



Борисов Дмитрий Витальевич

**Двухпараметрическая модель анизотропной турбулентности и ее
применение для расчета конвекции расплава кремния
в ростовых установках метода Чохральского**

1.1.9. Механика жидкости, газа и плазмы

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург
2024

Работа выполнена в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого».

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук, профессор **Смирнов Евгений Михайлович**

Официальные оппоненты:

Исаев Сергей Александрович, доктор физико-математических наук, 01.02.05. Механика жидкости, газа и плазмы, профессор, заведующий лабораторией фундаментальных исследований, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет гражданской авиации имени Главного маршала авиации А.А. Новикова», город Санкт-Петербург.

Богданов Сергей Рэмович, доктор физико-математических наук, 01.02.05. Механика жидкости, газа и плазмы, 01.04.02. Теоретическая физика, доцент, ведущий научный сотрудник, Институт водных проблем Севера — обособленное подразделение Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра "Карельский научный центр Российской академии наук", город Петрозаводск.

Ведущая организация:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки **Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук**, город Новосибирск

Защита состоится «10» июня 2024 года в «16» часов на заседании диссертационного совета У.1.1.9.02 созданного на базе Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого» по адресу: г. Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д.29, корпус 1, 3й этаж, ауд. 348-8.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого» и на сайте <http://www.spbstu.ru/science/>.

Автореферат разослан « » мая 2024 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета У.1.1.9.02,
кандидат физико-математических наук

Колесник Елизавета Владимировна

Общая характеристика работы

Актуальность работы

Техника вытягивания кристалла из расплава впервые была предложена Чохральским в 1917 году. На сегодняшний день метод Чохральского является одним из самых широко используемых методов для выращивания полупроводниковых монокристаллов кремния, которые используются в различных промышленных приложениях, таких как солнечные батареи, процессоры, элементы памяти и др. Для получения монокристаллов высокого качества необходимо контролировать массоперенос примесей, которые встраиваются в кристалл во время ростового процесса. Течение расплава кремния, как правило, – турбулентное, что задается условиями выращивания кристаллов даже относительно малого диаметра (10 см) в лабораторных установках. Наличие разномасштабных турбулентных структур в тиглях для промышленного выращивания кристаллов диаметром 20-30 см затрудняет контроль концентрации примесей, а также может приводить к смене монокристаллического режима роста поликристаллическим. На сегодняшний день в промышленном производстве актуальной задачей является рост бездислокационных кристаллов диаметром до 300 мм и массой до 300 кг. Можно отметить, что уже были продемонстрированы кристаллы диаметром 450 и 550 мм и массой, превышающей 300 кг. Кроме того, были получены кристаллы массой около 1000 кг.

Установка по выращиванию кристаллов методом Чохральского состоит из тигля, заполненного расплавом. Затравочный кристалл, имеющий определенную ориентацию кристаллической решетки, крепится к вытягиваемому стержню. Стержень опускают в расплав до тех пор, пока затравочный кристалл не погрузится в расплав. Расплав плавно нагревается с использованием резистивного или индукционного нагревателя. Температура расплава аккуратно настраивается для обеспечения роста затравочного кристалла. После установления термически стационарного состояния стержень плавно поднимают вверх и расплав кристаллизуется на поверхности затравочного кристалла. Поверхность выращиваемого кристалла постоянно охлаждается для обеспечения высоких температурных градиентов на поверхности раздела расплав-кристалл. Кристалл и тигель вращают в противоположные стороны для поддержания цилиндрической формы кристалла и контроля естественно-конвективного течения расплава. Для отведения паразитных примесей от элементов ростовой установки имеет место прокачка инертного газа аргона через ростовую камеру.

Тепломассообмен, определяемый конвекцией расплава, играет ключевую роль в получении монокристаллов высокого качества, поскольку конвекция обуславливает такие важные характеристики как форма фронта кристаллизации и вид изолиний температуры в расплаве. Кроме того, конвекция определяет концентрацию примесей в окрестности фронта кристаллизации, а также концентрацию примесей и допантов в кристалле. Конвекция в расплаве возникает под воздействием следующих факторов: 1) естественная конвекция, вызванная вертикальным градиентом температуры, 2) вынужденная конвекция, определяемая вращением тигля и кристалла, 3) термокапиллярная конвекция Марангони, обусловленная градиентом поверхностного натяжения на свободной поверхности расплава, 4) сдвиговое напряжение на свободной поверхности расплава, создаваемое прокачиваемым инертным газом аргоном.

Экспериментальное исследование турбулентной конвекции расплава затруднено в связи с высокими температурами, а также требуемой высокой точностью экспериментального оборудования, необходимой для улавливания турбулентных пульсаций. В связи с этим численное моделирование является эффективным инструментом для детального исследования

турбулентных тепло- и массообмена внутри расплава. Наиболее точным методом расчета турбулентных течений является прямое численное моделирование (*англ.* DNS, Direct Numerical Simulation), нацеленное на разрешение всех пространственно-временных масштабов турбулентности и не требующее дополнительных гипотез для замыкания уравнений. Однако данный подход требует большое количество вычислительных ресурсов, что делает невозможным его применение в практических инженерных расчетах. Наиболее востребованным и относительно экономичным на сегодняшний день является подход, использующий уравнения Навье – Стокса, осредненные по Рейнольдсу (*англ.* Reynolds-averaged Navier-Stokes (RANS)), и позволяющий проводить расчеты в осесимметричной постановке (в том числе). Однако RANS модели вихревой вязкости, как правило, некорректно ухватывают турбулентные характеристики, такие как тензор рейнольдсовых напряжений и вектор турбулентного теплового и массового потоков, входящие, соответственно, в уравнения баланса импульса, температуры и концентрации. Это в свою очередь приводит к неправильному предсказанию тенденций по ключевым характеристикам процесса в зависимости от ростовых параметров. Таким образом, для корректного отражения свойств турбулентности в расплаве требуются модели, ориентированные на учет анизотропии тепло- и массопереноса.

Настоящая работа направлена, во-первых, на разработку и последующую валидацию подхода к моделированию тензора рейнольдсовых напряжений и вектора турбулентного теплового/массового потоков, который использует локальные скалярные параметры («масштабы») турбулентности и учитывает различные факторы анизотропии, и, во-вторых, на разработку специализированной RANS модели турбулентности, ориентированной на расчет турбулентной конвекции расплава и использующей указанный выше подход для замыкания осредненных по Рейнольдсу уравнений.

Цели работы

1) Разработка, настройка и валидация замыкающих соотношений, которые оперируют локальными скалярными параметрами турбулентности, но вместе с тем учитывают анизотропию турбулентного переноса при моделировании тензора рейнольдсовых напряжений и вектора турбулентного потока тепла;

2) Генерация численных данных для свободно- и смешанно-конвективных турбулентных течений жидкостей с низким числом Прандтля с использованием вихреразрешающих подходов; обработка данных для получения статистических характеристик турбулентности, требующихся для тестирования разрабатываемых моделей;

3) Разработка, настройка и валидация специализированной двухпараметрической RANS модели, которая использует разработанные замыкающие соотношения и протестирована на основе результатов расчетов, полученных вихреразрешающим методом и в экспериментальных исследованиях гидродинамики расплава и тепломассопереноса в установках выращивания кристаллов кремния по методу Чохральского.

4) Применение разработанной двухпараметрической RANS модели для проведения параметрических расчетов и анализа влияния ростовых параметров на структуру конвекции расплава кремния в экспериментальных установках метода Чохральского.

Научная новизна работы

1) Разработан метод реконструкции анизотропного тензора рейнольдсовых напряжений и векторов турбулентного потока тепла и массы по локальным скалярным параметрам турбулентности.

2) С применением вихреразрешающих методов получены новые данные по статистическим характеристикам турбулентной конвекции жидкостей с низким числом Прандтля, имеющие как самостоятельное значение, так и выступающие в качестве тестовых при валидации разработанного метода учета анизотропии турбулентности.

3) Предложена и протестирована новая двухпараметрическая модель турбулентности (STR k - ϵ модель), ориентированная на проведение численных исследований и предсказательных расчетов гидродинамики расплава и тепломассопереноса в установках выращивания кристаллов кремния по методу Чохральского.

4) С применением разработанной модели анизотропной турбулентности проведены многовариантные расчеты, проясняющие влияние ростовых параметров на структуру конвекции расплава кремния в экспериментальных установках метода Чохральского.

Теоретическая и практическая значимость работы

Разработанный метод приближенной реконструкции анизотропного тензора рейнольдсовых напряжений учитывает все основные причины анизотропии турбулентности, присущей термоконвективной конвекции в неподвижных и медленно вращающихся емкостях.

