УДК 532.252+536.248.2

ВЛИЯНИЯ УПРАВЛЯЕМЫХ ВИБРАЦИЙ НА ГИДРОДИНАМИКУ И ТЕПЛОПЕРЕНОС ПРИ РОСТЕ КРИСТАЛЛОВ МЕТОДОМ ЧОХРАЛЬСКОГО

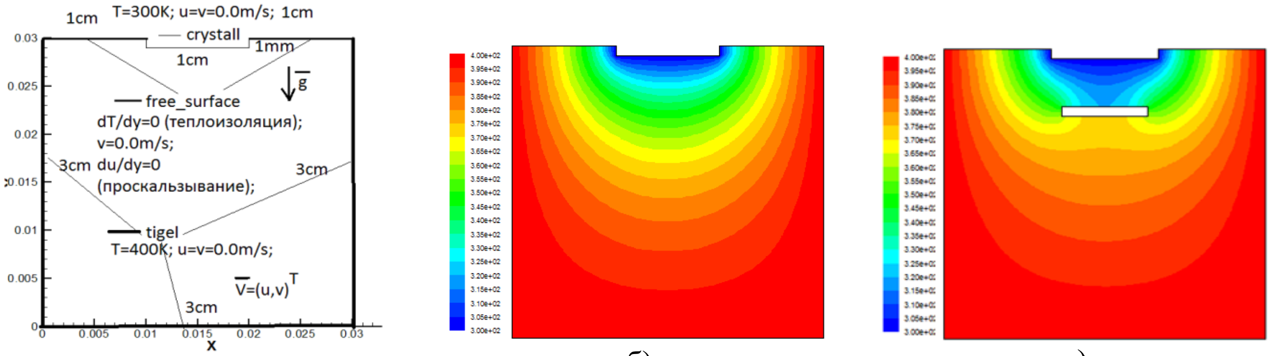
Федюшкин А.И.

Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН,

В данной работе приведены результаты исследования гидродинамики и теплопереноса при выращивании монокристаллов методом Чохральского с погруженным вибратором. Математическое моделирование основано на численном решении уравнений Навье-Стокса и уравнений конвективного переноса тепла (1). При моделировании использовались различные численные методы и комплексы программ, которые описаны в работе [1].

1. Постановка задачи и математическая модель

В методе Чохральского тепловая конфигурация соответствует неустойчивому распределению температуры: холодный фронт кристаллизации расположен над расплавом. В данной работе рассматривается упрощенная двумерная плоская модель выращивания кристаллов методом Чохральского, движение кристалла и вращения кристалла и тигля не рассматриваются, предполагается, что погруженный вибратор либо кристалл совершают колебательные движения по закону: $y = A \cdot \cos(2\pi f t)$, с частотой f и малой амплитудой A (A=100 μm либо A=400 μm). На рис. 1а) показана схема расчетной области (размер области: 3×3см, диаметр кристалла равен 1 см). На рис. 1б), в) показаны изотермы при теплопроводностном режиме (без вибраций и без конвекций) для конфигурации без и с погруженным вибратором (Pr=7, h/d=0.5).



а) б) в)

Рис. 1. а) – схема расчётной области с граничными условиями, б), в) - изотермы при теплопроводностном режиме (б), в) схема с погруженным вибратором h/d=0.5

Моделирование основано на решении системы уравнений Навье-Стокса в приближении Буссинеска и уравнения переноса температуры:

$$\frac{\partial \mathrm{V}}{\partial \mathrm{t}} + (\mathrm{V}\nabla)\mathrm{V} = -\frac{\nabla \mathrm{P}}{\rho} + \nu\Delta\mathrm{V} + \beta\mathrm{T}\mathbf{g}, \quad \mathrm{div}\mathrm{V} = 0, \quad \frac{\partial \mathrm{T}}{\partial \mathrm{t}} + (\mathrm{V}\nabla)\mathrm{T} = \mathrm{a}\Delta\mathrm{T} \qquad (1)$$

где V – вектор скорости; P – давление; ρ – плотность; T – температура; **g** – вектор ускорения свободного падения; a, ν – коэффициенты температуропроводности и

