#### УДК 004.422.8:539.2

# АВТОМАТИЗАЦИЯ ИССЛЕДОВАНИЯ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОГО СКОЛЬЖЕНИЯ В ГЦК МЕТАЛЛАХ

А.Е. Петелин, С.Н. Колупаева

Томский государственный архитектурно-строительный университет E-mail: pae@sibmail.com

Представлена архитектура, возможности и особенности реализации комплекса программ Dislocation Dynamics of Crystallographic Slip, предназначенного для автоматизации исследования дислокационной динамики кристаллографического скольжения в ГЦК металлах. Комплекс программ позволяет проводить расчеты энергетических, масштабных и временных характеристик элементарного кристаллографического скольжения и зоны сдвига в целом.

#### Ключевые слова:

Математическое моделирование, комплекс программ, пластическая деформация, дислокация, зона кристаллографического сдвига, элементарное скольжение.

#### Key words:

Mathematical modeling, software, plastic deformation, dislocation, crystallographic slip zone.

Кристаллографическое скольжение является одним из определяющих механизмов пластического формоизменения кристаллических тел. Фундаментальным механизмом, лежащим в основе пластичности скольжения, и естественным минимальным объектом его описания является элементарное скольжение, границу которого можно представить как замкнутую дислокацию. Элементарное скольжение — весьма сложный объект для исследования. В процессе распространения элементарного скольжения ограничивающая его расширяющаяся замкнутая дислокация пересекает десятки тысяч дислокаций других систем скольжения [1]. В силу ряда причин [2, 3] эта дислокационная петля, как правило, не является единственной, образуется серия дислокаций, формирующих зону кристаллографического сдвига.

Основные результаты по теоретическому исследованию элементарного скольжения и зоны кристаллографического сдвига получены с использованием имитационного моделирования движения прямолинейной или замкнутой дислокации в поле дискретных препятствий [1, 4–14]. Как показано в работах М.И. Слободского и Л.Е. Попова [1, 13, 14], имитационные модели, учитывающие дискретность препятствий движению дислокаций при формировании элементарного скольжения, наиболее эффективны при рассмотрении движения дислокационного сегмента-источника до достижения им критической конфигурации. При описании дальнейшего развития зоны кристаллографического сдвига дискретность препятствий не имеет определяющего значения, поэтому представляется приемлемой замена суммарного сопротивления со стороны препятствий движению дислокаций некоторой однородной средой, имеющей то же сопротивление. Таким образом, при описании формирования элементарного скольжения и зоны кристаллографического сдвига суммарное сопротивление дискретных препятствий можно заменить распределенными силами трения, которые обеспечивают такое же сопротивление движению дислокации [15–20].

Заметим, что число дислокационных петель в зоне кристаллографического сдвига может достигать десятков, сотен или тысяч. Для получения энергетических, масштабных и временных характеристик процесса формирования зоны кристаллографического сдвига даже при одном наборе значений параметров материала и условий деформирования требуется провести большой объем расчетов и обработать данные сложной структуры. При проведении параметрического анализа закономерностей формирования элементарных скольжений и зоны кристаллографического сдвига объем расчетов возрастает многократно. Возникает проблема высокой трудоемкости расчетов, хранения и обработки больших объемов данных, и, как следствие, возникает потребность в автоматизации исследований. Кроме того, проведение исследований практически недоступно пользователю, не имеющему навыков программирования и опыта численного решения дифференциальных уравнений.

Для автоматизации исследования динамики кристаллографического скольжения в ГЦК металлах разрабатывается комплекс программ Dislocation Dynamics of Crystallographic Slip (DDCS), в основе которого лежит показавшая свою эффективность математическая модель дислокационной динамики формирования зоны кристаллографического сдвига в ГЦК металлах [19, 20]. Модель сформулирована исходя из закона сохранения энергии, записанного для замкнутой дислокационной петли, и позволяет исследовать дислокационную динамику формирования зоны кристаллографического сдвига.

В настоящей статье представлены назначение, архитектура и особенности реализации комплекса программ DDCS.

