

## Thermal gradient for LiTaO<sub>3</sub> single crystal growth: A simulation study

Joon-Hyuk Kang<sup>\*\*\*</sup>, Won-Bae Sohn<sup>\*</sup>, Su-Jong Jeon<sup>\*</sup>, Jin-Hyeok Kim<sup>\*\*</sup> and Seon Hoon Kim<sup>\*†</sup>

<sup>\*</sup>Department of Optical Lens Research center, Korea Photonics Technology Institute, Gwangju 61007, Korea

<sup>\*\*</sup>Optoelectronics Convergence Research Center and Department of Materials Science and Engineering, Chonnam National University, Gwangju 61186, Korea

(Received September 12, 2024)

(Revised September 30, 2024)

(Accepted October 4, 2024)

**Abstract** LiTaO<sub>3</sub> (Lithium Tantalate) single crystals are widely used in Surface Acoustic Wave (SAW) filters due to their excellent piezoelectric and optical properties. High-quality LiTaO<sub>3</sub> single crystals were preferably grown by czochralski methods for RF Saw filter applications. However, if the growth conditions are not optimized, internal cracks and defects which degrade piezoelectric performance tend to occur. To solve these problems, we should consider temperature gradient and thermal insulation to decrease thermal stress. In this study, an iridium cover was added above the iridium crucible to decrease temperature gradients and improve thermal insulation. The simulation results indicated that the temperature in the central region of the melt increased by up to 8.6 K in the vertical direction and up to 6.4 K in the radial direction. The addition of the iridium cover resulted in increases in both the maximum and minimum temperatures. In the vertical direction, the maximum temperature increased by 6.4 K and the minimum temperature by 8.5 K. In the horizontal direction, the maximum temperature increased by 2.6 K, and the minimum temperature rose by 2.2 K after applying the cover. The temperature gradient was also reduced with the addition of the iridium cover. The vertical temperature gradient decreased by approximately 39 %, while the radial temperature gradient decreased by 50 %. These results indicate that the iridium cover improves the thermal insulation and reduces the temperature gradient in the furnace.

**Key words** Lithium tantalate, Single crystal, Hot-zone, Simulation, Temperature gradient

## LiTaO<sub>3</sub> 단결정 성장을 위한 열 구배 시뮬레이션 연구

강준혁<sup>\*\*\*</sup>, 손원배<sup>\*</sup>, 전수종<sup>\*</sup>, 김진혁<sup>\*\*</sup>, 김선훈<sup>\*†</sup>

<sup>\*</sup>한국광기술원 광학렌즈소재연구센터, 광주, 61007

<sup>\*\*</sup>전남대학교 광전자융합기술연구소 신소재공학과, 광주, 61186

(2024년 9월 12일 접수)

(2024년 9월 30일 심사완료)

(2024년 10월 4일 게재확정)

**요약** LiTaO<sub>3</sub> 단결정은 우수한 압전 및 광학 특성으로 인해 표면 탄성표면파(SAW) 필터에 널리 사용되고 있다. 고품질 LiTaO<sub>3</sub> 단결정은 RF SAW 필터에 사용되기 위하여 주로 초크랄스키 성장 공법을 통해 제작된다. 그러나 단결정 성장 조건이 최적화되지 않으면 열 응력으로 인해 내부 결함 및 크랙이 발생한다. 이를 해결하기 위해서는 열 응력을 줄이기 위한 온도 구배 및 단열 조건을 고려해야 한다. 본 연구에서는 단열 특성 개선 및 온도 구배 감소를 위해 이리듐 도가니 위에 이리듐 덮개를 추가한 구조에 대해 열 구배 시뮬레이션을 수행하였다. 이리듐 덮개가 있는 경우에서, 이리듐 덮개가 없는 경우와 비교하여, 용융액 중앙 영역의 온도는 수직 방향에서 최대 8.6 K, 수평 방향에서 최대 6.4 K 증가하였다. 그리고 수직 방향에서 최대 온도는 6.4 K, 최소 온도는 8.5 K 증가하였고, 수평 방향에서는 최대 온도가 2.6 K, 최소 온도가 2.2 K 증가하였다. 또한, 이리듐 덮개 추가로 인한 온도 구배 감소를 확인하였다. 수직 방향 온도 구배는 약 39 % 감소하였고, 수평 방향 온도 구배는 50 % 감소하였다. 즉, 이리듐 덮개 적용함으로써 Furnace 내의 단열 특성이 개선되고 온도 구배가 감소됨을 확인하였다.