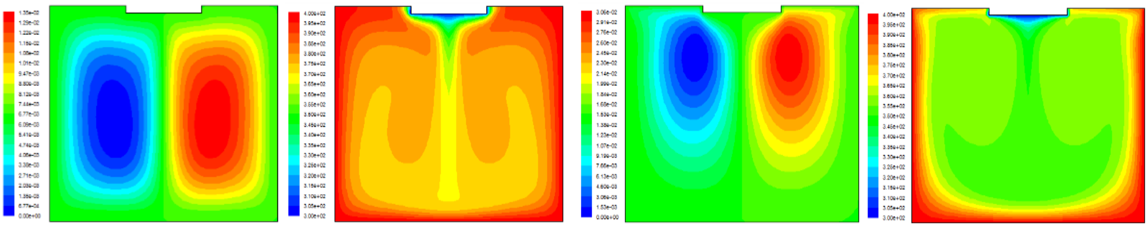
Актуальные проблемы прикладной математики, информатики и механики: сборник трудов Международной научной конференции, Воронеж, 17-19 декабря 2018 г. - 1672 с. Издательство "Научно-исследовательские публикации" Воронеж, 2018. С. 955-962. ISBN 978-5-6042216-1-7.

кинематической вязкости; β - коэффициент линейного температурного расширения. Для скорости на всех твердых границах ставится условие прилипания: $\mathrm{V} = 0$, на свободной границе отсутствие трения, а при наличии конвекции Марангони, условие Марангони (см. п. 2.1). Для температуры ставятся такие условия: тигель имеет постоянную температуру в Т=400К, кристалл (расположенный сверху) имеет температуру в Т=300К, на свободной поверхности задано условие теплоизоляции $\frac{\partial T}{\partial y} = \frac{\partial T}{\partial n} = 0$, где n внешняя нормаль. В начальный момент жидкость предполагается неподвижной с постоянной температурой. Данная задача характеризуется следующими безразмерными числами Прандтля ($Pr = \nu/a$), Грасгофа ($Gr = g\beta\Delta TH^3/\nu^2$ или Рэлея $Ra = Gr \cdot Pr$) и Марангони $Ma = \left(-d\sigma/dT\right)\cdot\left(\left(\rho c_p \Delta TH\right)/\left(\mu\lambda\right)\right)$, где λ коэффициент теплопроводности. При рассмотрении модели с погруженным в расплав вибратором, совершающим вертикальные колебания с амплитудой $A = 0.4$ мм и частотой f =20Гц в соответствии с законом: $\mathrm{y} = \mathrm{A}\sin\left(2\pi f \mathrm{t}\right)$ (рис.2), список безразмерных параметров дополняется безразмерными параметрами: вибрационным числом Рейнольдса $Re_{vibr} = 2\pi fAH / \nu$ и отношением расстояния от кристалла до вибратора к диаметру кристалла (h/d) и размерами вибратора. Расчётная область представляет собой квадрат со стороной 3см. Кристалл имеет диаметр 1см и заглублён в расплав на глубину 1мм, вибратор имеет диаметр 0.8см и толщину 1мм и удаления поверхности вибратора от поверхности кристалла на 5мм, 8мм и 13.5мм (рис.1). В расчетах использовались неравномерные сетки со сгущением вблизи твёрдых стенок и на острых кромках вибратора и кристалла. Для моделирования движения погруженного вибратора использовалась динамическая сетка. Осреднённое вибрационное течение (ОВТ) находилось в процессе осреднения по времени численных решений (Ф) нелинейных уравнений Навье-Стокса по формуле $\Phi_{AVERAGE} = \frac{1}{\Delta T}\int_0^{\Delta T} \Phi dt$. Анализ осреднений результатов расчетов показал, что участок осреднения поля температуры зависит от числа Прандтля и, например, для Pr=7 должен быть не менее 400T_f, где T_f=1/f - период вибраций Одной из трудностей численного моделирования ОВТ с большой частотой является необходимость проводить расчеты с небольшим шагом по времени (не более 0.01 периода колебаний), что требует больших машинных временных затрат. Число Куранта $C = \frac{2\pi fA\Delta t}{h_1}$ и сеточное число Рейнольдса $Re_c = \frac{2\pi fAh_1}{\nu}$ были около 1. При расчётах использовались неявные консервативные схемы. Численный расчет начинался с теплопроводностного режима и проводился до установления стационара в случае отсутствия вибраций или до квази-стационарного режима при вибрационном воздействии, где и анализировались результаты.

