

ВЛИЯНИЕ ВИБРАЦИЙ НА КОНВЕКЦИЮ МАРАНГОНИ ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ КРИСТАЛЛОВ ПО МЕТОДУ ЧОХРАЛЬСКОГО

А. И. Федюшкин*, Н. Г. Бураго*

* *ФГБУН Институт проблем механики им. А.Ю.Ишлинского РАН, Москва*

При выращивании кристаллов по методу Чохральского распределение температуры по расплаву нестабильно: наиболее холодная зона расположена вблизи охлаждаемого растущего кристалла, располагающегося над горячим расплавом в печи (см. рис. 1). Из-за нагрева нижней и боковых поверхностей печи, неравномерности распределения температуры и термо-капиллярных эффектов на верхней свободной поверхности происходит постоянное конвективное перемешивание всего расплава. Аналогичное действие может оказывать и концентрационно-капиллярная конвекция из-за сильной зависимости поверхностного натяжения от примесной неоднородности расплава. Такое конвективное движение расплава существенно влияет на распределение примеси в расплаве и, соответственно, влияет на распределение примеси в растущем кристалле. Помимо капиллярных эффектов значительное воздействие на распределение примесей оказывают также режимы вращения тигля и кристалла. Изучению влияния вращения на конвекцию посвящено много опубликованных работ. Кроме этого в последние годы было обращено внимание на еще один эффективный способ воздействия на конвекцию расплава, заключающийся в применении вибраций (см. например [1]). Для более глубокого понимания влияния вибраций на гидродинамику и тепломассоперенос расплава при росте кристаллов необходимо изучать не только воздействие вибраций в отдельности, но также их влияние во взаимодействии с другими типами воздействий (вращение, тепловые, гравитационные, электро-магнитные и тому подобные воздействия). Экспериментальное изучение воздействия вибраций на рост кристаллов выполняется в течение ряда лет под руководством проф. Е. В. Жарикова [2,3]. В статьях [4,5,6] вибрационные потоки изучались численно и показан ряд их закономерностей, в частности, уменьшение толщины пограничных слоев. В настоящей работе представлены некоторые результаты численного моделирования выращивания кристаллов методом Чохральского с учетом вибраций кристалла, термо-гравитационной, термо-капиллярной и вынужденной конвекции, а также вращений кристалла и тигля.

Постановка задачи

Расчетная область для расчета рассматриваемых течений расплава в осесимметричной постановке показана на рис. 1. Роль вибратора играет растущий цилиндр-кристалл. Приняты следующие обозначения: R – внешний радиус тигля, R_c – радиус кристалла, H – вертикальный размер тигля, z – ось симметрии. Скорость роста кристалла и тепловые граничные условия считаются заданными и не зависящими от времени. Вибрации имеют амплитуду, пренебрежимо малую по сравнению с высотой тигля, так что они заданы изменением вертикальной скорости на поверхности кристалла по гармоническому закону $v = A \sin(\omega t)$, где A и ω – амплитуда и частота, соответственно.

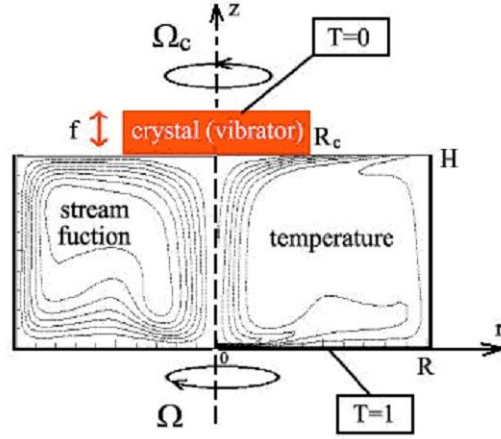


Рис. 1. Расчетная область

В приближении Навье-Стокса-Буссинеска система исходных уравнений имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{u}{r} + \frac{\partial w}{\partial z} &= 0 \\ \frac{du}{dt} - \frac{v^2}{r} &= -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r v_* \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(v_* \frac{\partial u}{\partial z} \right) - v_* \frac{u}{r^2} \\ \frac{dw}{dt} &= -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r v_* \frac{\partial w}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(v_* \frac{\partial w}{\partial z} \right) + g \beta_T (T - T_0) \\ \frac{dv}{dt} - \frac{uv}{r} &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r v_* \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(v_* \frac{\partial v}{\partial z} \right) - v_* \frac{v}{r^2} \\ \rho_0 c_p \frac{dT}{dt} &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) \end{aligned}$$

где $d/dt = \partial/\partial t + u\partial/\partial r + w\partial/\partial z$ - материальная временная производная, u, w, v - радиальная, осевая и азимутальная проекции скорости, T - температура, ρ_0 - плотность при температуре T_0 , p - давление, c_p - изобарическая теплоемкость, v_* - коэффициент кинематической вязкости, λ - коэффициент теплопроводности, g - ускорение силы тяжести, β_T - коэффициент температурного расширения жидкости.