#### Математическая модель

В математической модели [19, 20], реализованной в комплексе программ DDCS, учтены силы Пича-Кёлера, обусловленные приложенным воздействием, и силы сопротивления движению дислокаций, обусловленные решеточным, примесным и дислокационным трением, линейным натяжением, генерацией точечных дефектов, обратными полями напряжений со стороны скопления ранее созданных дислокаций и вязким торможением. При записи уравнения модели использованы следующие предположения [17–20]:

- Зона кристаллографического сдвига формируется в однородной изотропной среде, оказывающей такое же сопротивление движущейся дислокации, что и исходное поле дискретных препятствий дислокационной и иной природы.
- 2. Линейное натяжение считается одинаковым по всей длине петли.
- Напряжение, связанное с генерацией точечных дефектов на винтовых составляющих дислокационной петли, равномерно распределено по всей длине петли.

Уравнения динамики дислокационной петли получены из закона сохранения энергии, записанного для замкнутой дислокационной петли [17–20]:

$$\begin{cases} \frac{d\varepsilon_{k}^{(i)}}{dt} = \begin{pmatrix} \tau b - \tau_{R}b - \frac{\varepsilon_{0} + \varepsilon_{k}^{(i)}}{r} - PGb^{2}\rho r - \\ -\frac{YGb^{2}(i-1)}{D/2 - r} - Bc\sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon_{k}^{(i)}}{\varepsilon_{0}} + 1\right)^{-2}} \end{pmatrix} \times \\ \times c\sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon_{k}^{(i)}}{\varepsilon_{0}} + 1\right)^{-2}}, \\ \frac{dr}{dt} = c\sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon_{k}^{(i)}}{\varepsilon_{0}} + 1\right)^{-2}}. \end{cases}$$
(\*)

Здесь r и t – текущий радиус и время движения расширяющейся дислокации; - кинетическая энергия единицы длины *i*-ой расширяющейся дислокационной петли; т – приложенное напряжение;  $\tau_{R} = \tau_{f} + \tau_{d} (\tau_{f} - \text{напряжение решеточного и при$ месного трения,  $\tau_d$  – дислокационное сопротивление движению дислокации);  $\varepsilon_0$  – энергия единицы длины покоящейся дислокации; *G* – модуль сдвига; *b* – модуль вектора Бюргерса; *B* – коэффициент вязкого торможения движущейся дислокации;  $D = B_r \tau / (Gb\rho)$  — средний диаметр зоны сдвига ( $B_r$  некоторый вычисляемый параметр [21, 22],  $\rho$  – плотность дислокаций); с – поперечная скорость звука в металле;  $P=(p_i p_s \xi)/8$  – комбинация физически определяемых параметров ( $p_i$  – доля порогообразующих дислокаций некомпланарных систем, *p*, - доля порогов на околовинтовых сегментах дислокационной петли,  $\xi$  – множитель Смоллмена);  $Y = (2 - v)/(2\pi(1 - v))$  (v – коэффициент Пуассона).

Величина приложенного напряжения  $\tau$ , при котором формируется зона сдвига, определяется напряжением прохождения дислокационным сегментом-источником критической конфигурации. Дальнейшее его развитие в замкнутую конфигурацию и расширение замкнутой дислокационной петли происходят под действием напряжения, равного напряжению потери устойчивости дислокационным сегментом-источником. Критическая конфигурация дислокационного источника в форме полуокружности при расчетах заменяется окружностью того же радиуса.

Заметим, что переменные системы дифференциальных уравнений (\*) изменяются на интервале интегрирования на порядки величины, а слагаемые, характеризующие вклад различных механизмов, являются разнопорядковыми. В этом случае для выполнения расчетов требуется реализовать численный метод, пригодный для решения жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ).

### Структура комплекса программ DDCS

В соответствии с принципами гибкой методологии разработки программного обеспечения и на основе анализа особенностей математической модели динамики кристаллографического скольжения в ГЦК металлах было определено множество функций, которые должны быть реализованы в комплексе программ DDCS:

- формирование на основе обобщенной математической модели редуцированных математических моделей, учитывающих различные физические механизмы;
- предоставление удобного и понятного пользовательского интерфейса;
- применение численного метода, пригодного для решения жесткой системы ОДУ;
- графическое представление результатов вычислений;
- хранение результатов численных экспериментов и значений параметров математической модели, используемых в расчете;
- б) хранение значений характеристик, полученных различными авторами в теоретических или экспериментальных исследованиях ГЦК материалов;
- хранение информации библиографического характера;
- 8) экспорт данных;
- сохранение личных настроек интерфейса пользователя;
- расширение (по мере необходимости) базы данных и функциональных возможностей комплекса программ;
- идентификация пользователя при входе в систему.