2. Результаты моделирования

2.1. Конвективные течения без вибрационного воздействия

Рассмотрим случаи естественной и термокапиллярной конвекции без вибраций и без погруженного вибратора. На рис. 2 показаны результаты расчётов в виде функции тока и изотерм для жидкости с числом Прандтля $\Pr = 7$ для $Ra = 10^5$ (а,б) и $Ra = 10^6$ (в,г). Течение жидкости имеет подъемно-опускной характер с максимумом скорости на оси. Течение ламинарное и максимальные скорости пропорциональны числу Рэлея в степени 1/4. Результаты расчетов показали, что значения числа Рейнольдса, вычисленные по максимальной скорости течения, для чисел Рэлея Ra=10^3, 10^4, 10^5, 10^6, соответственно равны: 0.184, 3.016, 17.436, 66.58. На рис. 3 представлены профили теплового потока $\lambda \cdot (\partial T/\partial y)$ вдоль оси тигля для разных чисел Рэлея (Ra=0, 10^3, 10^4, 10^5, 10^6), которые показывают, что с увеличением числа Рэлея увеличивается по модулю тепловой поток на фронте кристаллизации, то есть около кристалла толщина температурного пограничного слоя уменьшается.



а) б) в) г)

Рис. 2. Функция тока (а,в) и изотермы (б,г)
при $Ra = 10^6, Ma = 0$ (а,б) и $Ra = 0, Ma = 10^5$ (в,г).

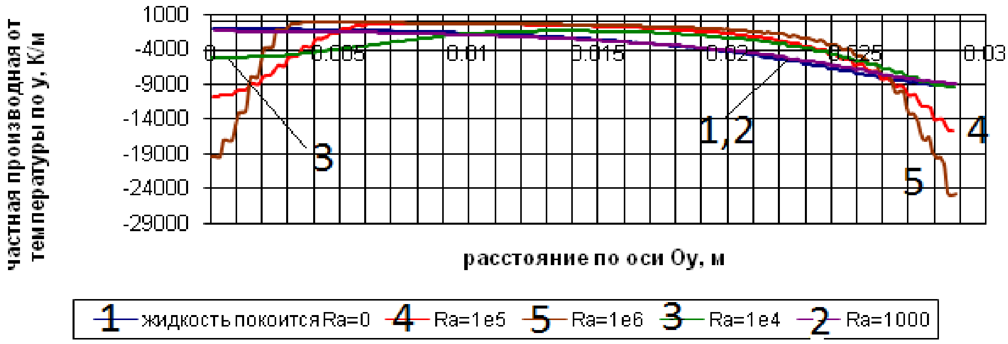


Рис. 3. Профили теплового потока вдоль оси тигля для разных чисел Рэлея (Ra).

Рассмотрим для описанной задачи, влияние термокапиллярной конвекции на течение жидкости и теплоперенос при отсутствии силы тяжести (**g**=0). Для описания термокапиллярной конвекции на горизонтальной свободной поверхности задано условие Марангони (зависимость касательного напряжения сдвига τ от градиента поверхностного натяжения σ): $\tau = \frac{d\sigma}{dT}\nabla_\tau T$ или $\mu\frac{\partial u}{\partial y} = \frac{d\sigma}{dT}\cdot\frac{\partial T}{\partial x}$, v=0, где $\nabla_\tau T$ - проекция градиента температуры на касательную к свободной поверхности, u – горизонтальная компонента скорости на горизонтальной свободной поверхности раздела сред. Данная задача характеризуется безразмерными числами Прандтля (Pr=7) и Марангони $Ma = \left(-d\sigma/dT\right)\cdot\left(\left(\rho c_p \Delta T H\right)/\left(\mu\lambda\right)\right)$.