Граничные условия на оси симметрии имеют вид

$$0 \leq z \leq H, r = 0 : u = 0, \partial w / \partial r = 0, v = 0, \partial T / \partial r = 0$$

граничные условия на поверхности кристалла записываются так

$$z = H, 0 \leq r \leq R_c : u = 0, w = W_s + A\omega \sin(\omega t), v = 2\pi r \Omega_c, T = 0$$

На стенках тигля граничные условия таковы

$$z = 0, 0 \leq r \leq R : u = 0, w = W_s + A\omega \sin(\omega t), v = 2\pi r \Omega_c, T = 1$$

На свободной поверхности расплава условия принимались такими

$$z = H, R_c \leq r \leq R : \rho_0 v_* \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{\partial \sigma}{\partial r}, \frac{\partial w}{\partial z} = 0, \frac{\partial v}{\partial z} = 0, \frac{\partial T}{\partial z} = 0 \text{ или } T = \frac{r - R_c}{R - R_c}$$

Здесь W_s - скорость роста кристалла, A и ω - амплитуда и частота вибраций, Ω_c и Ω - частоты вращения кристалла и тигля, R_c и R - радиусы кристалла и тигля, σ - коэффициент поверхностного натяжения.

Формулировка граничных условий определяет степень соответствия математической

модели экспериментальным данным. В общем случае граничные условия могут зависеть от времени. Это пока не применялось в расчетах.

Начальные условия имеют вид:

$$t = 0, 0 \leq r \leq R, 0 \leq z \leq H : u = 0, w = 0, v = 0, T = 0$$

Рассматриваемый процесс определяется следующими параметрами подобия: числом Прандтля $Pr = \rho c_p v_* / \lambda$, числами Рейнольдса $Re_C = \Omega R^2 / v_*$, $Re = W_s R / v_*$, числом Грасгофа $Gr = g \beta \Delta T R^3 / v_*^2$ (или числом Рэлея $Ra = Gr Pr$) и числом Марангони $Mn = \sigma \beta_\sigma R \Delta T / (\rho_0 v_*^2)$. В большинстве случаев эти числа принимали значения: $Pr = 5.43$, Re_Ω и Re не более 1000, $Gr = 0 \div 10^6$, $Ma = 0 \div 500$. Гармонические вибрации кристалла имели амплитуду $A = 100 \mu m$ и частоты $f = \omega / 2\pi = 0 \div 100$ Гц. Скорость роста кристаллов была в пределах $W_s = 0 \div 0.3$ см/час.

Численный метод

Рассмотрим алгоритм решения на примере типичного уравнения конвекции-диффузии

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

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 [7,8].

Характеристики осредненных по времени вибрационных течений, например, некоторой величины f в процессе решения определялись по формулам

$$f_{average} = \frac{1}{t} \int_0^t f dt$$

Дополнительно расчетный шаг по времени выбирался так, чтобы на период колебаний вибратора приходилось по крайней мере 20 шагов по времени. Представленные ниже результаты расчетов осредненных вибрационных течений относятся к тому моменту времени, когда осредненное течение становится квазистационарным, если противное не оговорено.

Результаты расчетов

Для чисто термо-гравитационной конвекции принималось: $Gr=2 \cdot 10^5$, $Pr=5.43$, $H/R=1$, $R_c/R=0.3$. Для конвекции Марангони принято $Mn=500$.

