

КОНЕЧНО-ЭЛЕМЕНТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ГИДРОДИНАМИКИ И ТЕПЛОМАССОБМЕНА ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ КРИСТАЛЛОВ

А.И. Федюшкин

ФГБУН Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН,
119526, Москва, проспект Вернадского 101-1.

e-mail: fai@ipmnet.ru

В настоящей работе представлены результаты численного моделирования конвективного теплопереноса при выращивании монокристаллов методами Бриджмена, Чохральского и плавающей зоны, а также показано влияние гармонических управляемых поступательных вибраций. При выращивании монокристаллов, вибрации могут оказывать существенное влияние на гидродинамику расплава, на распределения температуры и примеси, на скорость кристаллизации и, как следствие, на свойства и совершенство кристаллов. Для квазиустановившихся режимов приведены мгновенные и осредненные по времени характеристики вибрационных течений расплава. Показано, что вибрации могут интенсифицировать тепло-массообмен в расплаве, выполаживать фронт кристаллизации, а также уменьшать толщины пограничных слоев (динамического, температурного и концентрационного), что может приводить к увеличению температурного градиента на фронте кристаллизации и увеличению скорости роста кристаллов.

Постановка задачи

Расчеты вибрационных течений расплава основаны на прямом численном решении уравнений Навье-Стокса несжимаемой вязкой жидкости:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial r} + \alpha \frac{u}{r} + \frac{\partial w}{\partial z} &= 0 \\ \frac{du}{dt} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\alpha \nu \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu \frac{\partial u}{\partial z} \right) - \alpha \nu \frac{u}{r^2} \\ \frac{dw}{dt} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\alpha \nu \frac{\partial w}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu \frac{\partial w}{\partial z} \right) + g \beta (T - T_m) \\ \frac{d\rho c_p T}{dt} &= \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\alpha \lambda \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right)\end{aligned}$$

Здесь: r и z радиальная и осевая координаты, t - время, u и w - радиальная и осевая компоненты вектора скорости, T - температура, p - давление, ρ - плотность, \mathbf{g} - ускорение свободного падения, β_T , ν , λ , c_p - коэффициенты линейного температурного расширения, кинематической вязкости, теплопроводности и теплоёмкости, α - геометрический фактор, который равен 0 для плоской и 1 для осесимметричной геометрии, $d/dt = \partial/\partial t + \mathbf{v} \cdot \nabla$ - субстанциональная временная производная.

Задание граничных условий рассмотрено при описании примеров расчета.

Начальные условия имеют вид: $t=0$: $u=0$, $w=0$, $T=T_m$

Вибрации задавались в виде гармонической функции времени для перемещения или скорости на заданной границе или на погруженном вибраторе (2.11). В данной работе были рассмотрены две модели: первая - без учета перемещения вибратора (для малых амплитуд задавались гармонические изменения скорости) и вторая - с учетом перемещения вибратора или части границы расчетной области (для больших амплитуд) с перестройкой расчетной сетки.

При заданном фронте кристаллизации, скорость роста кристаллов была постоянной и в базовых вариантах расчёта равной $W_S=0.3$ см/час. Амплитуды вибраций были постоянными

со значениями в диапазоне от 0 до 400мкм, а частоты были в диапазоне от 0 до 100Гц. и 3000Гц.

Задача характеризуется следующими числами подобия: число Рейнольдса, связанное со скоростью роста кристалла $Re_s = W_s R / \nu$; вибрационное число Рейнольдса $Re_{vibr} = A\omega R / \nu$, где A - амплитуда, $\omega = 2\pi f$ круговая частота поступательных движений вибратора, число Грасгофа $Gr = g\beta\Delta TR^3 / \nu^2$ (или числа Рэлея $Ra = Gr Pr$), где ΔT – масштаб температуры, и число Прандтля $Pr = \nu\rho c_p / \lambda$.