Возможностью выполнения перечисленных выше функций, а также требованиями к гибкости и пополняемости программных модулей для автоматизации исследования динамики кристаллографического скольжения в ГЦК металлах был обоснован выбор структуры комплекса программ DDCS (рис. 1), которая представляет собой пополняемую (изменяемую) систему динамически подключаемых программных модулей. Все модули подразделяются на функциональные модули, системные модули, модули доступа к базе данных и модули пользовательского интерфейса.



Рис. 1. Структура комплекса программ DDCS. ПК – программный комплекс

Модули пользовательского интерфейса разрабатывались в соответствии с основными правилами и принципами проектирования пользовательского интерфейса, позволяющими организовать комфортную работу пользователя с программным продуктом. Модули интерфейса реализуют проверку корректности введенных данных, функции обработки компонент соответствующих окон комплекса программ, а также осуществляют взаимодействие с функциональными модулями.

Функциональные модули представляют собой независимые подсистемы, автоматически обрабатывающие информацию по заданному алгоритму и представляющие ее в заданном виде на основе запроса модуля пользовательского интерфейса или иного функционального модуля. В их состав входят модули формирования математической модели, вычислительный модуль и модуль экспорта данных. Имеется возможность разрабатывать и внедрять новые функциональные модули без нарушения внешнего интерфейса комплекса программ DDCS и структуры базы данных (БД).

В БД комплекса программ DDCS сохраняются результаты вычислений, значения параметров математической модели, используемые в расчетах, а также осуществляется накопление полученных экспериментальным либо теоретическим путем различными авторами значений характеристик исследуемых материалов. Структура БД, схема представления результатов вычислительных экспериментов и возможности работы с БД описаны в статье [23].

Модули доступа к БД реализуют механизмы доступа к ней. Назначение данных модулей заключается в обеспечении независимости других модулей комплекса программ DDCS от структуры БД.

Системные модули хранят информационные структуры (стеки, вектора, матрицы и др.), используемые при работе, реализуют функции обработки системных сообщений (сообщения об ошибке и пр.), поддерживают работу интерфейса программного комплекса, осуществляют авторизацию пользователя (проверка на правильность ввода имени пользователя и пароля), поддерживают организацию выбора исследуемой модели.

#### Программная реализация комплекса программ DDCS

Интерфейс комплекса программ DDCS (рис. 2–4) создан в соответствии с правилами построения правильного пользовательского интерфейса [24], что позволяет наиболее комфортно и эффективно выполнять вычислительные эксперименты. Интерфейс является интуитивно понятным, а для работы с программным комплексом не требуется навыков программирования и специальной подготовки в области решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений, что позволяет использовать комплекс программ DDCS специалистам в области физики и механики прочности и пластичности, аспирантам и студентам.

🖏 Dislocation Dynamic of Crystallographic Slip					
<u>Ф</u> айл <u>М</u> одель <u>А</u> нализ	<u>С</u> ервис <u>С</u> пр	равка			
только расширение дислокаций 💽 однофазный 🔄 Си 🗨 🐼 💹 🕖					
	Номер	Время	Средняя кин. з	Радиус 🔺	
	1	1,61925703834	7,19930043105	0,0002613026	
	10	1,62100450323	9,46692977757	0,0002613026	
	20	1,61959135285	7,40872973325	0,0002613026	
	30	1,61638292159	5,66353841328	0,0002613026	
	40 <	1 01000050000	7 20577572507	0 0002012020	

Рис. 2. Главное окно комплекса программ DDCS

Экспорт данных	×
<ul> <li>Дислокация.Время</li> <li>Дислокация.Радиус</li> <li>Дислокация.Кинетическая_энергия</li> <li>Дислокация.Скорость</li> <li>Зона_сдвига.Время</li> <li>Зона_сдвига.Радиус</li> <li>Зона_сдвига.Кинетическая_энергия</li> </ul>	Зкспорт     Выбрать все     Помощь     Просмотр
<ul> <li>Зона_сдвига.Скорость</li> <li>Серия_зон_сдвига.Время</li> <li>Серия_зон_сдвига.Радиус</li> <li>Серия_зон_сдвига.Кинетическая_энергия</li> <li>Серия_зон_сдвига.Скорость</li> </ul>	Дополнительная часть имени файла:
Каталог экспорта Data//	Закрыть

Рис. 3. Экспорт данных

При проектировании вычислительного модуля основное внимание уделялось универсальности —



Рис. 4. Графическое представление данных

возможности использования модуля для решения систем ОДУ произвольной размерности и задания произвольного числа параметров модели, описываемой системой ОДУ.