Предложенная RANS модель турбулентности (STR k - ϵ) модель может быть использована для практических инженерных расчетов турбулентной конвекции расплава в тиглях установок выращивания кристаллов методом Чохральского. Применение этой модели сочетает быструю скорость получения расчетных данных, характерную для двумерных вычислений на основе RANS подхода, и точность предсказаний на уровне, обеспечиваемом в трехмерном моделировании с использованием вихреразрешающих методов.

Положения, выносимые на защиту

1) Метод реконструкции анизотропного тензора рейнольдсовых напряжений и векторов турбулентного потока тепла и массы по локальным скалярным параметрам турбулентности, именуемый «гипотеза STR/GGDH».

2) STR k - ϵ модель турбулентности, построенная с использованием гипотезы STR/GGDH и обеспечивающая повышение точности расчетов турбулентной конвекции расплава.

3) Результаты параметрических расчетов по анализу влияния ростовых параметров на структуру конвекции расплава кремния в экспериментальных установках метода Чохральского.

Достоверность полученных результатов

Для настройки и валидации разработанных моделей использовались достоверные взаимодополняющие наборы расчетных и экспериментальных данных. Все расчеты проведены с использованием верифицированного лицензионного программного продукта CGSim, разработанного в ООО «Софт-Импакт» и предназначенного для моделирования различных процессов выращивания кристаллов из расплава. Достоверность полученных расчетных результатов обеспечивается их согласованностью с экспериментальными данными, сеточной сходимостью, отсутствием противоречивых результатов.

Апробация работы

Результаты работы были представлены на российских и международных конференциях и симпозиумах: Восьмой Российской Национальной конференции по теплообмену (РНКТ-8) (Москва, 2022), 22-ой Американской конференции по Росту Кристаллов и Эпитаксии (ACCGE-22), XLVIII Недели науки СПбПУ (Санкт-Петербург, 2022), XLVIX Недели науки СПбПУ (Санкт-Петербург, 2023), 2-ом Международном Симпозиуме по Моделированию Процесса Роста Кристаллов (Ченнаи, 2021) (Ченнаи, Индия), 3-ем Международном Симпозиуме по Моделированию Процесса Роста Кристаллов (MCGPD-2023) (Ченнаи, 2023).

Публикации по теме диссертации и личный вклад автора

Основные результаты работы изложены в 5 научных публикациях, включая 4 статьи, индексируемые в базах Web of Science и Scopus и 1 статью, опубликованную в издании из списка ВАК.

Все представленные расчеты и их обработка выполнены лично автором диссертации.

Структура работы

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы, состоящего из 170 наименований. Работа изложена на 146 страницах текста, включая 17 таблиц и 57 рисунков.

Содержание работы

Во **Введении** обоснована актуальность темы, ее научная и практическая значимость, сформулированы цели и основные задачи исследования.

В **Главе 1** представлен литературный обзор работ, посвященных экспериментальному и численному исследованию турбулентной конвекции расплава в установках выращивания кристаллов методом Чохральского. В **параграфе 1.1** приведено описание гидродинамических и тепломассообменных процессов в расплаве кремния. Рассмотрены различные механизмы возникновения конвекции, описан процесс формирования и переноса важнейшей примеси, влияющей на качество кристалла – кислорода. В **параграфе 1.2** обзореваются опубликованные работы по экспериментальному исследованию структуры течения расплава. **Параграф 1.3** посвящен обзору работ по численному моделированию ламинарной и турбулентной конвекции расплава. Дан обзор работ, в которых применяются разные подходы к моделированию турбулентности: RANS, LES, гибридный LES/RANS метод, а также прямое численное моделирование. Кроме того, обзореваются работы по численному моделированию турбулентности у свободной поверхности. Наконец, в **параграфе 1.4** на основе анализа литературы делается вывод о важности и актуальности разработки специализированной RANS модели турбулентности, учитывающей при расчете конвекции расплава различные факторы анизотропии турбулентности, включая учет влияния свободной поверхности на характеристики турбулентности.

В **Главе 2** представлены исходные математические модели и численные методы. В **параграфе 2.1** описаны уравнения динамики и тепломассообмена, которые решаются с использованием различных подходов: DNS, Implicit LES (ILES) и RANS. В **параграфе 2.2** дана математическая формулировка двухпараметрической k - ε модели турбулентности Чена. В **параграфе 2.3** изложена химическая модель переноса кислорода. Приведены граничные условия

для концентрации кислорода в расплаве и концентрации SiO в газе. В параграфе 2.4 описаны численные методы, реализованные в коммерческом программном пакете CGSim (Flow Module), включая основные положения используемого метода конечных объемов, аппроксимации диффузионных и конвективных слагаемых на блочных структурированных сетках. Описан метод SIMPLEC для решения уравнений Навье-Стокса.

В Главе 3 описаны методика и результаты генерации «эталонных» статистических данных о турбулентности в свободно- и смешанно-конвективных турбулентных течениях жидкостей с низким числом Прандтля с использованием вихреразрешающих подходов, а именно для задачи турбулентной свободной конвекции в кубической полости с разнонагретыми изотермическими вертикальными стенками и для задачи турбулентной конвекции расплава в тигле исследовательской установки EKZ 1300, предназначенной для выращивания кристаллов методом Чохральского. Результаты расчетов турбулентной свободной конвекции в кубической полости изложены в параграфе 3.1. Схема расчетной области представлена на рисунке 1. Использовались расчетные сетки, содержащие 8 (базовая) и 64 (измельченная) миллионов ячеек. Расчеты проводились при числах Рэлея $Ra = 10^6, 10^7, 10^8$ и числе Прандтля $Pr = 0.01$. Использовался четвертый порядок аппроксимации конвективных и диффузионных слагаемых. Шаги по времени подбирались так, чтобы локальное число Куранта было порядка единицы. Длительность сбора статистики варьировалась от $20 t_{sc}$ до $60 t_{sc}$ ($t_{sc} = \sqrt{H/g\beta\Delta T}$ – характерное время плавучести). Проведенное исследование вопросов достаточности выборок для сбора статистики и сеточной зависимости показало хорошее согласование статистических данных, полученных при расчетах на двух сетках и их слабую зависимость от использованной для осреднения выборки, что свидетельствует о надежности полученных данных.

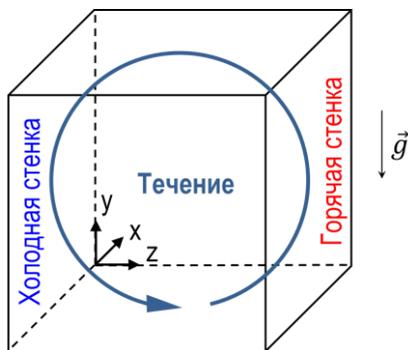


Рисунок 1 – Схема расчетной области для задачи турбулентной конвекции в кубической полости.

Рассчитанное течение представляет собой подъемно-опускное движение под действием силы плавучести (рисунок 2а-б). Высокие значения кинетической энергии наблюдаются в месте столкновения слоев жидкости, движущихся вдоль вертикальных стенок, с горизонтальными стенками (рисунок 2в). Ввиду отрицательного вертикального градиента температуры в объеме жидкости, приводящего к стабилизации течения, в середине полости имеют место очень низкие значения кинетической энергии турбулентности. Максимальные значения скорости диссипации

имеют место вдоль твердых стенок ввиду доминирования вязких эффектов (рисунок 2г). Для исследуемых режимов результаты DNS показывают весьма резкое падение нормальных напряжений $\overline{v'v'}$ к горизонтальным стенкам полости и $\overline{w'w'}$ к вертикальным стенкам, что обусловлено затуханием, прежде всего, ортогональных стенке пульсаций скорости (рисунок 2д).

Для корректного предсказания переноса кинетической энергии турбулентности в RANS расчетах необходимо правильно описывать баланс, который определяется, в том числе, и источниковыми слагаемыми, а именно генерацией за счет сдвига средней скорости P_k и генерацией за счет силы плавучести G_k . С целью получения использованных в дальнейшем тестовых данных для генерационных членов были рассчитаны распределения величин P_k и G_k , приведенные на рисунке 2е. Отмечено, что увеличение скорости в окрестности левой части

нижней стенки полости, а также в окрестности правой части верхней стенки приводит к отрицательным значениям сдвиговой генерации в этих местах, последнее способствует снижению уровня k .