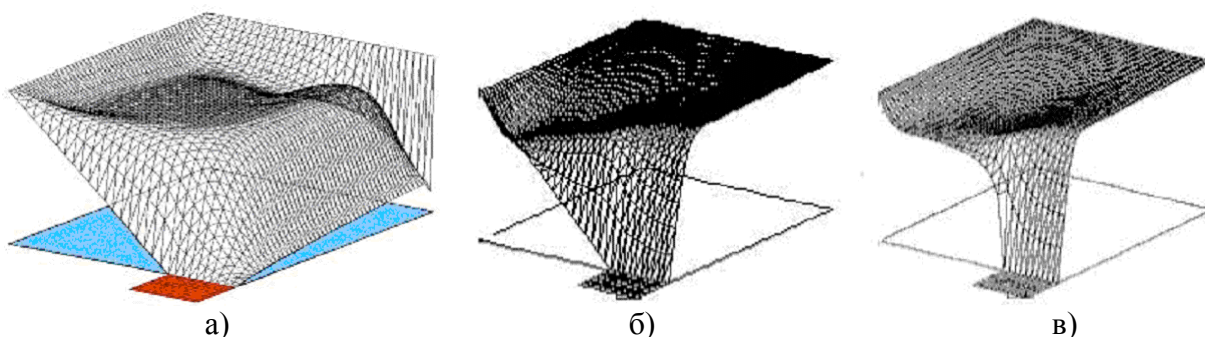


Рис.2. Распределение осредненной температуры: термо-гравитационная конвекция (а), конвекция Марангони ($Mn=500$) с линейным законом изменения температуры поверхности (б) и в случае теплоизолированной поверхности (в)

На рис. 2 показано сравнение осредненных температур для термо-гравитационной конвекции (а) и добавочно для конвекции Марангони (б,в) для двух случаев тепловых условий на свободной границе ($z = H$, $R_c \leq r \leq R$). Отличия видны отчетливо. В случаях конвекции Марангони градиент температуры у кристалла значительно возрастает по сравнению со случаем только термо-гравитационной конвекции.

На рис. 3 показано влияние вибраций на распределение температуры в расплаве для трех величин частоты вибраций ($f=50, 10, 1$ Гц). Видно, что вибрации приводят к интенсификации перемешивания расплава и к сужению температурных пограничных слоев на дне тигля и около кристалла.

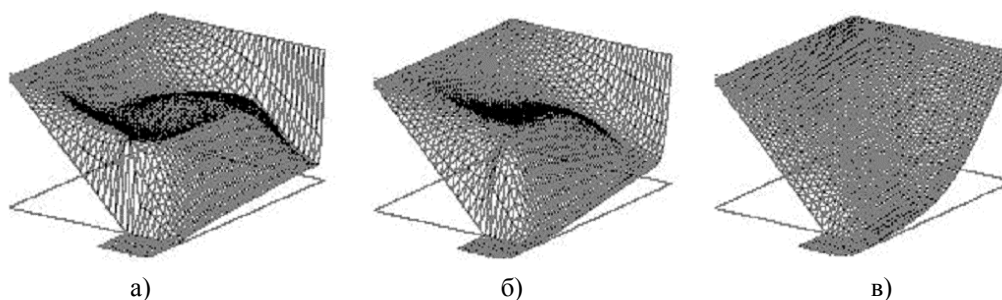


Рис.3. Распределение осредненной температуры при вибрациях кристалла с частотами 50 Гц (а), 10 Гц (б) и 1 Гц (в).

Вибрации охлаждают ядро течения расплава сильнее, чем термо-гравитационная конвекция. Изменения температуры наблюдаются только около стенок тигля. На свободной поверхности распределение осредненной скорости (рис. 4) свидетельствует наличие стоячих волн, что наблюдается в экспериментах [2].

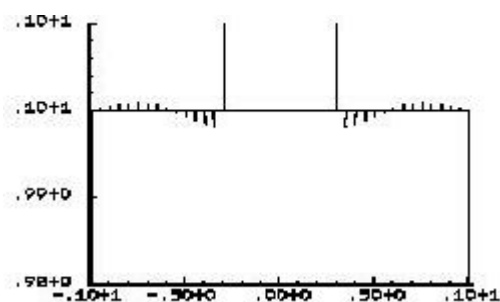


Рис. 4. Осредненные по времени скорости вибрационного течения на свободной поверхности

Представленные результаты показывают, что при частотах порядка 50 Hz вибрации обеспечивают значительно лучшее перемешивание расплава и выравнивание температур в области течения, нежели термо-гравитационная конвекция и конвекция Марангони. Причем этот эффект не связан с гравитацией и может эффективно использоваться как в земных, так и в космических условиях.

