

**РАЗВИТИЕ НАУЧНЫХ ОСНОВ ТЕХНОЛОГИИ ВЫРАЩИВАНИЯ  
СОВЕРШЕННЫХ МНОГОФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МОНОКРИСТАЛЛОВ.  
ПРОЕКТ № 155**

**Координаторы:** д-р физ.-мат. наук Бердников В. С., д-р техн. наук Каплун А. Б.  
**Исполнители:** ИТ, ИГХ, ИНХ, ИМП ОИГГМ, ИЛФ СО РАН

Экспериментально и численно исследованы гидродинамика и конвективный теплообмен в системах, подобных используемым для вытягивания из расплавов монокристаллов александрита, алюминатов и силикатов бериллия, парателлурита и германозвлитина, и монокристаллов ВВО из растворов в расплаве методами Чохральского и Киропулоса. Проведен поиск способов управления гидродинамикой расплавов для равномерного подвода вещества к фронту кристаллизации в раствор-расплавной технологии. Расчеты и эксперименты проведены при числах Прандтля  $0,013 \leq \text{Pr} \leq 3000$ . Исследована конвекция термогравитационная, термокапиллярная и совместная гравитационно-капиллярная, изотермическая вынужденная и смешанная (при наложении вращения кристалла или кристалла и тигля на свободную конвекцию). Изучены эволюция пространственной формы течения, полей скорости и температуры, закономерности локального и интегрального теплообмена при каждом типе конвекции с ростом чисел Грасгофа, Марангони и Рейнольдса. Расчеты проведены в диапазонах чисел Грасгофа  $0 \leq \text{Gr} \leq 4 \times 10^8$ , Марангони  $0 \leq \text{Ma} \leq 10^5$ , Рейнольдса — по кристаллу  $0 \leq \text{Re}_k \leq 6,5 \times 10^4$ , по тиглю  $0 \leq \text{Re}_t \leq 10^3$ . Экспериментально определены области существования качественно различных пространственных форм течения в ламинарных и турбулентных режимах свободной и смешанной конвекции. Изучено влияние гидродинамики на форму фронта кристаллизации. Видеофильмы течений используются как учебное пособие для разработчиков новых технологий. Для ламинарных режимов течений газов в системе кристалл—окружающая среда—стенки камеры численно получены поля температуры

и тепловые потоки для монокристаллов различной теплопроводности. Исследованы радиационно-кондуктивный теплоотвод от фронта кристаллизации через кристаллы и радиационно-конвективная теплоотдача в окружающую среду от кристаллов при соотношениях теплопроводностей кристалла и газа  $\lambda_k/\lambda_r = 1; 10; 100; 500$ , при различных геометриях кристалла. Изучены режимы свободной и смешанной (при продувке газа через ростовую камеру) конвекции. Исследовано влияние теплопроводности штоков, удерживающих заправки различной теплопроводности, на поля температуры в кристаллах. Получена принципиально новая информация о процессах продвижения фронта кристаллизации в методе Бриджмена—Стокбаргера.

Вибрационными методами изучены физико-химические характеристики и процессы кристаллизации—плавления в боратных системах  $\text{BaO—Na}_2\text{O—B}_2\text{O}_3$  и  $\text{K}_2\text{O—Nb}_2\text{O}_5\text{—B}_2\text{O}_3$ , в которых образуются нелинейно-оптические соединения. По точности и информативности полученные данные превосходят мировой уровень. Развита феноменологическая модель поиска, классификации и предсказания свойств ацентричных неорганических материалов. На основе статистических исследований кинетики нуклеации развита эмпирическая модель априорного дизайна технологии роста кристаллов из водных растворов.