<sup>†</sup>Corresponding author

E-mail: shkim@kopti.re.kr

## 1. 서 론

LiTaO<sub>3</sub> 단결정은 우수한 압전 특성과 높은 유전율을 바탕으로 다양한 광전자 응용 분야에서 중요한 재료로 사용되고 있다. 탄성 표면파(SAW) 필터, 변환기, 압전 센서, 디코더 및 공진기와 같은 다양한 장치에서 사용되고 있다[1]. 특히 SAW 필터는 이동 통신 기기, 태블릿 PC, 무선 장치 등에서 RF 신호 처리를 위해 필수적으로 사용된다[2,3]. SAW 필터를 포함한 응용 제품들의 수요가 증가함에 따라 LiTaO<sub>3</sub> 단결정의 대규모 생산과 고품질 확보가 주요 과제로 부각되고 있다. LiTaO<sub>3</sub> 단결정 성장 공정에서 널리 사용되는 초크랄스키(Czochralski) 공법은 결정 성장 산업에서 대표적인 방법으로, 일정한 속도로 회전하는 도가니에서 용융된 원료를 단결정으로 성장시키는 방식이다[4]. 이 때 Hot-zone 내의 단결정 성장 조건이 제대로 갖춰지지 않을 경우, 단결정 내부 결함 형성 및 크랙 발생이 증가한다[5]. LiTaO<sub>3</sub> 단결정은 내부 결함 및 크랙이 발생할 경우 압전 성능이 저하될 수 있으므로 이를 억제하는 것이 결정 성장 공정의 핵심이다. 따라서, 고품질의 단결정을 얻기 위해서는 적절한 온도 구배와 단열 조건이 필수적이다. 특히, 용융액 내에서 형성되는 온도 구배는 단결정 성장 중 가장 중요한 변수 중 하나로써 온도 구배가 클수록 결정 내부에 열 응력이 발생하여 내부 결함 및 크랙이 발생할 가능성이 증가한다[6,7].

본 연구는 결정 성장 시뮬레이션(CGSim)을 통해 LiTaO<sub>3</sub> 단결정 성장 시 용융액 내 온도 구배와 단열 특성을 해석하였다. 그리고 이리듬 덮개 적용 여부에 따른 온도 구배 및 단열 특성 변화를 확인하였다. 단열 특성의 변화를 확인하기 위해 수직, 수평 방향에서의 최고 온도, 최저 온도를 그래프로 나타내었다. 그리고 온도 구배 변화를 온도 구배 계산식을 사용하여 제시하였다.

## 2. 시뮬레이션 모델링

본 실험에서는 도가니 덮개가 LiTaO<sub>3</sub> 단결정 성장로 Hot-zone의 단열성과 온도 구배에 미치는 영향을 알아보기 위해 단결정 성장 시뮬레이션을 진행하였다. 본 연구

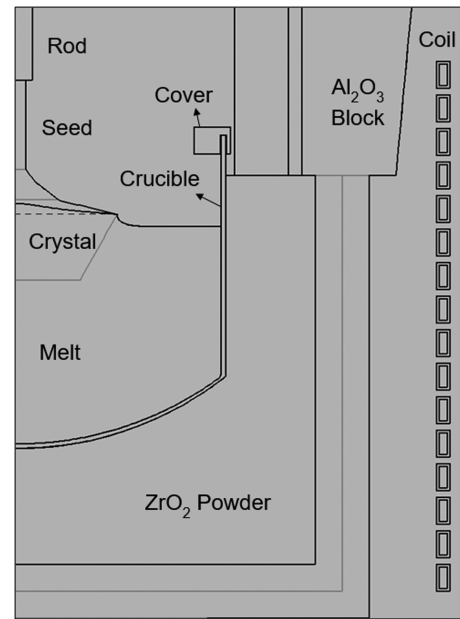


Fig. 1. Schematic diagram of czochralski system for simulation.