Численный метод

Рассмотрим алгоритм решения на примере типичного уравнения конвективного переноса величины \mathbf{A} :

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{A} = \nabla \cdot (k \nabla \mathbf{A}) + \mathbf{F}$$

Решение получалось с помощью вариационной схемы Петрова-Галеркина

$$\int_V \left(\frac{\mathbf{A}^{n+1} - \mathbf{A}^n}{\Delta t^n} + \mathbf{u}^n \cdot \nabla \mathbf{A}^{n+1} \right) (\delta \mathbf{A} + \Delta t^n \mathbf{u}^n \cdot \nabla \delta \mathbf{A}) dV + \\ + \int_V \tilde{k}^n \nabla \mathbf{A}^{n+1} \cdot \nabla \delta \mathbf{A} dV = \int_V \mathbf{F}^{n+1} \cdot \delta \mathbf{A} dV + \int_{S \setminus S_A} P_*^{n+1} \cdot \delta \mathbf{A} dS$$

которая дополняется главными граничными условиями: $t \geq 0, \mathbf{r} \in S_A : \mathbf{A}^{n+1} = \mathbf{A}_*(\mathbf{x}, t^{n+1})$

и начальными условиями: $t = 0, \mathbf{r} \in V : \mathbf{A}^0 = \mathbf{A}_*(\mathbf{x})$

Естественные граничные условия: $t \geq 0, \mathbf{r} \in S \setminus S_A : k\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{A}^{n+1} = \mathbf{P}_*^{n+1} = \mathbf{P}_*(\mathbf{x}, t^{n+1})$

учтены в записанном выше вариационном уравнении Галеркина-Петрова. Величины со звездочками являются заданными. Величина $\tilde{k}_*^n \geq 0$ является коэффициентом вязкости, подправленным (уменьшенным) по методу экспоненциальной подгонки А.А.Самарского (в самом простом варианте): $\tilde{k}_*^n = \frac{k^2}{k + \mathbf{u}^n \cdot \mathbf{u}^n \Delta t^n}$. По пространственным переменным

применялась простейшая кусочно-линейная аппроксимация решения на треугольных конечных элементах. Решение дискретизированных задач получалось безматричным итерационным методом сопряженных градиентов, каждая итерация которого эквивалентна расчету временного шага по явной двухслойной конечно-разностной схеме. Число итераций для получения решения не превышает числа \sqrt{N} , где N - число неизвестных значений искомой функции в узлах. Поскольку число операций на каждой итерации прямо пропорционально N , то асимптотическая оценка числа операций, затрачиваемых на расчет шага по времени дает число пропорциональное $N^{3/2}$. Потребная память ЭВМ составляет $5N$ (5 массивов длины N). Таким образом, применяемый метод позволяет решать данные задачи весьма быстро на обычных бытовых ноутбуках. Отметим, что хотя формально неявный метод является безусловно устойчивым, для получения приемлемой точности расчета конвективных течений шаг по времени в нестационарных задачах должен быть ограничен условием Куранта $\Delta t^n \leq \min(h / |\mathbf{u}^n|)$.

Отметим дополнительно, что уравнения движения для радиальной и осевой скоростей решались совместно с условием несжимаемости, которое включалось в вариационное уравнение в качестве ограничения по методу штрафных функций. Величина коэффициента штрафа определялась по максимуму модуля скорости в области течения так, чтобы не усилить курантовское ограничение шага по времени, записанное выше. Затем отдельно решались задачи для азимутальных скоростей и температуры. Более подробно данные алгоритмы описаны в работах [1].

Характеристики осредненных по времени вибрационных течений, например, некоторой величины f в процессе решения определялись по формуле: $f_{average} = \frac{1}{t} \int_0^t f dt$

Дополнительным ограничением на шаг по времени была величина частоты вибраций. Расчетный шаг по времени выбирался так, чтобы на период колебаний вибратора приходилось от 20 до 400 шагов по времени. Представленные ниже результаты расчетов осредненных вибрационных течений относятся к тому моменту времени, когда осредненное течение становится квазистационарным.

Результаты

На рис. 1 и рис.2 показаны изотермы и профили температуры в расплаве NaNO_3 ($Pr=5.43$ – число Прандтля) (в правых частях рисунков – без вибраций, в левых - с вибрациями $Re_{vibr}=200$, где $Re_{vibr}=A\omega R/\nu$ - число Рейнольдса вибрационное, A – амплитуда, $\omega=2\pi f$ и f - частоты, ν - кинематическая вязкость, R – радиус кристалла).