Выращены новые оксидные кристаллы и улучшены свойства оксидных и фторидных кристаллов. Исследованы характерные проблемы выращивания крупных высококачественных монокристаллов метабората бария (ВВО) и трибората лития (ЛВО). Установлена связь состава и условий приготовления раство-

ров-расплавов с особенностями структуры выращиваемых кристаллов. Выявлены причины формирования наиболее типичных структурных дефектов. Проведено компьютерное моделирование ассоциативного комплексобразования в квазибинарных расплавных средах. Исследованы системы:  $\text{SrO—BeO—Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{CaO—BeO—Al}_2\text{O}_3$  и  $\text{MgO—BeO—Al}_2\text{O}_3$ , в которых можно вырастить монокристаллы хризоберилла при более низкой температуре кристаллизации, чем из расплава, и избежать вхождения металлических включений в структуру кристалла. Наиболее перспективна система  $\text{CaO—BeO—Al}_2\text{O}_3$ . Экспериментально установлена область кристаллизации  $\text{BeAl}_2\text{O}_4$ , и получено сечение диаграммы  $\text{BeO—Al}_2\text{O}_3\text{—CaO—Al}_2\text{O}_3$ . Выращены монокристаллические образцы хризоберилла с добавками ионов переходных металлов (Cr, Ti, Fe). Удалось понизить температуру кристаллизации до 1700 °C с улучшением структуры получаемых кристаллов. Увеличены количество легирующих доба-

вок и доля их вхождения без ухудшения качества монокристалла. Увеличена лучевая стойкость образцов до 400 МВт/см<sup>2</sup>. Проведен поиск новых лазерных монокристаллов в системе  $\text{La}_2\text{O}_3\text{—BeO—Al}_2\text{O}_3$ . Впервые выращены объемные монокристаллы гексаалюмината бериллия—лантана —  $\text{BeLaAl}_{11}\text{O}_{19}$ , активированные ионами переходных (Cr, Ni, V и др.) и редкоземельных (Nd, Yb, Tm и др.) металлов, обладающие высокими теплофизическими параметрами и широкими электронно-колебательными полосами усиления. Определены физические, спектроскопические и лазерные свойства новой кристаллической матрицы  $\text{BeLaAl}_{11}\text{O}_{19}$ , активированной ионами Ti, Cr и Nd. Показано, что кристалл перспективен для создания активных сред, в которых в качестве лазерно-активных ионов использованы ионы металлов из группы лантана — Nd, Yb, Ho и др., для высокоэффективных лазерных систем, в том числе с накачкой излучением полупроводниковых лазеров.

### Основные публикации

1. Radzhabov E., Kurobori T. Cubic and tetragonal  $\text{Ce}^{3+}$  ions in strontium fluoride// J. Phys.: Cond. Matter. 2004. V. 16. P. 1871—1877.
2. Solntsev V. P., Tsvetkov E. G., Alimpiev A. I., Mashkovtsev R. I. Valent state and coordination of cobalt ions in beryl and chrysoberyl crystals// Phis. Chem. Minerals. 2004. V. 31. P. 1—11.
3. Zubrinov I. I., Sapozhnikov V. K., Pylneva N. A., Atuchin V. V. Elastic and elasto optic properties of  $\text{LiB}_3\text{O}_5$ // Ceramics International. 2004. V. 30 (7). P. 1675—1677.
4. Мешалкин А. Б., Каплун А. Б. Фазовые равновесия в системе  $\text{BaO—B}_2\text{O}_3$  в области составов 31—67 %  $\text{B}_2\text{O}_3$ // Журн. неорган. химии. 2005. Т. 50, № 11. С. 1861—1867.
5. Atuchin V. V., Kidyarov B. I., Pervukhina N. V. Shortest chemical bond length as a criteria for searching new non-centrosymmetric niobate and tantalate crystals with high optical non-linearity// J. Cryst. Growth. 2005. V. 275. P. e1941—e1946.
6. Кидяров Б. И., Николаев И. В., Кожаро А. П. Исследование кристаллизации расплава теллура методом радиационного и термического анализа// Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2005. Т. 2, № 2. С. 70—73.
7. Печерская С. Г., Михайлов М. А., Богданова Л. А., Пройдаков А. Г. Применение механической активации для твердофазного синтеза бериллиевого индиалита// Химия в интересах устойчивого развития. 2005. Т. 13. С. 313—316.
8. Radzhabov E., Kirm M. Triplet luminescence of cadmium centres in alkaline-earth fluoride crystals// J. Phys.: Condens. Matter. 2005. V. 17. P. 5821—5830.