에 사용된 시뮬레이션으로는 Crystal growth simulator (CGSim, STR Group Ltd.)가 사용되었고 고주파 유도 가열 방식의 초크랄스키 성장로를 모델링하였다. Figure 1에서는 초크랄스키 LiTaO<sub>3</sub> 단결정 성장로를 전체 개략도로 나타내었다. 상부 단열재로 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 내화물이 사용되었으며, 하부 단열재로는 ZrO<sub>2</sub> 분말이 사용되었다. 도가니는 이리듬 도가니를 사용하였으며, Rod 및 도가니 덮개도 이리듬으로 사용하였다. 코일은 유도 코일을 사용하였고 코일 내부에 298 K의 냉각수가 순환하도록 적용하였다. 성장 분위기는 질소로 적용하였다. 시뮬레이션에 사용된 도가니 덮개의 규격은 원형 구조로써 외경 156.8 mm, 내경 129.8 mm, 두께 10 mm이며, 용융액을 덮는 길이는 10 mm로 설정하였다. 그리고 Table 1에는 시뮬레이션에 사용된 각 재료의 열적 및 물리적 특성 값을 나타내었다. 대표적으로 단열재, 도가니, 질소 등의 각 재료들의 비열(J/kg), 열전도도(W/m)의 값들은 기존 연구에서 확인된 물성치를 참고하였다[8]. 특히 LiTaO<sub>3</sub> 용융액의 점도, 점축각, 표면 장력은 시뮬레이션 결정 성장 시 용융액-결정 계면에서의 메니스커스 형성을 위해 사

Table 1  
Materials properties set-up for simulation

Properties/Materials	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Crucible rod cover	LiTaO <sub>3</sub> crystals	LiTaO <sub>3</sub> melt	ZrO <sub>2</sub>	Steel	N <sub>2</sub>
Heat capacity (J/kg)	915	915	424	800	915	915	500
Heat conductivity (W/m)	2.15	147	5	5	1.14	15	0.025
Viscosity (Pa*s)	-	-	-	0.04	-	-	-
Density (kg/m <sup>3</sup> )	-	-	7450	5638	-	-	-
Wetting angle (degree)	-	-	-	15	-	-	-
Surface tension (N/m)	-	-	-	0.7	-	-	-

Table 2  
Growth conditions set-up for simulation

Crystal position (mm)	Power (kW)	Frequency (Hz)	Growth rate (mm/h)	RPM	Atmosphere
50	4,150	2,820	1.2	9.5	N <sub>2</sub>

용되었다[9].

Table 2에는 LiTaO<sub>3</sub> 단결정 성장 시 필요한 시뮬레이션 설정 인자들을 나타내었다. 여기서 기재된 파워와 주파수 값은 LiTaO<sub>3</sub> 녹는점인 약 1,923 K(1,650°C)로 설정 시 필요한 출력값을 나타내었다. 그리고 결정 성장 길이는 LiTaO<sub>3</sub> 시드 길이 30 mm를 포함한 길이로써 총 결정 성장 길이를 의미한다. 그리고 성장 속도와 회전 속도 등 기타 성장 조건은 기존 연구에서 확인된 물성치를 참고하였다[10].

### 3. 결과 및 고찰

Figure 2(a), (b)는 LiTaO<sub>3</sub> 초크랄스키 성장로 내부 Hot-zone의 온도 분포를 시뮬레이션 결과로 제시하였다. 두 결과 모두 잉곳 성장 길이가 50 mm로 설정되었으며, 용융액의 측정 좌표인 용융액 중앙 하단부( $z_1$ ), 중앙부

고액계면( $z_2$ ), 용융액 표면 가장자리( $r_1$ ), 용융액 중심부( $r_2$ )로 온도 분포를 나타내었다.

Figure 2(a)는 이리듐 덮개를 추가하지 않은 용융액의 온도 분포 결과이다. 용융액 중심부( $r_2$ )의 온도가 용융액 표면 가장자리( $r_1$ )에 비해 약 10~20 K 낮은 것으로 확인되었다. 또한 중앙부 고액계면( $z_2$ )에서 용융액 중앙 하단부( $z_1$ )로 내려갈수록 온도가 감소하였고, 특히 용융액 중심 하단부( $z_1$ ) 영역의 온도가 전체 용융액 온도 중에서 1,902 K로써 가장 낮게 측정되었다. 반면 가장 높게 측정된 온도는 용융액 표면 가장자리( $r_1$ ) 영역에서 1,955 K로 측정되었다. 만약 용융액 내부의 온도가 일정하지 않을 경우, 수직 방향에서의 온도 구배가 증가하여 하부 고형화의 발생을 야기한다[5,6]. 이와 유사한 연구로써, Hui Zhang의 연구 결과에 따르면 Yb<sup>3+</sup>:Sr<sub>5</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>3</sub>F 레이저 단결정 성장 시 온도 구배 증가로 인해 단결정 내의 열 응력이 증가된다고 보고된 바 있다. 이는 결정 성장 중에 하부 고형화 발생 및 크랙을 유발하는 주요 원인으로 작용한다고 보고 된 바 있다[5]. 따라서 온도 구배를 감소시키고 단결 특성 향상 시킬 수 있는 Hot-zone 구조 설계가 필수적이다.

