals and characterization of Yb³⁺/Yb²⁺ conversion. In: *Journal of Crystal Growth*, 2008, vol. 310, iss. 7–9, pp. 1470–1475. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2007.11.066.
5. Ko J. M., Tozawa S., Yoshikawa A., Inaba K., Shishido T., Oba T., Oyama Y., Kuwabara T., Fukuda T. Czochralski growth of UV-grade CaF₂ single crystals using ZnF₂ additive as scavenger. In: *Journal of Crystal Growth*, 2001, vol. 222, iss. 1–2, pp. 243–248. DOI: 10.1016/S0022-0248(00)00928-3.
6. Mazelsky R., Hopkins R. H., Kramer W. E. Czochralski-growth of calcium fluorophosphates. In: *Journal of Crystal Growth*, 1968, vol. 3–4, pp. 260–264. DOI: 10.1016/0022-0248(68)90145-0.
7. Додиз Р., Паркер Р. *The Growth of Single Crystals*. New Jersey, Englewood Cliffs, 1970.
8. Yusim V. A., Kalimmulin R. K., Ryabchenkov V. V., Sarkisov S. E. Thermal node of the installation for growing halide crystals by the method of horizontal directional crystallization. RF patent No. 2643980 dated 02.06.2018.
9. Sobolev B. P., Lomova V. I., Karimov D. N. Installation for growing crystals. RF patent no. 120658 dated 27.09.2012.
10. Alimov O. M., Anoshin K. E., Ezhlov V. S. A device for growing single crystals from a melt by the Czochralski method. RF patent no. 2534103 dated 27.11.2014.
11. Blistanov A. A. *Kristally kvantovoi i nelineinoi optiki* [Crystals of quantum and nonlinear optics]. Moscow, Nauka, MISIS Publ., 2000. 432 p.
12. Shul'gin B. V., Buzmakova S. I., Viktorov L. V., Krymov A. L., Petrov V. L., Podurovskii S. V., Kozlov A. A. [Scintillation detectors on the base of CaF₂-Eu single crystals]. In: *Atomnaya energiya* [Atomic Energy], 1993, vol. 75, no. 1, pp. 28–33.
13. Bagdasarov Kh. S., Goryainov L. A. *Teplo- i massoperenos pri vyrashchivanii monokristallov napravlennoi kristallizatsiei* [Heat and mass transfer in growing single crystals of directional solidification]. Moscow, FIZMATLIT Publ., 2007. 224 p.
14. Yusim V. A., Sarkisov S. E., Ryabchenkov V. V., Kloss Yu. Yu., Govorun I. V., Ivanova L. V., Sakmarov A. V. Mathematical modeling of heat and mass transfer processes in the graphite thermal unit of the crystallization apparatus for horizontal directional solidification method. In: *Journal of Physics: Conference Series*, 2020, vol. 1560: International Interdisciplinary Scientific Conference “Advanced Element Base of Micro- and Nano-Electronics” (20–23 April 2020, Moscow, Russian Federation), pp. 012060. DOI: 10.1088/1742-6596/1560/1/012060.

15. Velazquez L., Curilef S. A thermodynamic fluctuation relation for temperature and energy. In: *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 2009, vol. 42, no. 9, pp. 095006–095025. DOI: 10.1088/1751-8113/42/9/095006.
16. Jackson K. A. Single Crystal Growth. In: Peiser H. S., ed. *Crystal Growth: Proceedings of an International Conference on Crystal Growth (Boston, 20–24 June, 1966). Supplement to the Journal of Physics and Chemistry of Solids*. New York, Pergamon Press Publ., 1967, pp. 17.
17. Tiller W. A. Crystal Growth from the melt. In: J. J. Gilman, ed. *The art and Science of Growing Crystals*. New York, John Wiley and Sons, Inc. Publ., 1963, p. 277.
18. Utech H. P., Brower W. S., Early J. G. Thermal correction and crystal growth in horizontal boats, from pattern, velocity measurement, and solid distributions. In: Peiser H. S., ed. *Crystal Growth: Proceedings of an International Conference on Crystal Growth (Boston, 20–24 June, 1966). Supplement to the Journal of Physics and Chemistry of Solids B29*. New York, Pergamon Press Publ., 1967, pp. 201–205.
19. Sarkisov S. E., Ryabchenkov V. V. A device for producing single crystals of refractory fluorides. RF patent № 2608891, 26.01.2017.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Саркисов Степан Эрвандович – кандидат физико-математических наук, заведующий Лабораторией экспериментального моделирования и синтеза тугоплавких материалов Управления по нераспространению и физической защите Курчатовского комплекса реабилитации и нераспространения Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»;
e-mail: dr.stevesarkisov@gmail.com;