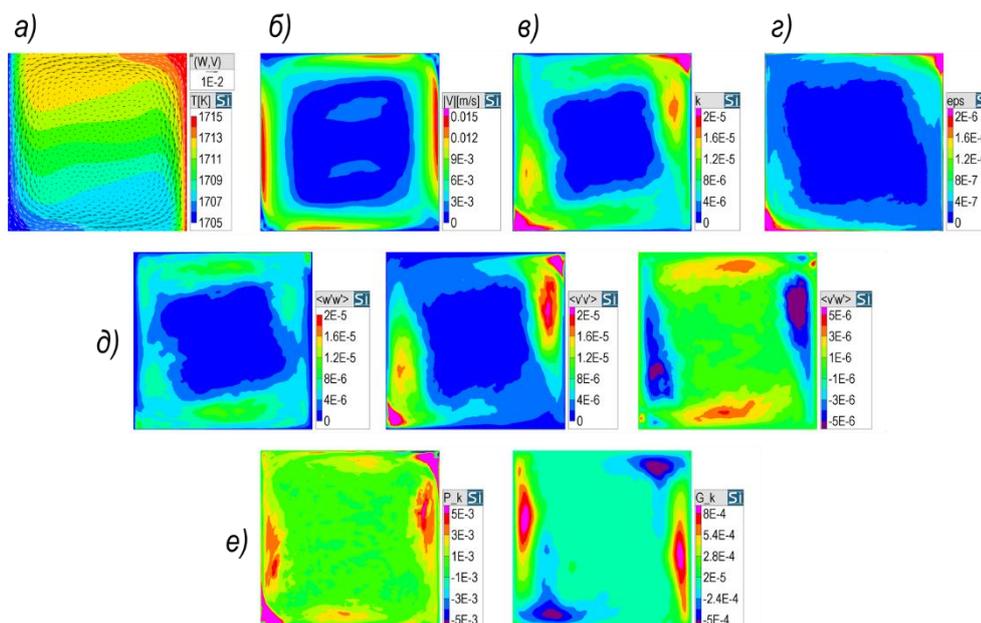


Рисунок 2 – Распределения температуры (с наложенными векторами скорости), модуля проекции скорости на центральное вертикальное сечение (м/с), кинетической энергии турбулентности ($\text{м}^2/\text{с}^2$), скорости диссипации ($\text{м}^2/\text{с}^3$) (а-г), реинольдсовых напряжений ($\text{м}^2/\text{с}^2$) (д), а также генерационных слагаемых ($\text{кг}/\text{м}\cdot\text{с}^3$) (е) в центральном вертикальном сечении полости для $\text{Ra} = 10^7$, полученные на базовой сетке. Компоненты скорости v и w соответствуют вертикальному и горизонтальному направлениям, соответственно.

В параграфе 3.2 приведены результаты ILES расчета турбулентной конвекции расплава в тигле установки по выращиванию кристаллов кремния методом Чохральского диаметром 100 мм. Расчетная область для численного решения сопряженной задачи турбулентной конвекции расплава, сформулированной на основе данных для ростовой установки EKZ 1300, включает расплав, кристалл, кварцевый и графитовый тигли, а также часть газовой области над расплавом (рисунок 3). Приведены граничные условия, ростовые параметры и свойства материалов. Расчетная сетка для численного решения поставленной трехмерной задачи состояла из 17 млн контрольных объемов. Использовался третий порядок аппроксимации конвективных слагаемых (по схеме QUICK) и второй порядок аппроксимации диффузионных слагаемых. Дискретизация по времени проводилась со вторым порядком точности по неявной схеме Эйлера. Значение шага по времени подбиралось так, чтобы локальное число Куранта было порядка единицы. Длительность сбора статистики составляла $120t_{sc}$.

Рассчитанное векторное распределение скорости (рисунок 4) показывает, что в расплаве присутствуют разномасштабные турбулентные структуры. Максимальные значения модуля скорости имеют место вдоль мениска, а также вдоль свободной поверхности, что является следствием высоких значений термо- и солито-капиллярного коэффициентов. Турбулентность генерируется в основном за счет двух факторов: действия силы плавучести в объеме расплава и эффекта Марангони вдоль свободной поверхности. Под интерфейсом имеет место противодействие, оказываемое вращением кристалла, эффекту Марангони, увлекающему расплав вдоль мениска к кристаллу.

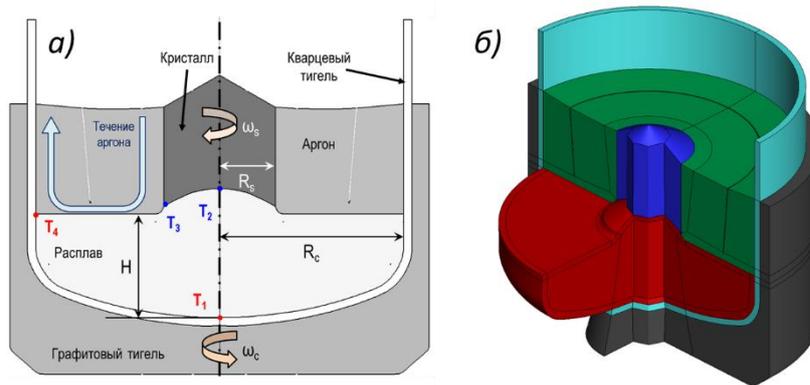


Рисунок 3 – Схема расчетной области (а) и расчетная область (б).

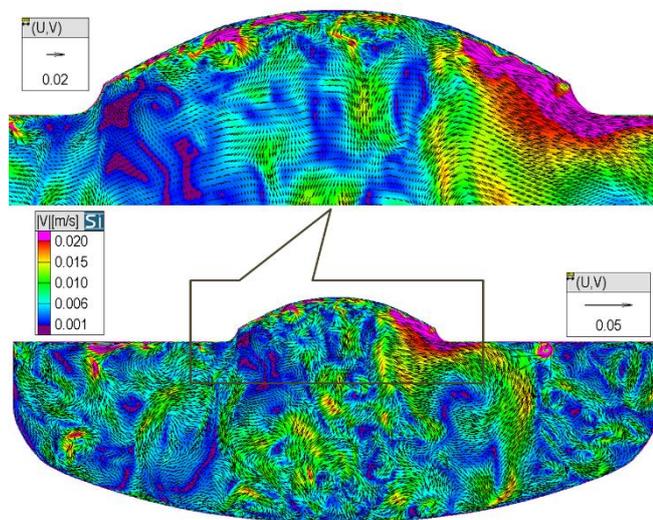


Рисунок 4 – Мгновенное поле векторов скорости, наложенное на распределение модуля скорости в центральном вертикальном сечении расплава. Компоненты скорости u и v соответствуют радиальному и осевому направлениям, соответственно.

На рисунке 5а иллюстрируются распределения нормальных и сдвиговых реинольдсовых напряжений. Как и в случае задачи конвекции в кубической полости, имеет место более резкое падение напряжений $\overline{u'u'}$ к вертикальной части стенки тигля и $\overline{v'v'}$ к околгоризонтальной части стенки тигля и интерфейса кристаллизации, вызванное фактором пристеночной анизотропии. В отличие от твердой стенки, где имеет место затухание всех компонент пульсаций скорости, на свободной поверхности затухает только ортогональная к поверхности компонента, в то время как касательные, наоборот, усиливаются, что вызвано влиянием термо- и солото-капиллярных эффектов. В подкристалльной области в объеме расплава имеет место превалирование напряжения $\overline{v'v'}$ над напряжением $\overline{u'u'}$.

Рисунок 5б иллюстрирует снижение вертикальной компоненты турбулентного теплового потока к околгоризонтальной части стенки тигля и интерфейса кристаллизации, а также горизонтальной части свободной поверхности, что вызвано демпфированием ортогональной стенке/поверхности компоненты пульсации скорости. Максимальные абсолютные значения сдвиговой генерации наблюдаются вдоль стенки тигля, интерфейса кристаллизации, а также у свободной поверхности ввиду высоких значений градиентов скорости осредненного течения в этих областях (рисунок 5в). При этом имеют место как положительные, так и отрицательные значения, способствующие реламинаризации течения. Эффект реламинаризации, инициируемый отрицательной сдвиговой генерацией, очень важен при расчете турбулентного массопереноса кислорода, свидетельства этому даются в главе 5.