단결 특성 향상 및 온도 구배를 감소 목적으로 덮개 길이가 10 mm인 이리듐 도가니 덮개를 추가하여, Figure 2(b)의 시뮬레이션 결과로 나타내었다. Figure 2(b)에는 Figure 2(a)와 비교 시 이리듐 덮개를 추가함으로써 중앙부 고액계면( $z_2$ )의 온도가 1,940 K에서 1,949 K로 약 9 K 상승하였다. 그리고 용융액 중심부( $r_2$ )의 온도가 1,933 K에서 1,940 K로 약 7 K 상승하였다. 특히 가장 온도가 낮게 측정되었던 용융액 하단부( $z_1$ )의 온도가 약 1,910 K로 측정되어 약 8 K 상승하였다. 반면, 용융액 표면 가장자리( $r_1$ )의 온도는 덮개 적용 이후의 차이가 거의 없는 것으로 확인하였다. 이와 유사한 연구로써 Ming Wu의 연구 결과에서는, 열 교환 기법을 이용한 사파이어 단결정 성장 시 도가니 덮개에서의 열 전달 메커니즘에 대해 설명하였다. 도가니 위에 덮개를 적용하여 덮개 위로 방출되는 복사열을 차단하고 용융액 내의 열을 가두게 되어 도가니 내부에 더 많은 열이 머물게 된다. 이는 도가니 덮개가 방사형으로 전달되는 열의 흐름을 제한하고, 수직 방향으로 더 많은 열을 전달할 수 있다고 보고된 바 있다[11]. 그리고 Dan Wu의 연구결과에서는, Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 단결정 성장 시 절연 덮개를 사용함으로써 용융액과 도가니에서 방출되는 복사열을 차단하여 성장 계면을 불록하게 만들어 결정의 품질을 향상시킬 수 있다고 보고된

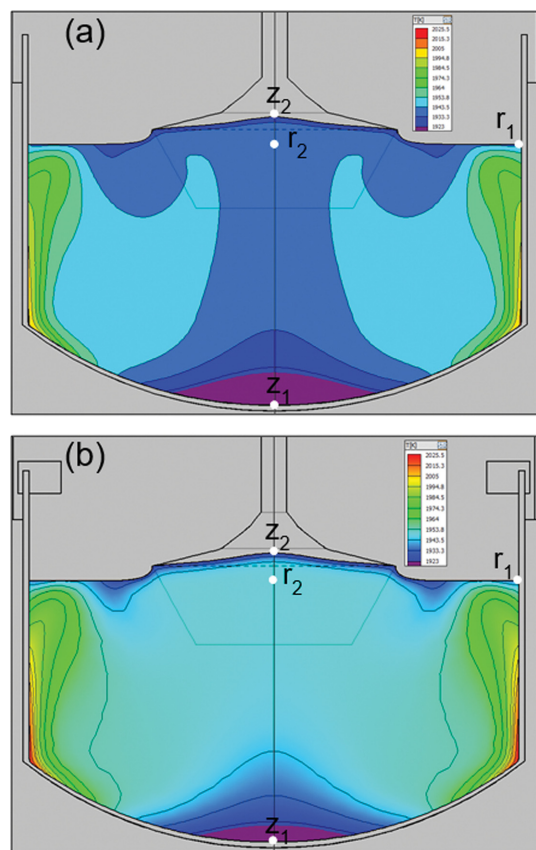


Fig. 2. Simulation result of temperature distribution in LiTaO<sub>3</sub> growth furnace (a) without iridium (b) with iridium.