Юсим Валентин Александрович – старший научный сотрудник Лаборатории экспериментального моделирования и синтеза тугоплавких материалов Управления по нераспространению и физической защите Курчатовского комплекса реабилитации и нераспространения Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»;
e-mail: Yusim_VA@nrcki.ru;

Калимуллин Раф Каюмович – научный сотрудник Лаборатории экспериментального моделирования и синтеза тугоплавких материалов Управления по нераспространению и физической защите Курчатовского комплекса реабилитации и нераспространения Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»;
e-mail: dr.stevesarkisov@gmail.com;

Петров Сергей Владимирович – младший научный сотрудник Лаборатории экспериментального моделирования и синтеза тугоплавких материалов Управления по нераспространению и физической защите Курчатовского комплекса реабилитации и нераспространения Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»;
e-mail: pilzeners@mail.ru

Клосс Юрий Юрьевич – доктор физико-математических наук, начальник отдела физических процессов и прикладных технологий (ОМФПиПТ) Управления по нераспространению и физической защите Курчатовского комплекса реабилитации и нераспространения Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»;
e-mail: Kloss_YY@nrcki.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Stepan E. Sarkisov – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Laboratory Head, Laboratory of Experimental Modeling and Synthesis of Refractory Materials, Directorate for Nonproliferation and Physical Protection of the Kurchatov Rehabilitation and Nonproliferation Complex, National Research Centre ‘Kurchatov Institute’;

e-mail: dr.stevesarkisov@gmail.com;

Valentin A. Yusim – senior researcher, Laboratory of Experimental Modeling and Synthesis of Refractory Materials, Directorate for Nonproliferation and Physical Protection of the Kurchatov Rehabilitation and Nonproliferation Complex, National Research Center ‘Kurchatov Institute’;

e-mail: Yusim_VA@nrcki.ru;

Raf K. Kalimullin – researcher, Laboratory of Experimental Modeling and Synthesis of Refractory Materials, Directorate for Nonproliferation and Physical Protection of the Kurchatov Rehabilitation and Nonproliferation Complex, National Research Center ‘Kurchatov Institute’;

e-mail: dr.stevesarkisov@gmail.com;

Sergey V. Petrov – research assistant, Laboratory of Experimental Modeling and Synthesis of Refractory Materials, Directorate for Nonproliferation and Physical Protection of the Kurchatov Rehabilitation and Nonproliferation Complex, National Research Center ‘Kurchatov Institute’;

e-mail: pilzeners@mail.ru;

Yuri Y. Kloss – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Departmental Head, Department of Physical Processes and Applied Technologies (OMPPiPT) of the Directorate for Nonproliferation and Physical Protection of the Kurchatov Rehabilitation and Nonproliferation Complex, National Research Center ‘Kurchatov Institute’;

e-mail: Kloss_YY@nrcki.ru

ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Моделирование тепловых процессов, влияющих на образование гранных форм роста в монокристаллах / Юсим В. А., Саркисов С. Э., Калимуллин Р. К., Петров С. В., Клосс Ю. Ю. // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. 2020. №4. С. 28–48.

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-4-28-48

FOR CITATION

Yusim V. A., Sarkisov S. E., Kalimullin R. K., Petrov S. V., Kloss Y. Y. Modeling of thermal processes affecting the origin of facial growth forms in single crystals. In: *Bulletin of the Moscow state regional University. Series: Physics-Mathematics*, 2020, no. 4, pp. 28–48.

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-4-28-48