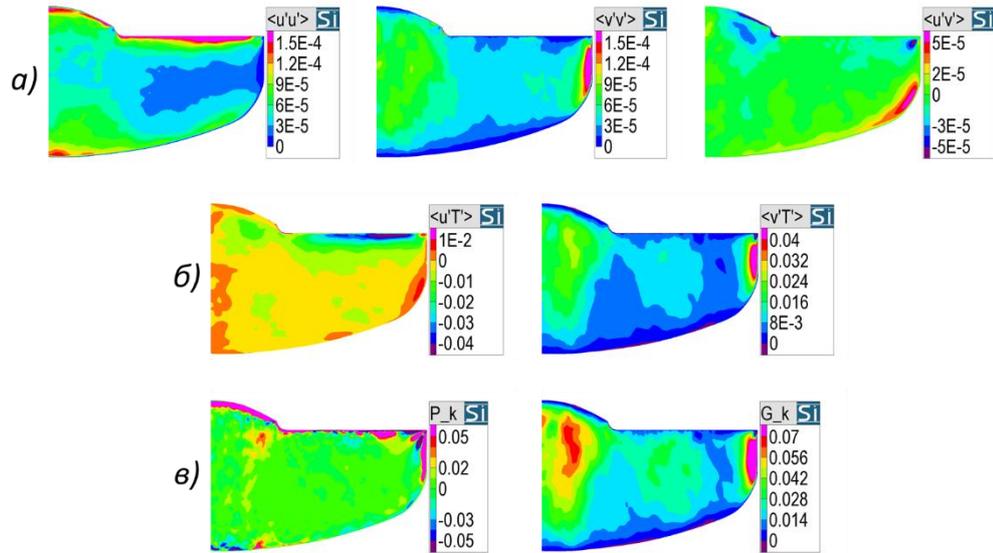


Рисунок 5 – Распределения реинольдсовых напряжений ($\text{м}^2/\text{с}^2$) (а), вектора турбулентного потока тепла ($\text{К}\cdot\text{м}/\text{с}$) (б), а также генерационных слагаемых ($\text{кг}/\text{м}\cdot\text{с}^3$) (в) в центральном вертикальном сечении расплава. Компоненты пульсационной скорости u' и v' соответствуют радиальному и осевому направлениям, соответственно.

Глава 4 посвящена изложению метода реконструкции анизотропного тензора реинольдсовых напряжений и векторов турбулентного потока тепла и массы по локальным скалярным параметрам турбулентности («гипотеза» STR/GGDH). Для ее применения в качестве скалярных характеристик турбулентности, выступают кинетическая энергии турбулентности и скорость диссипации. Для описания турбулентного тепло- и массообмена в расплаве используется модель GGDH, которая учитывает анизотропию теплопереноса, сохраняя при этом вычислительную эффективность традиционной модели SGDH.

В параграфе 4.1 представлен обзор известных подходов к моделированию турбулентных напряжений/потоков. Рассматриваются дифференциальные и алгебраические модели реинольдсовых напряжений, модели турбулентных потоков тепла и массы.

В параграфе 4.2 приведена математическая формулировка гипотезы. Согласно гипотезе STR (англ. Stress Tensor Reconstruction) тензор реинольдсовых напряжений реконструируется путем введения тензора анизотропии, подлежащего определению, и в соответствии с источниковыми слагаемыми, присутствующими в уравнениях переноса реинольдсовых напряжений:

$$\begin{aligned} \overline{u'_i u'_j} = & \frac{2}{3} k A_{ij} - \frac{2}{3} k \tau_{rel} \left(A_{ki} \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_k} + A_{kj} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_k} - \frac{2}{3} A_{kl} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_l} A_{ij} \right) - \\ & - \tau_{rel} \beta \left(g_i A_{jk} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_k} + A_{ik} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_k} g_j - \frac{2}{3} g_k A_{kl} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_l} A_{ij} \right). \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь A_{ij} представляет собой тензор *приповерхностной* анизотропии, который отвечает за перераспределение кинетической энергии турбулентности между диагональными компонентами тензора реинольдсовых напряжений, и тем самым обеспечивает демпфирование напряжений, содержащих ортогональную стенке пульсацию скорости, в окрестности стенки. След тензора A_{ij} равен трем. Второе и третье слагаемые в (1) учитывают влияние градиента осредненного течения, а также эффекта плавучести на реинольдсовые напряжения. Эти слагаемые строятся по аналогии

с соответствующими источниками в уравнениях переноса рейнольдсовых напряжений. Вычитание $\frac{2}{3}A_{kl}\frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_l}A_{ij}$ и $\frac{2}{3}g_k A_{kl}\frac{\partial T}{\partial x_l}A_{ij}$ производится для обеспечения равенства нулю следа второго и третьего слагаемых.

Предполагается, что в системе координат, связанной со стенкой, тензор A_{ij} является диагональным. Для определения компонент тензора среди прочего будет использоваться функция вида:

$$\Phi(x; c_1, c_2, c_3) = \left(1 - \exp\left(-\left(\frac{x}{c_1}\right)^{c_2}\right)\right)^{c_3}, \quad (2)$$

где x представляет собой переменный аргумент, c_1, c_2, c_3 – константы.

«Ортогональная стенке» компонента определяется как

$$A_{\perp} = A_{\perp, Kh}(1 - f_{\perp}) + A_{\perp, t}f_{\perp}. \quad (3)$$

Здесь «колмогоровская» часть $A_{\perp, Kh}$ реализуется вблизи стенки/свободной поверхности и представляет собой функцию Φ , аргументом которой является безразмерное расстояние до стенки/свободной поверхности Y_{Kh} , построенное по колмогоровскому масштабу длины $\eta_{Kh} = (\nu^3/\varepsilon)^{1/4}$:

$$A_{\perp, Kh} = \Phi(Y_{Kh}, A_{o, Kh1}, B_{o, Kh1}, C_{o, Kh1}), \quad (4)$$

где $Y_{Kh} = l/\eta_{Kh}$. Здесь l – размерное расстояние до стенки/свободной поверхности, $A_{o, Kh1}, B_{o, Kh1}, C_{o, Kh1}$ представляют собой эмпирические константы. «Турбулентная» часть $A_{\perp, t}$ реализуется на некотором расстоянии от стенки/свободной поверхности и представляет собой функцию Φ , аргументом которой является безразмерное расстояние Y_t , построенное по турбулентному масштабу длины $l_t = k^{3/2}/\varepsilon$:

$$A_{\perp, t} = \Phi(Y_t, A_{o, t}, B_{o, t}, C_{o, t}), \quad (4)$$

где $Y_t = l/l_t$; $A_{o, t}, B_{o, t}, C_{o, t}$ – эмпирические константы.

Сшивающая функция f_{\perp} используется для плавного взвешивания колмогоровской и турбулентной частей и определяется следующим образом:

$$f_{\perp} = \Phi(Y_{Kh}, A_{o, Kh2}, B_{o, Kh2}, C_{o, Kh2}). \quad (5)$$

Здесь $A_{o, Kh2}, B_{o, Kh2}, C_{o, Kh2}$ – эмпирические константы.

Параллельные к стенке компоненты A_{\parallel} и A_{ϑ} определяются, исходя из равенства трем следа тензора A_{ij} :

$$A_{\parallel} = A_{\vartheta} = \frac{1}{2}(3 - A_{\perp}). \quad (6)$$

После определения компонент тензора A_{ij} в собственной системе координат осуществляется пересчет компонент тензора в декартову или цилиндрическую систему координат. Поскольку исходное определение компонент тензора A_{ij} осуществляется в неподвижной собственной системе координат тензора, привязанной к геометрии стенки и

свободной поверхности, данная формулировка является тензорно инвариантной в отношении преобразований расчетной системы координат.

По аналогии с ортогональной компонентой тензора анизотропии время релаксации τ_{rel} определяется как суперпозиция колмогоровского масштаба $\tau_{Kh} = (\nu/\varepsilon)^{1/2}$ и турбулентного масштаба $\tau_{k-\varepsilon} = k/\varepsilon$ времени:

$$\tau_{rel} = C_{\tau,Kh}\tau_{Kh}(1 - f_{\tau}) + C_{\tau,k-\varepsilon}\tau_{k-\varepsilon}f_{\tau}. \quad (7)$$

Сшивающая функция f_{τ} используется для гладкого взвешивания между двумя масштабами времени и определяется следующим образом:

$$f_{\tau} = \Phi(Y_{Kh}, A_{\tau}, B_{\tau}, C_{\tau}). \quad (8)$$

Здесь $C_{\tau,Kh}$, $C_{\tau,k-\varepsilon}$, A_{τ} , B_{τ} , C_{τ} – эмпирические константы.