На рис.2в,г показаны функция тока и изотермы при $Ma = 10^5$ (а, б). При конвекции Марангони наблюдается подъемно-опускное течение с двумя согласованными вихрями, как и при тепловой конвекции, но более интенсивное, чем при таких же значениях числа Рэлея. Течение ламинарное и максимальные скорости пропорциональны числу Марангони в степени 1/2. Результаты расчетов показали, что значения числа Рейнольдса, вычисленные по максимальной скорости течения, для чисел Марангони 10, 10^2, 10^3, 10^4, 10^5, 10^6, соответственно равны: 0.24, 2.47, 31.05, 189.29, 683.71, 2612.43. При естественной конвекции максимум модуля скорости достигается в центре расчётной области под кристаллом, в то время как при термокапиллярной конвекции максимум модуля скорости наблюдается вблизи свободной поверхности.

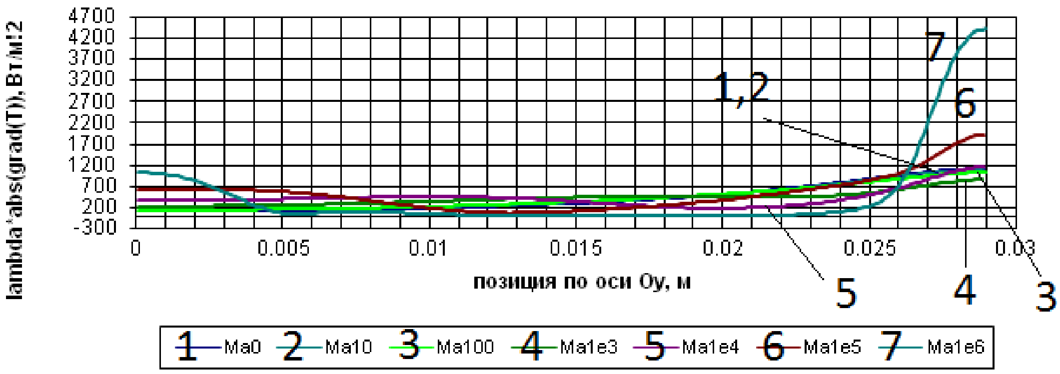


Рис. 4. Изменение числа Нуссельта ($\lambda\cdot\partial T/\partial y$) на вертикальной линии симметрии в зависимости от числа Марангони. (Кристалл расположен при y=2.9см).

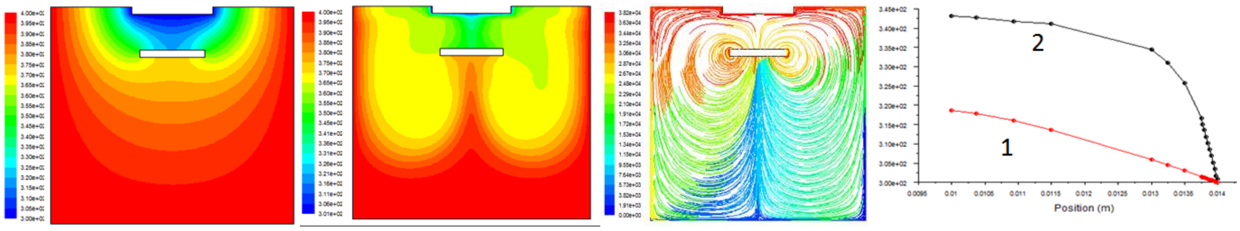
Профили потоков тепла вдоль оси тигля для разных чисел Марангони показаны на рис. 4. Для всех значений числа Марангони безразмерный тепловой поток (число Нуссельта) от числа Марангони в подкристалльной области возрастает по модулю с увеличением числа Ma. Температурный пограничный слой под кристаллом утончается с увеличением числа Марангони, что может оказывать влияние на скорость роста кристалла.