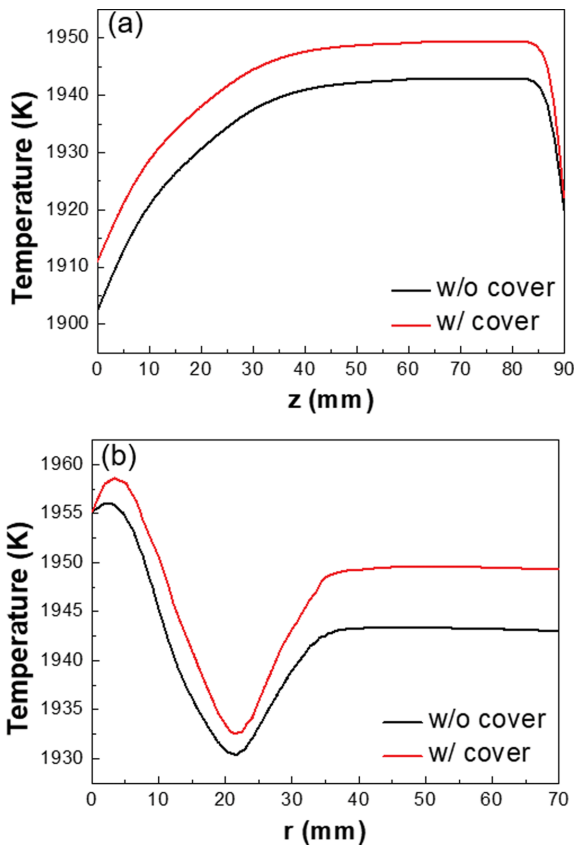


Fig. 3. (a) Vertical and (b) radial temperature distribution with and without iridium cover.

바가 있다[12]. 이를 통해 이리듐 덮개를 적용하면 용융액의 가장자리 영역보다 상대적으로 용융액의 중앙부에 더 많은 열을 전달하여 온도가 증가하는 것으로 해석된다. 그러므로 중앙 하단부~중앙부 고액계면( $z_1$ - $z_2$ )에서의 온도를 증가시켜 Hot-zone 내부 단열 특성을 강화하고, 하부 고형화의 발생을 억제 시킬 것으로 예상된다.

용융액 온도 및 단열 특성 변화를 정량적으로 확인하기 위해 Fig. 3에 수직 방향과 수평 방향에서의 용융액 온도 분포를 그래프로 나타내었다. Figure 3(a)는 도가니 중앙 하단부~중앙부 고액계면( $z_1$ - $z_2$ )까지의 길이를 90 mm로 설정하여 수직 방향 온도를 나타낸 그래프이다. Figure 3(b)는 용융액 표면 가장자리~용융액 중심부( $r_1$ - $r_2$ )까지의 길이를 70 mm로 설정하여 수평 방향 온도 분포를 나타낸 그래프이다. Figure 3(a)에서 이리듐 덮개를 적용한 이후 수직 방향에서의 용융액의 온도는 전체적으로 최소 2.1 K에서 최대 8.6 K까지 증가하였다. Figure 3(b)에서 이리듐 덮개를 적용 이후 수평 방향에서의 용융액의 온도는 용융액 표면 가장자리~용융액 중심부( $r_1$ - $r_2$ )에서 최소 0.1 K에서 최대 6.4 K까지 증가하였다. 특히  $r = 35$  mm 이후로부터 온도 차이가 약 6 K로 가장 크며, 온도 기울기가 일정한 것을 확인하였다. 반면, 용융액 계면 가장자리( $r_1$ )에서는 이리듐 덮개를 적용 이후

온도가 0.1 K 소폭 증가하였다. 이는 이리듐 덮개 위로 방출되는 복사열을 차단하고 용융액 내의 열을 가두게 되어 열이 용융액 중앙부에 집중되도록 유도한다[11,12]. 이로 인해 상대적으로 중앙부의 온도가 높아지는 것으로 해석된다. 그러므로 위 시뮬레이션 결과로부터 이리듐 덮개를 적용한 이후 Hot-zone 내부의 수직, 수평 방향에서의 단열 특성이 향상되었음을 정량적으로 확인하였다.

Hot-zone 내부의 단열 특성 향상과 더불어 고품질의 단결정 잉곳 성장을 위해서는 온도 구배의 최소화가 요구된다. 온도 구배가 클 경우 잉곳 성장 계면 주위의 용융액의 온도 분포가 불안정하여 잉곳 내부 크랙 및 내부 결함 발생이 증가한다[6,7]. 이와 유사한 연구로써 J.C. Brice의 연구 결과에서는, 초크랄스키 공정으로 성장한 비스무트 실리콘 산화물과 리튬 니오베이트 결정에서 발생하는 열 응력과 균열 형성에 대해 분석하였다. 축 방향에서의 온도 구배가 특정 임계치를 넘으면 결정 내에서 균열이 발생할 수 있음을 보고한 바가 있다[6]. 그리고 N. Subramanyam의 연구 결과에서는, 초크랄스키 공정으로 성장한 GaAs 단결정에서 전위 밀도를 줄이기 위해 최적의 성장 파라미터를 제시하였다. 낮은 온도 구배 형성과 작은 반경의 단결정 생성이 전위 밀도를 최소화하는데 유리한 조건임을 보고한 바가 있다[7].