Вычислительный метод, предназначенный для решения системы ОДУ, реализован в классе GIR, в котором содержится ссылка на абстрактный базовый класс cProbeFunction. При формировании пользователем модели для расчета создается экземпляр соответствующего класса (cDislocProblem, cVanDerPolProblem), функции которого делегируются классу GIR. Таким образом, класс GIR, реализующий численный метод решения системы ОДУ, не зависит от класса, реализующего правые части системы, а зависит лишь от абстрактного базового класса cProbeFunction, который остается неизменным. Такая организация взаимодействия позволяет ввести в рассмотрение новую модель, не затрагивая реализацию численного метода. Для этого достаточно создать класс, описывающий правые части соответствующей системы ОДУ и наследующий общий для таких классов интерфейс.

Для описания правых частей рассматриваемой системы обыкновенных дифференциальных уравнений исследуемой математической модели (\*) предназначен класс cDislocProblem. Класс cVan-DerPolProblem описывает систему ОДУ, которая в литературе именуется как «задача Ван-дер-Поля», и используется в программном комплексе для апробации численного метода. Оба класса наследуются от одного и того же абстрактного базового класса сProbeFunction, реализующего общий интерфейс классов, который включает:

- вычисление правых частей системы уравнений модели (Probe);
- вычисление якобиана системы для реализации численного метода (Jacobian);

- сохранение значений переменных (Insert);
- проверка на выполнимость ограничений для переменных, а также проверка условия окончания расчета (Constraints).

Алгоритм решения жестких систем ОДУ, реализованный в вычислительном модуле, позволяет на каждом шаге интегрирования оптимизировать порядок метода и величину шага.

Функция Constraints предоставляет возможность проводить вычисления не только на заданном интервале интегрирования, но и на интервале с заданной областью допустимых значений для вычисляемых переменных.

Функции Prognoz и Corrector выполняют соответственно прогноз и коррекцию.

Сохранение результатов вычислений обрабатывается функцией Insert, которая в зависимости от настроек пользователя либо выгружает данные в оперативную память, либо сохраняет их в БД.

С использованием комплекса программ DDCS пользователь имеет возможность проводить вычислительные эксперименты, позволяющие получить характеристики процесса формирования как отдельной дислокации, так и зоны кристаллографического сдвига в целом. Характеристиками формирования отдельной дислокационной петли являются: время движения, текущий радиус дислокации, скорость дислокации и кинетическая энергия единицы длины дислокационной петли. Результаты расчетов формирования дислокационной петли представлены в виде таблицы в базе данных. Зона сдвига содержит совокупность дислокаций, испущенных общим источником, то есть результаты вычислительного эксперимента представляют собой совокупность таблиц для всех дислокаций зоны сдвига. Кроме того, для зоны сдвига создается дополнительная таблица, в которую записываются: порядковый номер дислокации в зоне сдвига, время ее формирования, средняя скорость дислокации и средняя кинетическая энергия единицы длины дислокационной петли.

В комплексе программ DDCS пользователю предоставлена возможность проводить вычислительный эксперимент формирования как отдельной зоны сдвига, так и серии зон сдвига. При формировании серии зон сдвига варьируется с заданным шагом один из параметров (температура, плотность дислокаций или значение приложенного напряжения). Температура явно в модели не учитывается, однако от нее зависят значения трех параметров: модуля сдвига, коэффициента вязкого трения и плотности материала. При выборе значения температуры из имеющегося набора значений величина этих параметров устанавливается автоматически.

Экспорт данных (рис. 3) осуществляется в текстовые файлы. Выгруженные данные можно использовать в других прикладных программах или импортировать в программный комплекс DDCS, установленный на другом компьютере. Экспорт данных усложнен тем, что при вычислительном эксперименте выстраивается сложная иерархия данных [23], состоящая из: элементарного скольжения (дислокационной петли), зоны кристаллографического сдвига, серии зон сдвига, отличающихся значением одного из параметров модели.

Структура папок и файлов данных, создаваемая при экспорте, описана в [23].