2.2. Течения с поступательными вибрационными воздействиями

2.2.1. Средние значения числа Прандтля (Pr=7)

Рассмотрим, описанную выше модель со следующими безразмерными параметрами: Pr=7, Re_{vibr}=1500, Gr=0, h/d=0.5, (f=20Гц и амплитуде A=0.4мм). Например, данная величина числа Прандтля соответствует расплаву нитрата натрия. На рис. 5 изображены результаты расчётов, в виде осредненных полей температуры, течения и профилей температуры.

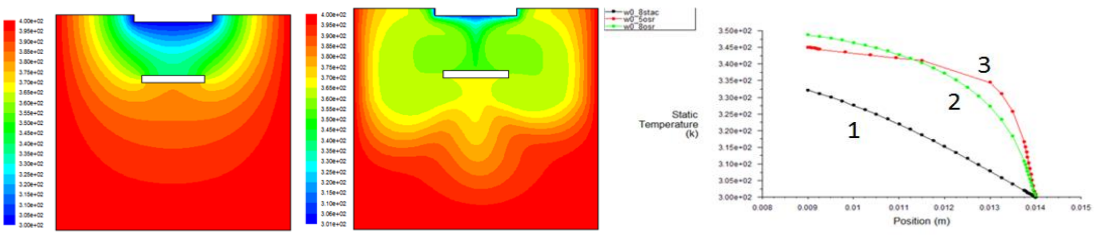
Структуру осредненного течения представлена на рис. 5в. Видно, как вибрирующий погруженный активатор приводит к перемешиванию всего объёма расплава. На рис 5г представлены профили температуры, которые показывают влияние вибрации на температурный пограничный слой и градиент температуры вблизи фронта кристаллизации на примере расплава нитрата натрия (Pr=7; Re_{vibr}=1500; h/d=0.5):



а) б) в) г)

Рис. 5. Изотермы осреднённых полей температур и течения а) – без вибраций, б) с вибрациями в) треки течения, г) профили температуры в центральном вертикальном сечении: 1 - без вибраций, 2 - с вибрацией,

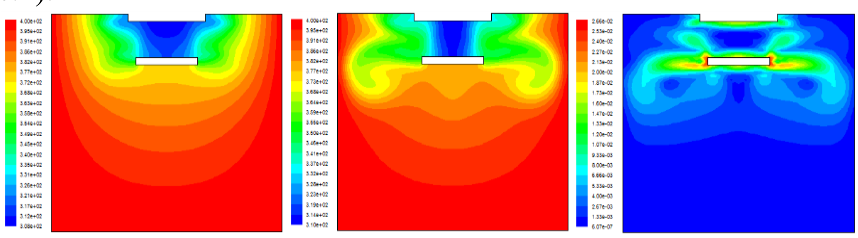
Рассмотрим влияние удалённости вибратора от поверхности кристалла на примере расплава нитрата натрия (Pr=7, Re_{vibr}=1500, Gr=0, h/d=0.8 и h/d=0.5). Из результатов, представленных на рис. 6 следует, что при вибрационном воздействии вблизи кристалла температурный пограничный слой уменьшается. Удаление вибратора от границы (от кристалла) на расстояние h/d=0.8 незначительно уменьшает градиент температуры около кристалла, по сравнению со случаем более близкого расположения вибратора (h/d=0.5) (рис.6в).



а) б) в)

Рис. 6. Изотермы осреднённого поля температур при Pr=7, Gr=0, h/d=0.8, а) – без вибраций, б) с вибрациями Re_{vibr}=1500, в) профили температуры в центральном вертикальном сечении: 1 - без вибраций, 2 - с вибрацией (Re_{vibr}=1500, h/d=0.8), 3 - с вибрациями (Re_{vibr}=1500, h/d=0.5).

Рассмотрим случай совместных гармонических поступательных вибраций кристалла и погруженного вибратора с учетом конвекции. Вибрации кристалла и вибратора осуществляются по единому закону синхронно. Совместное действие вибрации кристалла и погруженного вибратора $\mathrm{Re}_{vibr} = 1500$ без конвекции представлено на рис. 7а (без конвекций и вибраций на рис.1).