이리듐 도가니 덮개 추가로 인한 온도 구배 및 단열 특성 변화를 정량적으로 확인하기 위해 Fig. 4와 Table 3에서 최대 온도, 최소 온도 그리고 온도 구배를 계산하여 그래프 및 표로 나타내었다. Figure 4(a), (b)에는 수직, 수평 방향에서의 덮개 적용 시 최고, 최저 온도 변화를 그래프로 나타내었다. 수직 방향에서 최고 온도는 덮개 적용 이후 6.4 K 증가하였으며, 최저 온도도 덮개 적용 이후 8.5 K 증가하였다. 그리고 수평 방향에서 최고 온도는 덮개 적용 이후 2.6 K 증가하였으며, 최저 온도도 덮개 적용 이후 2.2 K 증가하였다. 이를 통해 이리듐 덮개를 적용한 이후 Hot-zone 성장로 내의 최고, 최저 온도가 증가한 것을 정량적으로 확인하였다.

Figure 4(c)과 Table 3에서는 덮개를 적용한 전후의 수직 방향( $\nabla T_z$ )과 수평 방향( $\nabla T_r$ )에서의 온도 구배 변화를 확인하였다. 단결정 성장 공정에서 온도 구배는 결정 표면에서 용융액으로의 열 전달 과정을 나타내는 중요한 물리적 변수로 단위 거리당 온도의 변화율을 의미한다. 온도 구배는 잉곳 성장 과정에서 열 응력 및 결함 발생을 예측하는 데 중요한 역할을 하며, 이를 제어하는 것은 고품질 단결정을 성장시키기 위한 핵심 조건 중 하나이다[13,14]. 이와 유사한 연구 결과로써 I. M. Buckley-Golder의 연구에서는, 구리와 실리콘 결정을 초크랄스키 공법으로 성장 시 Necking 길이 및 직경의 변화에 따른 결정 내부의 온도 구배를 계산하였다. 이론적 계산을 통해 온도 구배가 결정의 품질에 미치는 영향을 분석하고,

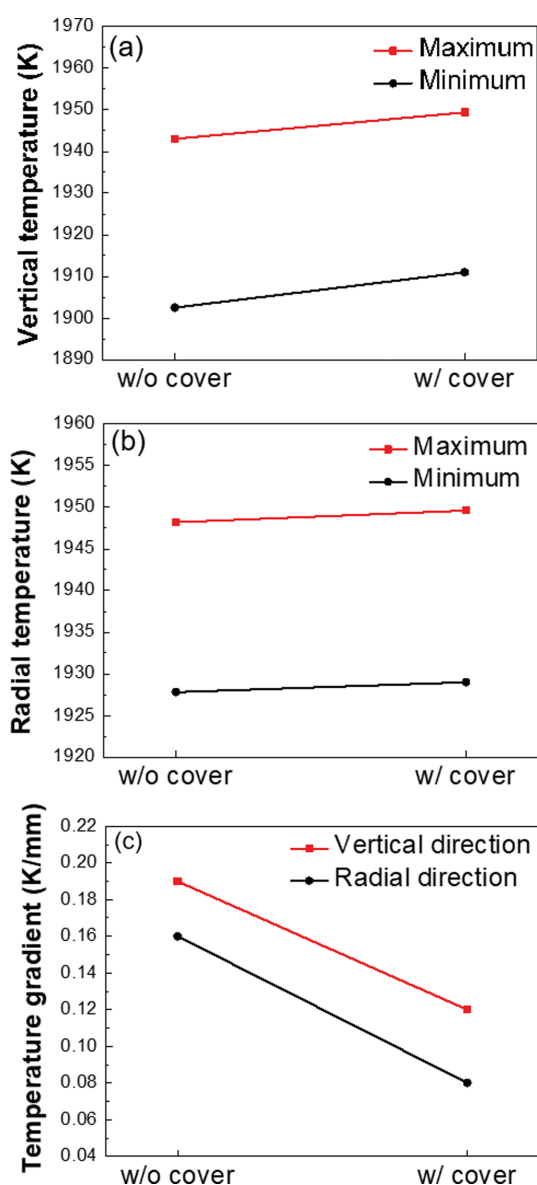


Fig. 4. Maximum and minimum temperature with and without iridium cover in (a) vertical and (b) radial direction (c) temperature gradient in the vertical, radial direction.