На рис. 3 и рис.4 показаны вертикальные профили температуры для метода Чохральского и зонной плавки с воздействием и без воздействия вибраций на расплав.

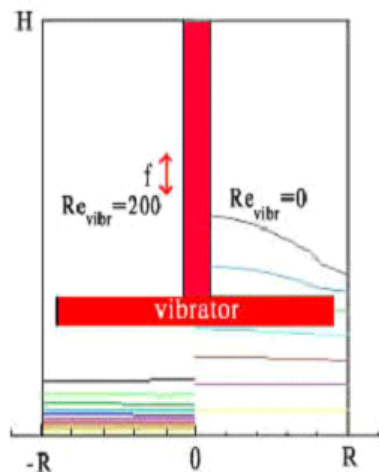


Рис 1. Изотермы в расплаве NaNO_3 ($Pr=5.43$) (справа – без вибраций, слева - с вибрациями $Re_{vibr}=200$)

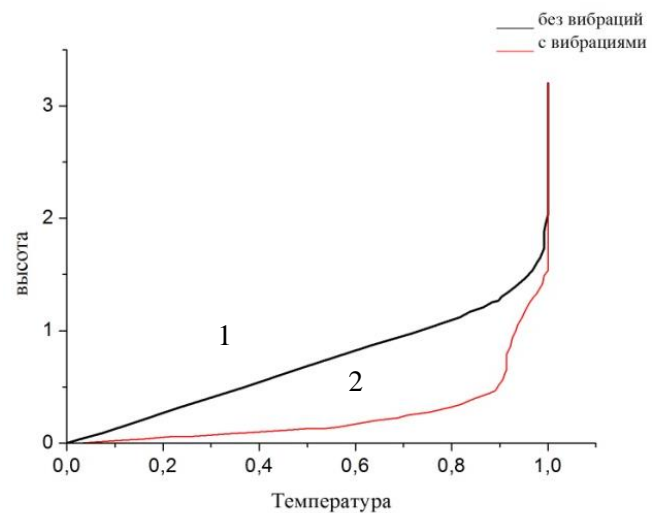
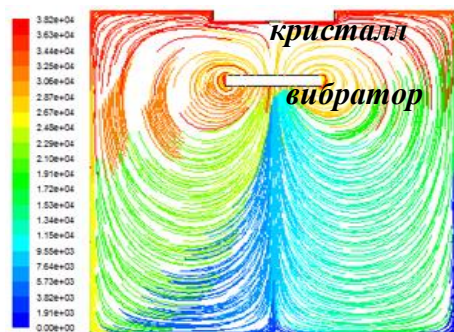
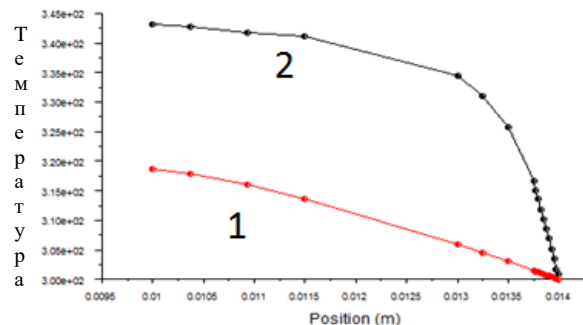


Рис. 2. Вертикальные профили температуры ($r=0.75$) в расплаве NaNO_3 ($Pr=5.43$) (линия 1 – без вибраций, 2 - с вибрациями $Re_{vibr}=200$)