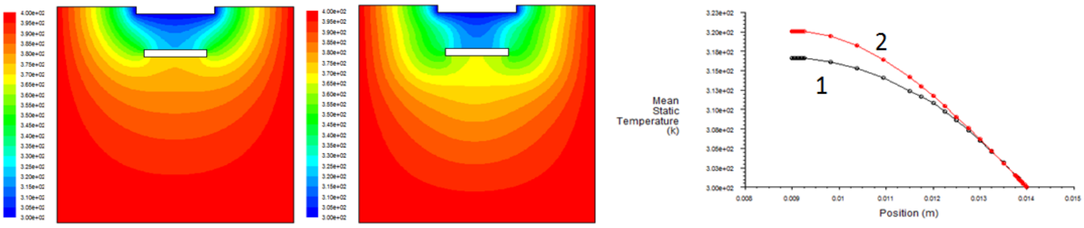
а) б) в)

Рис. 7. Осреднённые поля температур (а,б) и модуля скорости (в) для Pr=7. а) - Re_{vibr}=1500, Ra=0, б), в) - $\mathrm{Re}_{vibr} = 1500$, $Ra = 10^4$.

Совместное действие вибрации кристалла и погруженного вибратора при наличии естественной конвекции $\mathrm{Re}_{vibr} = 1500$, $Ra = 10^4$, Pr=7 представлено на рис.7б,в. Из результатов, представленных на рис.7 можно сделать вывод, что совместные синхронные вибрации кристалла и погруженного вибратора выравнивают температурное поле под кристаллом, а естественная конвекция способствует дополнительному уменьшению толщины температурного пограничного слоя, образованного только вибрациями.

2.2.2. Малые значения Прандтля (Pr=0.1)

Рассмотрим расплав металла со следующими безразмерными параметрами: Pr=0.1, Re_{vibr}=1500, Gr=0, h/d=0.5. Данные числа Прандтля могут соответствовать расплавам металлов и полупроводников. Варианты с конвекцией были рассчитаны, но из-за малого влияния конвекции по сравнению с вибрациями, результаты с конвекцией для данного случая не приводятся. Расстояние от кристалла до вибратора равно радиусу кристалла h=0.5см. На рис.8, представлены осреднённые поля и профили (в) температуры без воздействия вибраций (а) и осреднённое поле температур (б) при вибрационном воздействии на квази-стационаре. Из-за малого числа Прандтля влияние вибраций на температурный пограничный слой несущественно (рис.8).



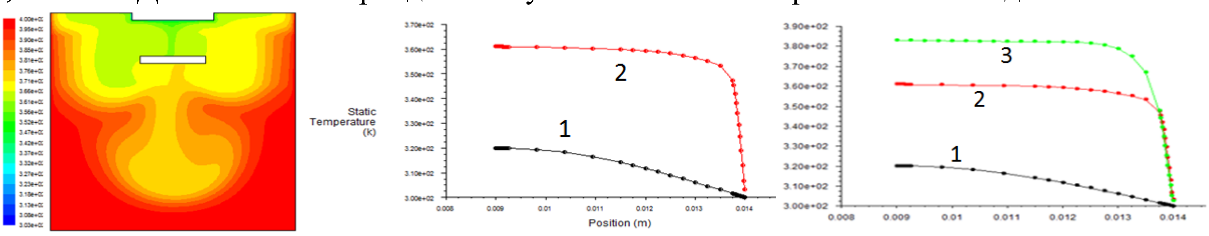
а) б) в)

Рис. 8. Изотермы осреднённого поля температур при Pr=0.1, Gr=0, h/d=0.5, а) – без вибраций, б) с вибрациями (Re_{vibr}=1500), в) профили температуры в центральном вертикальном сечении: 1 - без вибраций, 2 - с вибрациями (Re_{vibr}=1500).