В комплексе программ DDCS имеется возможность графического представления результатов эксперимента. Пользователю доступен графический вывод следующих характеристик: текущее время формирования зоны сдвига, кинетическая энергия дислокации, радиус и скорость дислокации. Любая из характеристик может быть отображена на одной из двух осей. График может быть

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Слободской М.И., Попов Л.Е. Исследование явления скольжения в кристаллах методами имитационного моделирования. – Томск: Изд-во Том. гос. архит.-строит. ун-та, 2004. – 450 с.
- Попов Л.Е., Пудан Л.Я., Колупаева С.Н., Кобытев В.С., Старенченко В.А. Математическое моделирование пластической деформации. – Томск: Изд-во Том. ун-та, 1990. – 185 с.
- Ковалевская Т.А., Колупаева С.Н., Коротаева Н.В., Попов Л.Е. Высота ступеньки сдвига в металлах с г.ц.к. решеткой // Физика металлов и материаловедение. – 1991. – № 5. – С. 203–206.
- Foreman A.J.E., Makin M.J. Dislocation movement through random arrays of obstacles // Canad. J. Phys. – 1967. – V. 45. – № 2. – P. 511–517.
- Чернов В.М., Инденбом В.Л. Преодоление упругого поля точечных дефектов при скольжении дислокаций // Физика твердого тела. – 1968. – Т. 10. – Вып. 11. – С. 3331–3341.
- Стратан И.В., Предводителев А.А. Моделирование процесса движения дислокаций в трехмерном дислокационном ансамбле // Физика твердого тела. – 1970. – Т. 12. – № 7. – С. 2141–2143.

подвергнут масштабированию, то есть детальному рассмотрению конкретной выбранной области.

Программная реализация вычислительного модуля выполнена на языке программирования C++ с использованием системы программирования Microsoft Visual C++ 2008 Express Edition. Для расчетов и хранения промежуточных данных используется встроенная библиотека классов программного комплекса DDCS, а также стандартная библиотека шаблонов STL.

#### Заключение

Разработанный комплекс программ DDCS обладает следующими возможностями:

- Проведение расчетов энергетических, масштабных и временных характеристик дислокационных петель, формирующих зону кристаллографического сдвига.
- 2. Проведение вычислительных экспериментов формирования серии зон сдвига.
- 3. Ведение базы данных результатов численных экспериментов и использованных в расчетах значений параметров математической модели.
- Ведение базы данных значений характеристик исследуемых материалов, полученных теоретическими и экспериментальными методами в работах различных авторов.
- 5. Представление результатов расчетов в табличном и графическом виде.
- 6. Экспорт результатов расчетов в текстовые файлы для дальнейшей обработки.
- 7. Подключение новых модулей.

Комплекс программ DDCS может быть использован для исследования дислокационной динамики кристаллографического скольжения в ГЦК металлах пользователем, не имеющим специальной подготовки в области решения ОДУ и навыков программирования.

- Argon A.S. Thermally-activated motion of dislocation // Phil. Mag. – 1972. – V. 25. – № 5. – P. 1053–1072.
- Landau A.I. Thermally activated motion of dislocation through a random array of point obstacles // Phys. Status Solidi (a). – 1975. – V. 30. – № 2. – P. 659–669.
- Кирсанов В.В., Пятилетов Ю.С., Тюпкина О.Г. // Письма в ЖТФ. – 1980. – Т. 6. – Вып. 19. – С. 1183–1186.
- Тяпунина Н.А., Благовещенский В.В., Зиненкова Г.М., Ивашкин Ю.А. Особенности пластической деформации под действием ультразвука // Известия вузов. Физика. – 1982. – № 6. – С. 118–128.
- Предводителев А.А., Бушуева Г.В., Ничуговский Г.И. Моделирование процессов пластической деформации в кристаллах // Известия вузов. Физика. – 1982. – № 6. – С. 28–42.
- Слободской М.И., Голосова Т.Н., Попов Л.Е. Источник дислокаций в поле дискретных стопоров // Известия вузов. Физика. – 1990. – № 12. – С. 20–24.
- Голосова Т.Н., Слободской М.И., Попов Л.Е. Распределение времени образования дислокационной петли // Физика металлов и материаловедение. – 1991. – № 8. – С. 204–207.