Турбулентный тепловой поток определяется в соответствии с формулой GGDH:

$$\overline{u_i T'} = -\frac{\tau_{rel}}{Pr_t} \overline{u_i u_j'} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j}, \quad (9)$$

где Pr_t представляет собой турбулентное число Прандтля. Масштаб времени в формуле GGDH предполагается равным времени релаксации в гипотезе STR.

В параграфе 4.2 приведены результаты настройки набора эмпирических констант гипотезы STR/GGDH на литературных данных DNS для задачи развитого турбулентного неизотермического течения в плоскопараллельном канале для чисел Рейнольдса $Re_{\tau} = 180, 395, 640, 1020$ и чисел Прандтля $Pr = 0.025$ и $0.71^{1,2}$. Значения констант приведены в таблице 1.

Таблица 1 – Значения констант в гипотезе STR/GGDH

$A_{o,Kh1}$	$B_{o,Kh1}$	$C_{o,Kh1}$	$A_{o,Kh2}$	$B_{o,Kh2}$	$C_{o,Kh2}$	$A_{o,t}$	$B_{o,t}$	$C_{o,t}$
24	1.5	1.8	30	2	1.5	1.2	1	0.3
$C_{\tau,Kh}$	$C_{\tau,k-\varepsilon}$	A_{τ}	B_{τ}	C_{τ}				
2.1	0.14	22	3	0.75				

При настройке констант, присутствующих в аппроксимации турбулентного теплового потока для случая $Pr = 0.71$, использовалось постоянное значение турбулентного числа Прандтля $Pr_t = 0.8$, а для случая $Pr = 0.025$ была проведена более точная настройка Pr_t :

$$Pr_t = Pr_t^{bl}(1 - f_{Pr}) + Pr_t^{core} f_{Pr}. \quad (10)$$

Здесь $Pr_t^{bl} = 2.5$ и $Pr_t^{core} = 1.25$ представляют собой значения турбулентного числа Прандтля в пограничном слое и ядре течения, соответственно, f_{Pr} – сшивающая функция.

$$f_{Pr} = \Phi(Y_{Kh}, A_{Pr}, B_{Pr}, C_{Pr}). \quad (11)$$

Здесь $A_{Pr} = 25$, $B_{Pr} = 1.0$, $C_{Pr} = 1.0$ – эмпирические константы.

В параграфе 4.3 представляются результаты валидации гипотезы STR/GGDH на задаче турбулентной конвекции в кубической полости с использованием набора констант, настроенного

¹ Abe H., Kawamura H., Matsuo Y. Direct numerical simulation of a fully developed turbulent channel flow with respect to Reynolds number dependence // Trans. ASME J. Fluids Eng. – 2001. – Vol. 123. – Pp. 382–393

² Abe H., Kawamura H., Matsuo Y. Surface heat-flux fluctuations in a turbulent channel flow up to $Re_{\tau}=1020$ with $Pr=0.025$ and 0.71 // Int. J. Heat and Fluid Flow. – 2004. – Vol. 25. – Pp. 404–419

на задаче турбулентного течения в плоскопараллельном канале. С целью демонстрации преимуществ гипотез STR и GGDH, приводятся также результаты реконструкции турбулентных напряжений и потоков с использованием гипотезы Буссинеска, вводящей изотропную вихревую вязкость, и гипотезы SGDН.

Рисунок 6 показывает, в частности, что более резкое падение нормальных напряжений $\overline{v'v'}$ к горизонтальным стенкам полости и $\overline{w'w'}$ к вертикальным стенкам, обусловленное затуханием, прежде всего, ортогональных стенке пульсаций скорости, хорошо воспроизводится с использованием гипотезы STR, в то время как гипотеза Буссинеска не описывает данную особенность. Согласно DNS, вертикальная компонента потока $\overline{v'T'}$ принимает как положительные, так и отрицательные значения (рисунок 6). Положительные значения, обусловленные вкладом горизонтального градиента температуры, описываются только с использованием модели GGDH, благодаря учету анизотропии турбулентного теплопереноса, который отсутствует в SGDН, использующей скалярный коэффициент турбулентной теплопроводности. Реконструируемое с использованием гипотезы Буссинеска распределение P_k не содержит участков с отрицательными значениями в области ускорения потока, наряду с этим распределение, реконструируемое с применением гипотезы STR, воспроизводит данную особенность благодаря учету фактора пристеночной анизотропии (рисунок 6).

В параграфе 4.4 представлены результаты валидации гипотезы STR/GGDH на задаче турбулентной конвекции расплава в установке по выращиванию кристаллов кремния методом Чохральского: путем сопоставления нормальных и сдвиговых рейнольдсовых напряжений, компонент вектора турбулентного теплового потока, а также генерационных слагаемых кинетической энергии турбулентности, полученных в результате осреднения мгновенных распределений скорости, а также реконструируемых по гипотезам STR и Буссинеска.

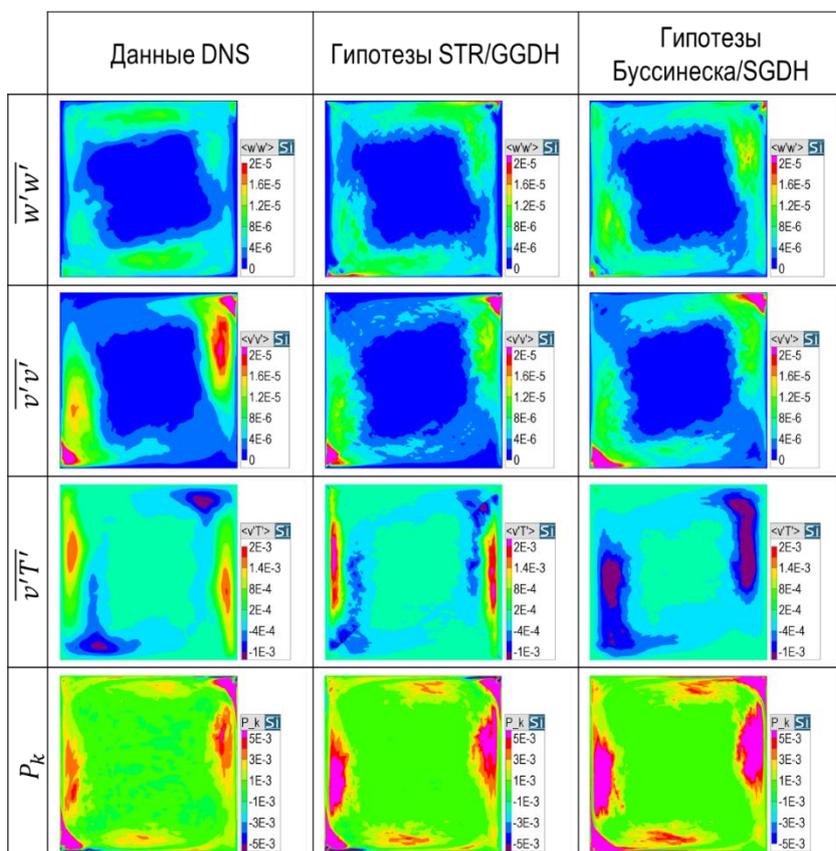


Рисунок 6 – Сравнение распределений нормальных рейнольдсовых напряжений ($\text{м}^2/\text{с}^2$), вертикальной компоненты вектора турбулентного теплового потока, а также сдвиговой генерации в вертикальном срединном сечении полости, полученных в результате осреднения по времени мгновенных распределений скорости, а также реконструируемых по гипотезам STR/GGDH и Буссинеска/SGDH для $Ra = 10^7$. Компоненты пульсационной скорости v' и w' соответствуют вертикальному и горизонтальному направлениям, соответственно.

Глава 5 посвящена построению и применению модели турбулентности STR k - ε для расчета конвекции расплава в тиглях установок выращивания кристаллов методом Чохральского. Модель STR k - ε подразумевает использование гипотезы STR/GGDH для замыкания уравнений Рейнольдса, которая в свою очередь предполагает использование двух скалярных масштабов турбулентности. Результаты сопоставительных RANS расчетов, проведенных для осесимметричной задачи, сформулированной на основе данных для ростовой установки EKZ-1300, показали, что k - ε модель Чена обеспечивает лучшее согласование с данными LES по структуре конвекции расплава по сравнению с k - ω SST моделью Ментера. Исходя из этого, в качестве двух скалярных масштабов турбулентности, для которых решаются уравнения переноса, были выбраны кинетическая энергия k и скорость диссипации ε . Существенное изменение вида генерационных членов в уравнениях переноса k и ε при переходе от гипотезы Буссинеска к гипотезе STR/GGDH предопределило отказ от прямого применения имеющихся в литературе формулировок k - ε моделей и разработку авторской формулировки.