Из профилей температуры, изображенных на рис. 8в) следует, что в непосредственной близости от фронта кристаллизации влияние вибрации на поле температур незначительно. Это объясняется малым числом Прандтля у расплава металла Pr=0.1. Более сильное влияние вибраций на температурный пограничный слой расплавов металлов (полупроводников) с малыми числами Прандтля может сказываться при увеличении амплитуды и частоты вибраций (вибрационного числа Рейнольдса Re_{vibr}) [1].

2.2.3. Большие числа Прандтля (Pr=100)

Рассмотрим жидкость со следующими безразмерными параметрами: Pr=100, Re_{vibr}=1500, Gr=0, h/d=0.5. Данные числа Прандтля могут соответствовать расплавам оксидов.



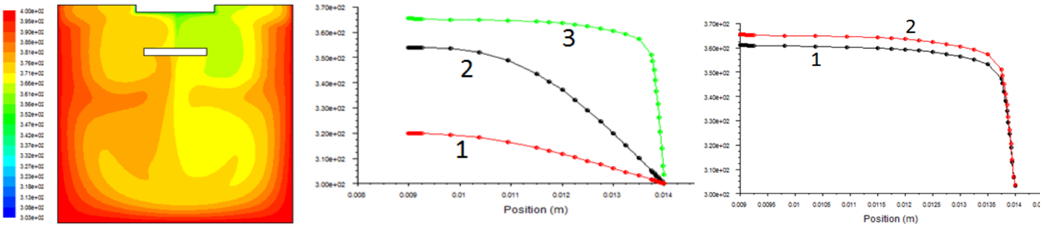
а) б) в)

Рис. 9. а) Изотермы осреднённого поля температур при Pr=100, Gr=0, h/d=0.5, Re_{vibr}=1500, б) профили температуры в центральном вертикальном сечении: 1 - без вибраций, 2 - с вибрациями (Re_{vibr}=1500), в) профили температуры в центральном вертикальном сечении: 1 - без вибраций, 2 - с вибрациями при h/d=0.5, 3 - с вибрациями при h/d=1.35.

Из полученных результатов, представленных на рис.5-9 можно сделать вывод, что при вибрационном воздействии температурный пограничный слой уменьшается, и это проявляется тем сильнее, чем выше число Прандтля.

Результаты о влиянии удалённости вибратора от поверхности кристалла при *Pr*=100, Re_{vibr}=1500, *Gr*=0, h/d=1.35 и h/d=0.5 представлены на рис. 9в. Можно сделать вывод, что для жидкостей с Pr=100 изменение удаленности вибратора от кристалла оказывает меньшее влияние на тепловое поле около кристалла, чем изменение удалённости вибратора для жидкостей с Pr=7 (рис.6в).

Рассмотрим влияние естественной конвекции (g≠0) при *Pr*=100, На рис. 10а показаны осреднённое поле вертикальные профили температур полученные для Pr=100, Re_{vibr}=1500, *Gr*=1000, h/d=0.5, для времени t=600T_f. Проведены численные расчеты с учетом наличия естественной конвекции и без нее, с вибрациями и без вибраций. На рис. 10 б,в приведены профили температур для всех этих случаев. Результаты показывают, что естественная конвекция, также, как и вибрационное воздействие, способствует увеличению градиента температуры вблизи фронта кристаллизации.



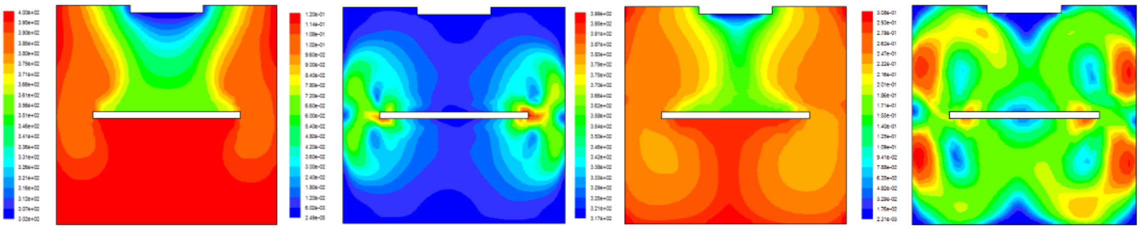
а) б) в)