- Слободской М.И., Попов Л.Е. Особенности работы источника Франка-Рида в поле случайно расположенных препятствий // Известия АН. Сер. физическая. – 1998. – Т. 62. – № 7. – С. 1339–1344.
- Нацик В.Д., Чишко К.А. Акустическая эмиссия при образовании дислокационного скопления источником Франка-Рида // Физика твердого тела. – 1978. – Т. 20. – № 7. – С. 1933–1936.
- Нацик В.Д., Чишко К.А. Динамика и звуковое излучение дислокационного источника Франка-Рида / Физика конденсированного состояния: сб. трудов ФТИНТ АН УССР. – 1974. – Вып. 33. – С. 44–53.
- Вихорь Н.А., Колупаева С.Н., Попов Л.Е. Движение дислокаций при формировании полосы кристаллографического скольжения // Физика металлов и материаловедение. – 1995. – Т. 80. – № 4. – С. 51–57.
- Попов Л.Е., Колупаева С.Н., Вихорь Н.А., Пуспешева С.И. Дислокационная динамика кристаллографического скольжения // Известия вузов. Физика. – 2000. – № 1. – С. 71–76.
- Popov L.E., Kolupaeva S.N., Vihor N.A., Puspesheva S.I. Dislocation dynamics of elementary crystallographic shear // Computational Materials Science. – 2000. – V. 19. – P. 267–274.

- Пуспешева С.И., Колупаева С.Н., Попов Л.Е. Динамика кристаллографических скольжений в меди // Металловедение. – 2003. – № 9. – С. 14–19.
- Попов Л.Е., Кобытев В.С., Ковалевская Т.А. Концепция упрочнения и динамического возврата в теории пластической деформации // Известия вузов. Физика. – 1982. – № 6. – С. 56–82.
- Попов Л.Е., Кобытев В.С., Ковалевская Т.А. Пластическая деформация сплавов. – М.: Металлургия, 1984. – 182 с.
- Самохина С.И., Петелин А.Е., Колупаева С.Н. Исследование дислокационной динамики кристаллографического скольжения. База данных программного комплекса DDCS // Прикладные задачи математики и механики: Матер. XV Междунар. научн. конф. ученых Украины, Беларуси, России. – Севастополь, 2007. – С. 274–277.
- Самохина С.И., Петелин А.Е., Колупаева С.Н. Интерфейс программного комплекса DDCS для исследования дислокационной динамики кристаллографического скольжения // Научное творчество молодежи: Матер. XII Всеросс. научно-практ. конф. – Томск, 2008. – Ч. 1. – С. 35–38.

Поступила 14.04.2010 г.

УДК 681.52

# СИСТЕМА УПРАВЛЕНИЯ МНОГОЗОННОЙ ТЕРМИЧЕСКОЙ УСТАНОВКОЙ ДЛЯ ВЫРАЩИВАНИЯ КРИСТАЛЛОВ ПО МЕТОДУ БРИДЖМЕНА

М.М. Филиппов, Ю.В. Бабушкин, А.И. Грибенюков\*, В.Е. Гинсар\*

Томский политехнический университет \*Институт мониторинга климатических и экологических систем CO PAH, г. Томск E-mail: imces@yandex.ru

Представлено описание системы автоматического регулирования многозонной термической установкой для выращивания монокристаллов методом Бриджмена в вертикальном варианте. Показаны результаты внедрения и апробации предлагаемой системы.

#### Ключевые слова:

Многозонная термическая установка, метод Бриджмена, рост кристаллов, температурное поле, система автоматического регулирования.

#### Key words:

Multizone thermal installation, Bridgman method, crystal growth, thermal field, automatic control system.

Качество кристаллов, выращиваемых по методу Бриджмена, зависит от множества факторов, которые можно разделить на три группы. Первая группа связана со свойствами кристаллизуемого вещества (состав, температура плавления, теплофизические свойства расплава и кристалла и др.). Вторая группа относится к особенностям организации рабочего объема, в котором происходят физико-химические процессы при росте кристалла (наличие или отсутствие затравочных кристаллов, тиглей, их взаимодействие с источником и стоком тепла). Третья группа факторов связана с параметрами термической установки, в которой проводится процесс выращивания кристалла. Основными требованиями, предъявляемыми к термическим установкам для выращивания кристаллов, являются:

- воспроизводимость в рабочем объеме необходимых температурных режимов, удовлетворяющих условиям технологического процесса;
- точность поддержания температурных полей в рабочем объеме установки на всех этапах технологического цикла выращивания кристалла;
- возможность создания в рабочем объеме установки заданных осевых градиентов распределения температуры;
- точность и стабильность перемещения ампулы.