이를 최소화하는 방법을 제시하였다[13]. 그리고 Ja Hoon Jeong의 연구에서는, 초크랄스키 결정 성장 과정에서 단 결정 표면의 온도 분포 및 온도 구배 최적화를 변분 방법과 라그랑주 승수법을 사용하여 계산하였다. 결정 표면의 온도 구배를 최적화하는 것이 결정의 품질을 크게 향상시키는 핵심 요인임을 입증하였다[14].

온도 구배는 수직, 수평 방향에서 각각 정의되며, 아래 수식과 같이 계산하였다.

$$\nabla T_z = \frac{T_1 - T_2}{z_1 - z_2} \quad (1)$$

여기서  $\nabla T_z$ 는 수직 방향에서의 온도 구배를 의미하여,

Table 3  
Maximum and minimum temperature and temperature gradient with and without iridium cover

Vertical direction (z : 90 mm)		
	W/O cover	W/ cover
Max. Temp. [K]	1,943	1,949.4
Min. Temp. [K]	1,902.5	1,911
Temperature gradient [K/mm]	0.19	0.12
Radial direction (r: 70 mm)		
	W/O cover	W/ cover
Max. Temp. [K]	1,956	1,958.6
Min. Temp. [K]	1,930.4	1,932.4
Temperature gradient [K/mm]	0.16	0.08

$T_1$ 과  $T_2$ 는 두 지점의 온도,  $z_1$ 과  $z_2$ 는 두 지점 간의 거리를 나타낸다.

$$\nabla T_r = \frac{T_1 - T_2}{r_1 - r_2} \quad (2)$$

여기서  $\nabla T_r$ 는 수평 방향에서의 온도 구배를 의미하여,  $T_1$ 과  $T_2$ 는 두 지점의 온도,  $r_1$ 과  $r_2$ 는 두 지점 간의 거리를 나타낸다. Table 3에 덮개 적용 전후의 온도 구배 변화 결과값을 표로 나타내었다. 수직 방향에서 덮개 적용 전 온도 구배는 0.19 K/mm에서 덮개 적용 후 0.12 K/mm로 약 39% 감소하였다. 수평 방향에서도 덮개 적용 전 0.16 K/mm에서 덮개 적용 후 0.08 K/mm로 50% 감소하였다. 위 결과를 통해 수직, 수평 방향에서의 온도 구배 감소를 확인하였다. 특히 수직 방향에서의 온도 구배 감소는 하부 고형화의 발생 가능성을 줄이고, 결정 성장의 안정성을 높이는 데 중요한 역할을 한다고 보고된 바 있다[5]. 또한 위 결과들을 통해 수직, 수평 방향에서 온도 구배가 감소하여 결정 내부의 결함 발생 가능성이 감소할 것이라 예상된다. 따라서, 덮개 적용 이후 수직, 수평 방향에서의 온도 구배 감소 및 단열 특성의 향상은 Hot-zone 내에 잉곳 성장 조건을 더욱 최적화할 수 있으며, 이는 고품질의 LiTaO<sub>3</sub> 단결정을 성장시키는 데 필수적인 요인임을 확인하였다.

#### 4. 결 론

본 연구는 성장로 내 Hot-zone의 단열 특성과 온도 구배를 결정 성장 시뮬레이션(CGSim)을 통해 확인하였다. 그리고 온도 구배 감소 및 단열 특성을 증가시키기 위해 이리듐 덮개를 적용하였다. 그 결과, 이리듐 덮개를 추가함으로써 용융액의 중앙 영역이 수직 방향으로 최대 8.6 K, 수평 방향으로 최대 6.4 K한 상승한 것을 확인하였다. 그리고 수직 방향에서 최고 온도는 덮개 적용 이