В параграфе 5.1 приведена математическая формулировка STR k - ε модели турбулентности. В случае стационарного течения уравнения переноса k и ε имеют следующий вид:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \bar{u}_j k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + D_k^t + P_k + G_k + D_k^p - \rho \varepsilon, \quad (12)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \bar{u}_j \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + D_\varepsilon^t + \max \left(\frac{\varepsilon}{k}, \frac{1}{\tau_{Kh}} \right) (C_\varepsilon^P P_k + D_\varepsilon^p + C_\varepsilon^G G_k - C_\varepsilon^\varepsilon \rho \varepsilon). \quad (13)$$

Предполагается, что источники в уравнении переноса ε пропорциональны соответствующим источникам в уравнении переноса k . Здесь P_k – сдвиговая генерация, G_k – генерация за счет силы плавучести, D_k^p и D_ε^p представляют собой «диффузию давления» и аппроксимируются с использованием величин k , ε , P_k , G_k . Тензор рейнольдсовых напряжений и векторы турбулентного теплового и массового потоков, необходимые для расчета сдвиговой генерации и генерации за счет плавучести, аппроксимируются в рамках гипотез STR/GGDH (см. выражения (1, 9)).

В уравнении (13) C_ε^P , C_ε^G , $C_\varepsilon^\varepsilon$ представляют собой эмпирические константы модели.

Турбулентная диффузия k и ε определяется в соответствии с гипотезой GGDH:

$$D_k^t = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(-\tau_{rel} \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right), \quad D_\varepsilon^t = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(-\tau_{rel} \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right). \quad (14)$$

Граничные условия на твердой стенке задаются в виде: $k = 0$, $\varepsilon = 2\nu \left(\frac{\partial \sqrt{k}}{\partial n} \right)^2$, где ν – кинематическая вязкость, n – нормаль к поверхности. Граничное условие по k на свободной поверхности учитывает термо- и соллютокапиллярный поверхностные генерационные члены:

$$\mu \frac{\partial k}{\partial n} = P_{Ma}^T + P_{Ma}^{Co}, \quad (15)$$

где P_{Ma}^T – «термокапиллярная» генерация, P_{Ma}^{Co} – «соллютокапиллярная» генерация. Они определяются следующим образом:

$$P_{Ma}^T = -\frac{\partial \sigma}{\partial T} C_{Ma}^T \tau_{k-\varepsilon} k \left| \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial \tau^2} \right|, \quad P_{Ma}^{Co} = -\frac{\partial \sigma}{\partial C_O} C_{Ma}^{Co} \tau_{k-\varepsilon} k \left| \frac{\partial^2 \bar{C}_O}{\partial \tau^2} \right|, \quad (16)$$

C_{Ma}^T , C_{Ma}^{Co} представляют собой эмпирические константы модели.

Граничное условие для скорости диссипации ε на свободной поверхности записывается в виде:

$$\varepsilon = C_{\varepsilon}^{fs} \nu \left(\frac{\partial \sqrt{k}}{\partial n} \right)^2, \quad (17)$$

где C_{ε}^{fs} – эмпирическая константа.

Настройка констант модели осуществлялась методом проб и ошибок таким образом, чтобы обеспечить наиболее хорошее согласование структуры течения, получаемой в RANS расчетах, с данными ILES. Испытано около сотни наборов констант; в результате определен набор, представленный в Таблице 2.

Таблица 2 – Значения эмпирических констант STR k - ε модели

Константа	Значение	Константа	Значение
C_{ε}^P	1.45	C_{Ma}^T	0.5
C_{ε}^G	1.45	C_{Ma}^{Co}	2
$C_{\varepsilon}^{\varepsilon}$	1.9 в ядре, 1.2 у стенки	C_{ε}^{fs}	3

В параграфе 5.2 представлены результаты расчетов конвекции расплава в установке по выращиванию кристаллов диаметром 100 мм, частично иллюстрируемые на рисунке 9. Расчетный перепад температуры в расплаве, полученный с использованием модели STR, хорошо согласуется с данными ILES, в то время как модель Чена существенно занижает температуру на периферии расплава. В целом, структура течения расплава, предсказываемая моделью STR, лучше согласуется со структурой течения, полученной в ILES расчете.

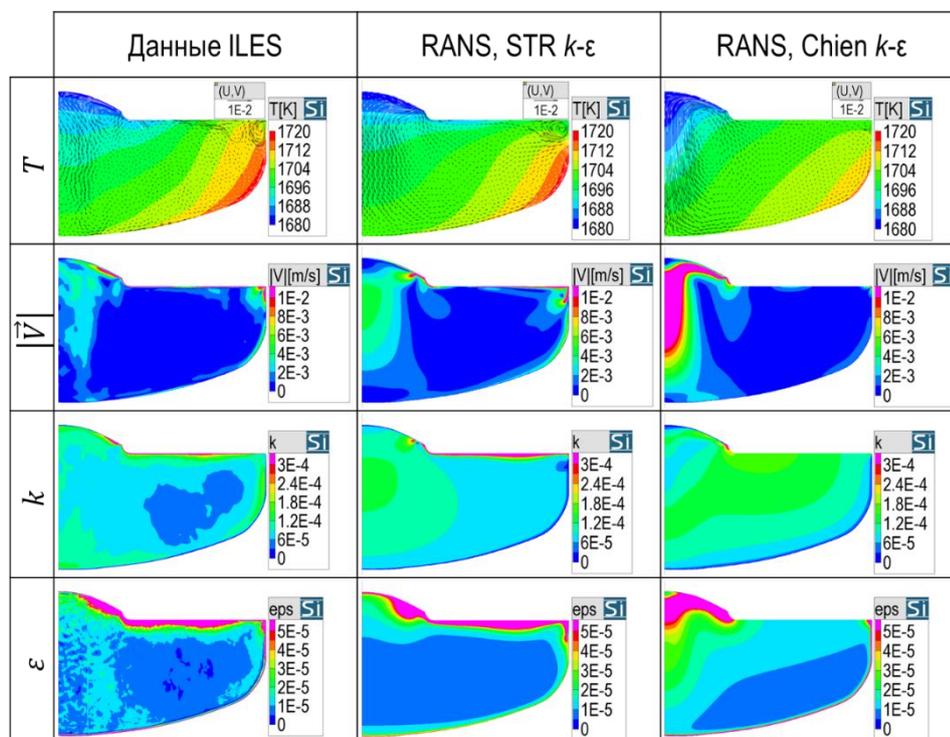


Рисунок 9 – Сравнение векторных полей скорости, полей температуры, модуля проекции скорости (м/с) на меридиональное сечение, кинетической энергии турбулентности (m^2/c^2) и скорости диссипации (m^2/c^3) в вертикальном сечении расплава, полученных в ILES и RANS расчетах.

Области с высокими значениями кинетической энергии турбулентности, обусловленные влиянием термо- и солито-капиллярного эффектов, уверенно предсказываются моделью STR (рисунок 9). В противоположность этому, модель Чена не предсказывает увеличения k при приближении к свободной поверхности. Отсутствие диссипации у этой поверхности, сопоставимыми со значениями в объеме расплава, что в расчетах по модели Чена слоя с растущими значениями k при приближении к свободной поверхности приводит к относительно низким значениям скорости не коррелирует с данными ILES, где скорость диссипации возрастает, как в окрестности твердой стенки, так и у свободной поверхности. Модель STR воспроизводит необходимые, достаточно высокие значения скорости диссипации в окрестности свободной поверхности.

Анизотропия нормальных напряжений отчетливо проявляется вблизи стенки тигля и у поверхности кристаллизации. В окрестности свободной поверхности затухает только ортогональная поверхности пульсация, в то время как продольные пульсации усиливаются под воздействием эффекта Марангони (рисунок 10). Модель STR воспроизводит анизотропное поведение рейнольдсовых напряжений, как в окрестности твердой стенки, так и свободной поверхности. Особенности в распределении сдвигового напряжения $\overline{u'v'}$ в областях перехода горизонтальной части стенки тигля в вертикальную, обусловленные фактором пристеночной анизотропии, также воспроизводятся моделью STR. В противоположность этому распределение $\overline{u'v'}$, полученное с использованием модели Чена, не согласуется с результатами ILES расчета.