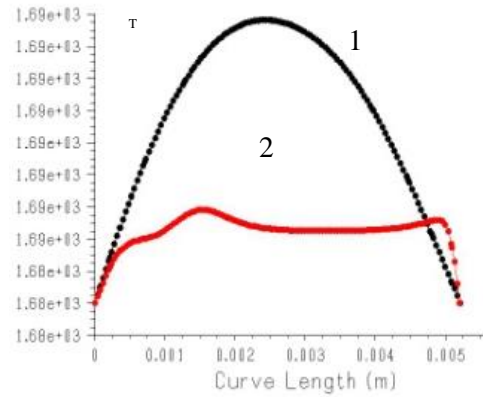
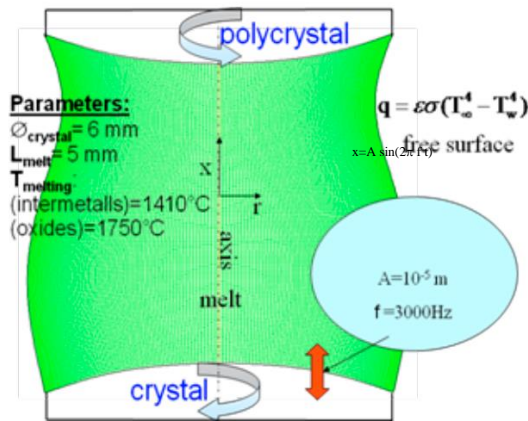
а)



б)

Рис. 3. . Метод Чохральского ($A=0.4\text{мм}$, $f=20\text{Гц}$)

а) - треки течения расплава на момент $400T=20\text{сек}$. б) - вертикальные профили температуры между кристаллом и вибратором (1 - без вибраций, 2 - с вибрациями)



а)

б)

Рис. 4. . Метод зонной плавки кремния ($A=0.01\text{mm}$, $f= 3000\text{Hz}$)

а) – схема модели. б) – вертикальные профили температуры ($\tau=0.5 \text{ R}$) (1 - без вибраций, 2 - с вибрациями)

На рис. 5 показано влияние вибраций на форму фронта кристаллизации

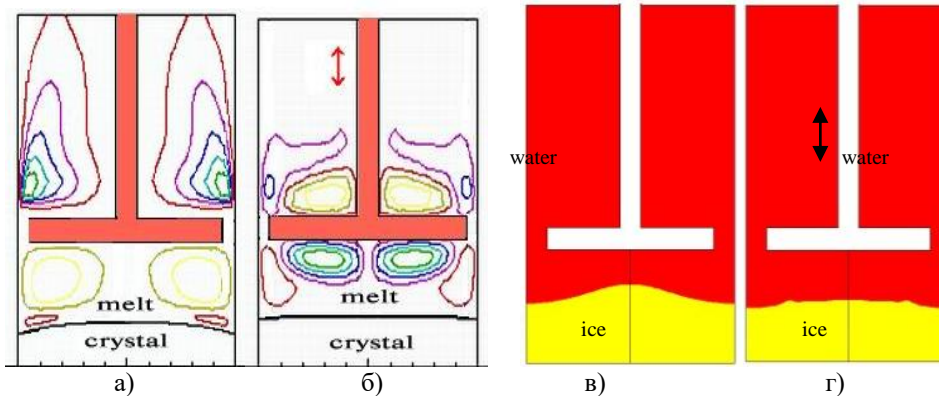


Рис 5 Метод Бриджмена с погруженным вибратором (задача Стефана)

а), б) – функция тока (NaNO_3), а) - $f=0$, б) - с вибрациями ($A=0.1 \text{ mm}$, $f=50 \text{ Hz}$),
в), г) – граница раздела фаз вода-лёд, в) – $f=0$, г) – с вибрациями, ($A=0.1 \text{ mm}$, $f=30 \text{ Hz}$)

Более подробно постановка и результаты рассмотренных задач описаны в работе [2].

Выводы

Показано уменьшение толщин пограничных слоев для разных вариантов вибрационного воздействия, разных конфигураций расположения вибратора, свойств жидкостей, что подтверждает общую закономерность данного факта.

Результаты численного моделирования показали, что вибрационным воздействием возможно получать более плоский фронт кристаллизации, что важно при выращивании монокристаллов.

Работа была поддержана грантом РФФИ: № 15-08-01365

Литература

1. Бурого Н.Г. Вычислительная механика. *Электронная книга*. 2012. 275 с. DOI: 10.13140/RG.2.1.4610.5047.
2. А.И. Федюшкин, К.А. Иванов. Гидродинамика и теплообмен при вибрационных воздействиях на расплав в процессах выращивания монокристаллов. - Препринт ИПМех РАН, № 1085, Москва, 2014, 107 с.