Рис. 10. Изотермы (а) и профили температуры (б,в) осреднённого поля температур при *Pr*=100, *Gr*=1000, h/d=0.5, Re_{vibr}=1500, б) профили температуры в центральном вертикальном сечении: 1 - без вибраций и конвекции (*Gr*=0, Re_{vibr}=0), 2 – только с конвекцией (*Gr*=1000, Re_{vibr}=0), 3- с вибрациями и конвекцией (*Gr*=1000, Re_{vibr}=1500), в) вертикальные профили температуры при вибрационном воздействии (Re_{vibr}=1500): 1 - без естественной конвекции (*Gr*=0), 2 - с естественной конвекцией (*Gr*=1000).

Следует отметить, что вибрационное воздействие (Re_{vibr}=1500) имеет более сильное влияние на уменьшение толщины температурного пограничного слоя, чем естественная конвекция (*Gr*=1000) (рис.10б). Из полученных результатов (рис.10в) можно сделать вывод, что вибрации являются доминирующим фактором, влияющим на пограничный слой вблизи фронта кристаллизации, а естественная конвекция при Gr=1000 практически не оказывает влияния на градиент температур около фронта кристаллизации.

2.3. Вращательно-качательные вибрации погруженной вибратора

Рассмотрим воздействия на расплав (Pr=7) вращательно-качательных вибраций при отклонении погруженного вибратора на малый угол вокруг оси перпендикулярной плоскости расчётной области и проходящей через точку пересечения диагоналей вибратора.



а) б) в) г)

Рис. 11. Поля температур (а,в) и модулей скорости (б,г) при вращательно-качательных вибрациях (Pr=7, θ=20 Гц) с амплитудами: A =10 градусов (а,б) и A =25 градусов (в,г).

Схема исследуемой области показана на рис 11. Вибратор диаметром 2 см, толщиной 1мм находится на расстоянии 1.45 см от поверхности кристалла по центру расчётной области. Вращательно-качательные совершаются на угол по гармоническому закону: $\varphi = A \cdot \sin\left(2\pi\theta \cdot t\right)$ с различными амплитудами A (радиан) и частотой θ=20 Гц, где φ - угол отклонения вибратора от начального (горизонтального) положения изображённого на рис. 11. Данная задача дополняется безразмерным вибрационным числом Рейнольдса, определяемым в виде $Re_{vibr} = 2\pi\theta A H^2 / \nu$.

Результаты расчётов показали, что при вращательно-качательных вибрационных воздействиях в структуре осреднённого вибрационного течения образуется четыре вихря, которыми также можно изменять структуру течения и поле температур около фронта кристаллизации.

3. Выводы

Для модели метода Чохральского с погруженным вибратором, для разных свойств жидкостей показано уменьшение толщины пограничных слоев при вибрационном воздействии, что подтверждает общую закономерность данного факта [3-5]. Показано, что вращательно-качательные вибрации погруженной пластины, кроме интенсификации течения и перемешивания расплава, воздействуют на осредненное поле температуры и структуру пограничного слоя под кристаллом, что можно использовать в качестве управляющего механизма.

Литература

1. Федюшкин А.И. Гидродинамика и теплообмен при вибрационных воздействиях на расплав в процессах выращивания монокристаллов. / А.И. Федюшкин, К.А. Иванов. - Препринт ИПМех РАН, - № 1085, - Москва, 2014, -107 с.

2. Fedyushkin A. The influence of vibration on hydrodynamics and heat-mass transfer during crystal growth. / Fedyushkin A., Bourago N., Polezhaev V. and Zharikov E. // J. Crystal Growth. 2005. V. 275. - P. e1557-e1563.

3. Fedyushkin A. The gravitation, rotation and vibration - controlling factors of the convection and heat – mass transfer. // Proc. of 4th ICCHMT, Paris, FRANCE. 2005. - P.948-951.

Информация об авторе: Федюшкин Алексей Иванович – к.ф.-м.н, с.н.с., Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, 119526, Москва, Россия,
тел.:+7 (495) 4333497, E-mail fai@ipmnet.ru