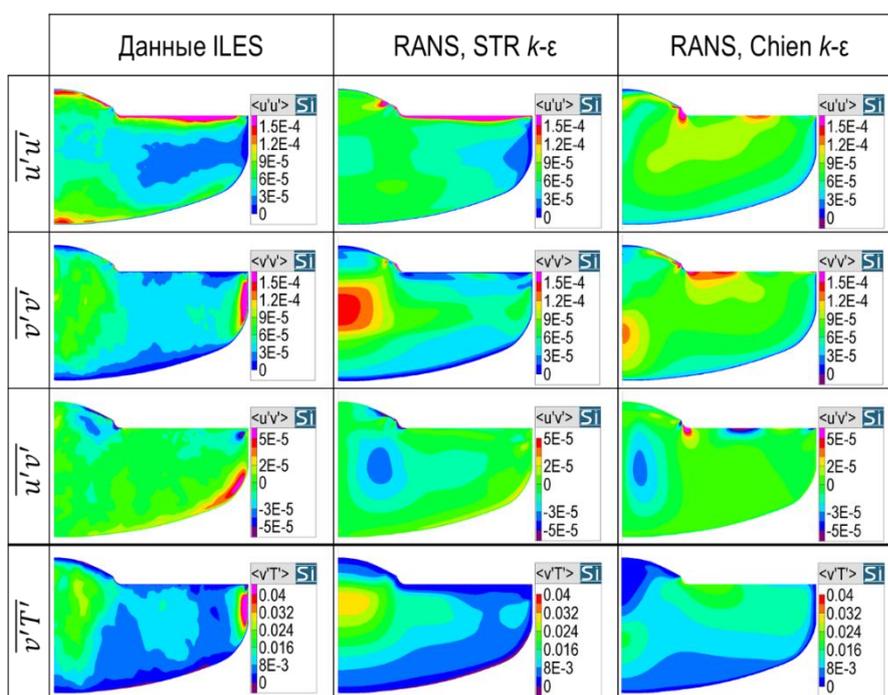


Рисунок 10 – Сравнение нормальных и сдвиговых рейнольдсовых напряжений ($\text{м}^2/\text{с}^2$), а также вертикальной компоненты вектора турбулентного теплового потока ($\text{К}\cdot\text{м}/\text{с}$) в вертикальном сечении расплава, полученных в ILES и RANS расчетах. Компоненты пульсационной скорости u' и v' соответствуют горизонтальному и вертикальному направлениям, соответственно.

Гипотеза GGDH, используемая в модели STR, позволяет воспроизвести правильное поведение вертикального потока.

Далее в параграфе 5.2 описываются результаты параметрических расчетов конвекции расплава при варьировании скорости прокачки аргона, а также скорости вращения тигля.

Показано, что модель STR k - ϵ успешно предсказывает регистрируемый в экспериментах восходящий тренд по концентрации кислорода с увеличением скорости прокачки аргона, в то время как модель Чена ошибочно предсказывает нисходящий тренд (рисунок 11). Приводится объяснение причин, обуславливающих предсказание различных трендов в расчетах по модели STR k - ϵ и по модели Чена.

Путем анализа полей кинетической энергии турбулентности и скорости ее генерации (рисунок 12) дается обоснование немонокотному характеру зависимости концентрации кислорода от угловой скорости вращения тигля, полученной в расчетах по модели STR k - ϵ и находящейся в соответствии с экспериментальными данными.

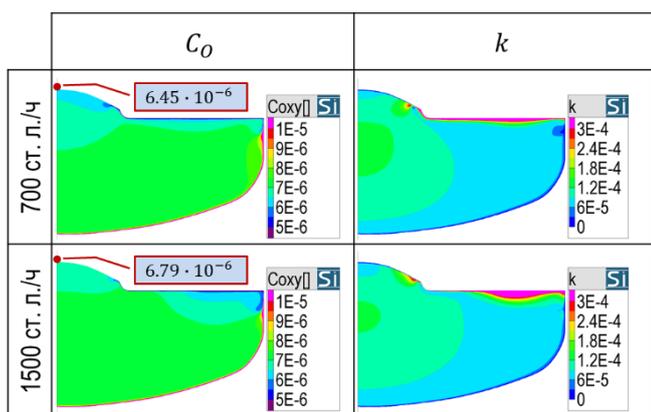


Рисунок 11 – Распределения массовой доли кислорода и кинетической энергии турбулентности (m^2/c^2) в расплаве модели, рассчитанные при разных расходах аргона с использованием STR k - ϵ модели.

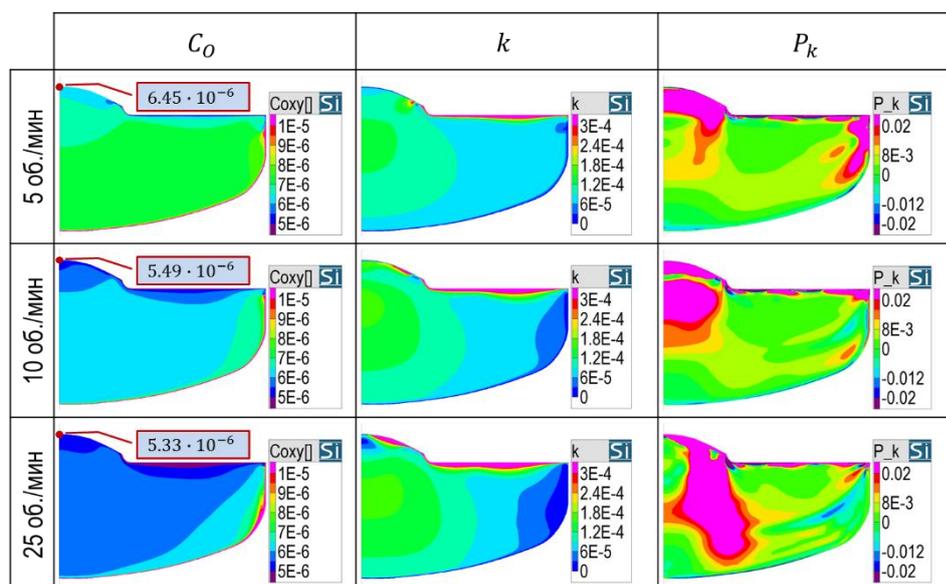


Рисунок 12 – Распределения массовой доли кислорода, кинетической энергии турбулентности (m^2/c^2) и сдвиговой генерации (kg/m^3) в расплаве рассчитанные при разных скоростях вращения тигля с использованием STR k - ϵ модели.

На рисунке 13 дается сравнение расчетных значений концентрации кислорода в кристалле с экспериментальными данными. Видно, что уровень концентрации, предсказываемый моделью STR, хорошо коррелирует с экспериментальным, в то время как модель Чена дает радикальную недооценку. Повышение рассчитанной по модели STR k - ϵ концентрации кислорода в кристалле с увеличением скорости прокачки аргона согласуется с экспериментальной зависимостью.

Нисходящий тренд концентрации кислорода, предсказываемый моделью STR $k-\varepsilon$ при скоростях вращения тигля в диапазоне от 2 до 15 об/мин, хорошо коррелирует с экспериментальными данными; модель Чена предсказывает тенденцию, противоположную экспериментальной.

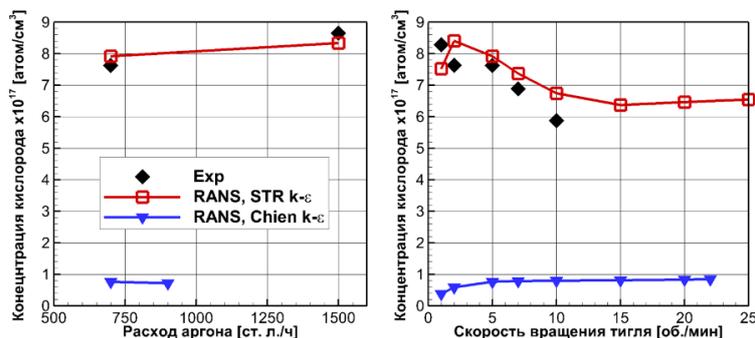


Рисунок 13 – Сравнение расчетных и экспериментальных тенденций по концентрации кислорода в кристалле в зависимости от расхода аргона и скорости вращения тигля.

В параграфе 5.3 приведены результаты расчетов конвекции расплава в установке по выращиванию кристаллов диаметром 200 мм в ростовой установке EKZ-3500. Приведены геометрия расчетной области, граничные условия, ростовые параметры. Как и для случая конвекции расплава в установках по выращиванию кристаллов диаметром 100 мм, модель Чена предсказывает более низкие температуры, по сравнению с моделью STR $k-\varepsilon$, а также менее интенсивное течение на периферии расплава (рисунок 14). Из-за нефизично завышенной турбулентной диффузии кислорода в окрестности свободной поверхности, действие которой хорошо прослеживается по толстому пограничному слою концентрации кислорода, модель Чена опять же предсказывает существенно более низкий уровень концентрации кислорода.