후 6.4 K 증가하였으며, 최저 온도도 덮개 적용 이후 8.5 K 증가하였다. 수평 방향에서 최고 온도는 덮개 적용 이후 2.6 K 증가하였으며, 최저 온도도 덮개 적용 이후 2.2 K 증가하였다. 이리듬 덮개 적용 이후 온도 구배 변화를 확인한 결과, 수직 방향에서의 온도 구배가 약 39 % 감소하였으며, 수평 방향에서의 온도 구배가 50 % 감소하였다. 위 결과를 통해 이리듬 덮개를 적용함으로써 Hot-zone 내의 단열 특성을 증가시키고 온도 구배 감소를 확인하였다. 본 연구 결과를 통해, LiTaO<sub>3</sub> 단결정 성장을 위한 초크랄스키 공법에서 이리듬 덮개를 적용함으로써 단열 특성을 증가시켜 LiTaO<sub>3</sub> 단결정 성장 시 온도구배를 감소시킬 수 있음을 확인하였다.

## 감사의 글

이 논문은 과학기술정보통신부의 재원으로 한국연구재단(NRF)의 지원을 받아 수행된 연구임(No. 2022M3H4 A3051764).

## References

- [ 1 ] S. Kumaragurubaran, S. Takekawa, M. Nakamura and K. Kitamura, "Growth of 4-in diameter near-stoichiometric lithium tantalate single crystals", *J. Cryst. Growth.* 285 (2005) 88.
- [ 2 ] M.E. Lines, E. Malcolm, A.M. Glass and M. Alastair, "Principles and applications of ferroelectrics and related materials", 1st ed., Lines, Malcolm E., et al., Vol. 2 (Oxford university press, 2001) p. 24.
- [ 3 ] Chen, Pu, Guangxi Li and Zhiyuan Zhu, "Development and application of SAW filter", *Micromachines* 13 (2022) 656.
- [ 4 ] Eiichiro Nishimura, Katsuhiko Okano, Junji Lida and Keigo Hoshikawa, "LiTaO<sub>3</sub> single crystal growth by the vertical Bridgman technique", *Cryst. Res. Technol.* 53 (2018) 1800044.
- [ 5 ] Hui Zhang, Lili Zheng and Haiasheng Fang, "Hot zone design for controlled growth to mitigate cracking in laser crystal growth", *J. Cryst. Growth.* 318 (2011) 695.
- [ 6 ] J.C. Brice, "The cracking of czochralski-grown crystals", *J. Cryst. Growth.* 42 (1977) 427.
- [ 7 ] S. Narayanaswamy and C.T. Tsai, "Dislocation reduction in GaAs crystal grown from the czochralski process", *J. Mater. Process. Technol.* 55 (1995) 278.
- [ 8 ] D. Furrer and S.L. Semiatin, "Metals process simulation", Valencia, Juan J. and Peter N. Quedstedt, Vol. 22B (ASM international, 2010) p. 18.
- [ 9 ] S.A. Krat, A.S. Popkov, Yu.M. Gasparyan, A.A. Pisarev, Peter Fiflis, Matthew Szott, Micheal Christenson, Kishor Kalathiparambil and David N. Ruzic, "Wetting properties of liquid lithium on lithium compounds", *Fusion Eng. Des.* 117 (2017) 199.
- [ 10 ] D. Roshchupkin, R. Fakhrtdinov, B. Redkin, V. Karandashev, V. Khvostikov, A. Mololkin, O. Siminko and A. Zabelin, "Growth of ferroelectric lithium niobate tantalate LiNb<sub>(1-x)</sub>Ta<sub>x</sub>O<sub>3</sub> crystals", *J. Cryst. Growth.* 621 (2023) 127377.
- [ 11 ] Ming Wu, Wenhan Zhao, Lijun Liu, Yang Yang, Wencheng Ma and Yuan Wang, "Effects of crucible cover on heat transfer during sapphire crystal growth by heat exchanger method", *J. Cryst. Growth.* 404 (2014) 130.
- [ 12 ] Dan Wu, Ning Xia, Keke Ma, Jiabin Wang, Cheng Li, Zhu Jin, Hui Zhang and Deren Yang, "Numerical simulation of  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> single crystal growth by czochralski method with an insulation lid", *Crystals* 12 (2022) 1715.
- [ 13 ] I.M. Buckley-golder and C.J. Humphreys, "A theoretical study of temperature distributions during czochralski crystal growth", *Philos. Mag. A.* 39 (1979) 41.
- [ 14 ] J.H. Jeong and I.S. Kang, "Optimization of the crystal surface temperature distribution in the single-crystal growth process by the czochralski method", *J. Comput. Phys.* 177 (2002) 284.