Предсказываемый уровень концентрации в расчетах по модели STR $k-\varepsilon$ близок к экспериментальному, с некоторой недооценкой (рисунок 15). Падение концентрации кислорода с увеличением длины цилиндрической части выращиваемого кристалла (что соответствует уменьшению высоты расплава) хорошо воспроизводится моделью STR $k-\varepsilon$, в противоположность этому модель Чена предсказывает немонотонный характер зависимости. Вид радиального профиля концентрации кислорода в кристалле качественно описывается обеими моделями (на рисунке 15 приведены данные, относящиеся к случаю большой высоты расплава).

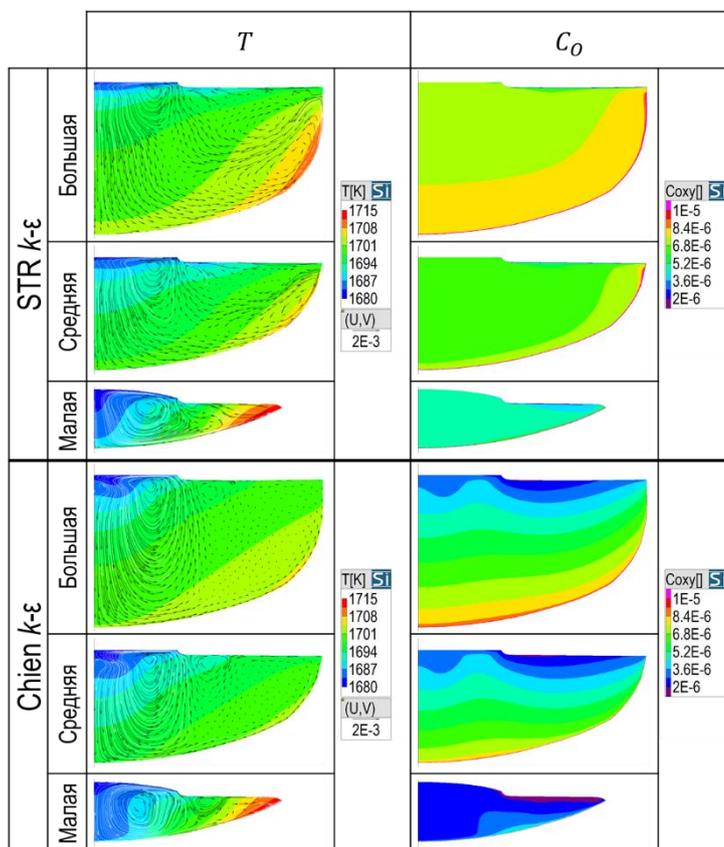


Рисунок 14 – Сравнение распределений температуры и массовой доли кислорода в расплаве, рассчитанных при разной высоте расплава с применением двух моделей турбулентности.

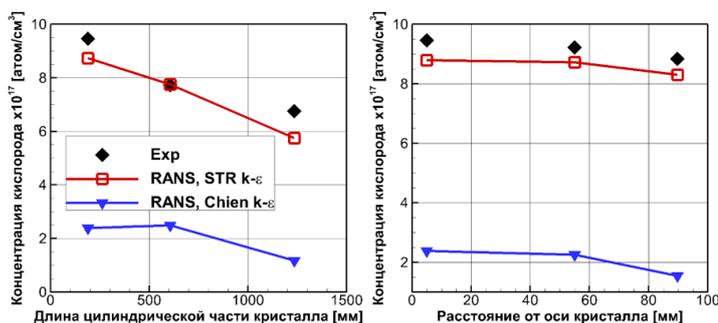


Рисунок 15 – Сравнение расчетных и экспериментальных значений концентрации кислорода в кристалле в зависимости от длины цилиндрической части кристалла и расстояния от его оси.

В Заключение сформулированы основные выводы:

1) Разработан метод реконструкции анизотропного тензора рейнольдсовых напряжений по локальным скалярным параметрам турбулентности, именуемый «гипотеза STR» (Stress Tensor Reconstruction). Данный метод включает в себя двухслойное описание пристеночной анизотропии тензора рейнольдсовых напряжений, где в формулах для расчета временного масштаба используются «колмогоровские» масштабы вблизи стенки и свободной поверхности и «турбулентные» масштабы при удалении от твердых или свободных поверхностей. Гипотеза STR учитывает также эффекты градиентов скорости в осредненном конвективном течении и силы плавучести; учет этих эффектов осуществляется в соответствии с источниковыми слагаемыми, присутствующими в уравнениях переноса рейнольдсовых напряжений. Учет анизотропии векторов турбулентного потока тепла и массы осуществляется путем использования гипотезы обобщенной градиентной диффузии (Generalized Gradient Diffusion Hypothesis, GGDH), что в совокупности образует гипотезу (модель) STR/GGDH.

2) С применением вихреразрешающих методов получены новые данные по статистическим характеристикам турбулентной конвекции жидкостей с низким числом Прандтля. Эти данные, сгенерированные при DNS-расчетах свободной конвекции в кубической

полости и ILES-расчетах конвекции расплава кремния в модели установки метода Чохральского, выступили в качестве тестовых при валидации разработанного метода учета анизотропии турбулентности; они имеют и самостоятельное значение.

3) Проведена настройка эмпирических констант, входящих в модель STR/GGDH с использованием литературных данных, полученных в результате DNS-расчетов развитого турбулентного течения и теплообмена в плоскопараллельном канале. Пригодность разработанной модели STR/GGDH подтверждена путем ее валидации на авторских данных, сгенерированных в результате DNS-расчетов свободной конвекции в кубической полости стенками и ILES-расчетов конвекции расплава кремния.

4) Разработана специализированная двухпараметрическая дифференциальная модель турбулентности STR k - ϵ , которая использует соотношения гипотезы STR/GGDH. Валидация STR k - ϵ модели проведена с использованием данных ILES-расчета турбулентной конвекции расплава кремния в тигле установки метода Чохральского, а также экспериментальных данных по температуре расплава и концентрации кислорода в кристалле, приведенных в литературе для кристаллов диаметром 100 и 200 мм.

5) Показано, что модель STR k - ϵ предсказывает ожидаемую анизотропию рейнольдсовых напряжений и турбулентных потоков тепла как вблизи стенки, так и вблизи свободной поверхности. Применительно к задаче моделирования конвекции расплава, ключевое преимущество модели STR k - ϵ над моделями с изотропной вихревой вязкостью состоит в возможности предсказания областей с отрицательной сдвиговой генерацией кинетической энергии турбулентности.

6) Показано, что учет в модели STR k - ϵ анизотропии турбулентного массопереноса критической примеси (кислорода) обеспечивает расчетные значения концентрации кислорода в выращиваемом кристалле, близкие к экспериментальным данным. Дан анализ физических причин, обуславливающих наблюдаемые в опытах тенденции по изменению концентрации кислорода в кристалле в зависимости от скорости вращения тигля и расхода аргона, уносящего примеси. Показано, что эти тенденции воспроизводятся в расчетах с использованием разработанной модели STR k - ϵ .

Публикации по теме диссертации

1. Borisov D.V., Kalaev V.V. ILES of melt turbulent convection with conjugated heat transfer in the crucible and gas flow for Czochralski silicon crystal growth system // J. Cryst. Growth. – 2021. – Vol. 573 – 126305.

2. Kalaev V., Borisov D., Smirnov A. A modified hypothesis of Reynolds stress tensor modeling for mixed turbulent convection in crystal growth // J. Cryst. Growth. – 2022. – Vol. 580. – 126464.

3. Borisov D., Artemyev V., Kalaev V., Smirnov A., Kuliev A., Kunert R., Dold P., Zobel F., Turan R., Aydin O., Kabacelik I. Advanced approach for oxygen transport simulation in Czochralski silicon crystal growth // J. Crystal Growth. – 2022. – Vol. 583. – 126493.

4. Борисов Д.В., Калаев В.В. Сравнительная оценка RANS-моделей турбулентности с изотропной вязкостью для расчета конвекции расплава кремния в установках выращивания кристаллов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 3. С. 28–42.

5. Kalaev V., Borisov D. Extended Hypothesis for Reynolds Stress Tensor and Turbulent Heat Flux Modeling Within a Novel k - ϵ Model for Prediction of Crystal Growth from the Melt // Cryst. Res. Technol. – 2024. – Vol. 59. – 2300163.