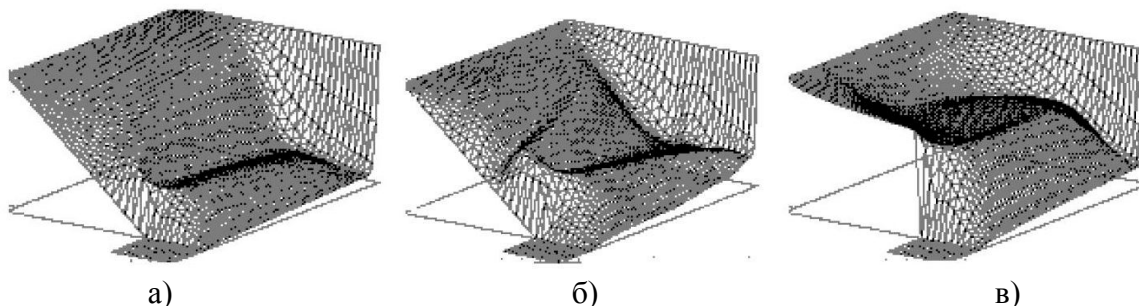


Рис. 5. Распределение температуры в печи при совместном действии вибраций и вращений (а), вибраций, вращений и термогравитационной конвекции (б), вибраций и конвекции Марангони (в).

Для выравнивания распределения температур и интенсификации перемешивания расплава в методе Чохральского часто применяется вращение тигля и растущего кристалла. Для усиления воздействия вращения часто кристалл и печь вращаются в противоположных направлениях или с ускорением. Также как термо-гравитационная конвекция вращение тигля снижает температуру около кристалла, вращение кристалла наоборот повышает температуру около кристалла. Ширина теплового пограничного слоя около поверхности кристалла уменьшается с повышением частоты вращения. Результаты совместного действия вибраций при частоте 50 Гц и одновременных взаимно противоположных вращений тигля и кристалла с вращательными числами Рейнольдса ± 500 показаны на рис. 5а. Диапазон изменения температуры $[0 \div 1]$. Результаты совместного действия вибраций при частоте 50 Гц и

одновременных взаимно противоположных вращений тигля и кристалла с вращательными числами Рейнольдса ± 500 , соответственно, и термо-гравитационной конвекции показаны на рис. 5б. Совместное действие вибраций и конвекции Марангони показано на рис. 5в. Заметим, что на всех рисунках диапазон изменения безразмерной температуры один и тот же $[0 \div 1]$.

Выводы

Показано, что вибрации способны уменьшать толщину пограничных слоев и увеличивать температурные градиенты. Это может интенсифицировать тепло-массообмен около фронта роста кристалла и повысить скорость его роста. Вибрации существенно усиливают перемешивание расплава независимо от наличия силы тяжести. Стоячие волны на свободной поверхности при действии вибраций воспроизведены в численных экспериментах. Установлено также, что вибрации могут ослабить влияние термо-капиллярной конвекции Марангони.

Исследование поддержано грантами РФФИ № 14-01-00741, РНФ № 14-19-01280 и программой РАН ОЭММПУ-12.

Список литературы

1. Gershuni G.Z. and Lubimov D.V. Thermal vibrational convection. John Willey&Sons Ltd, 1998. 357 p.
2. Zharikov E.V., Prihod'ko L.V., Storozhev N.R. Fluid flow formation resulting from forced vibration of a growing crystal. J.Crystal Growth. 1990. V. 99. Pp. 910-914.
3. Fedyushkin A., Bourago N., Polezhaev V., Zharikov E. The influence of vibration on hydrodynamics and heat-mass transfer during crystal growth. J. of Crystal Growth. 2005. V. 275. No. 1-2. Pp. e1557 - e1564.
4. Fedyushkin A.I., Bourago N.G. Influence of vibrations on boundary layers in Bridgman crystal growth. Proceedings of 2nd Pan Pacific Basin Workshop on Microgravity Sciences. Pasadena. 2001, paper CG-1073.
5. Fedyushkin A.I., Bourago N.G., Polezhaev V.I. and Zharikov E.V. Influence of vibration on heat and mass transfer during crystal growth in ground-based and microgravity environments. Proceedings of 2nd Pan Pacific Basin Workshop on Microgravity Sciences. Pasadena. 2001, paper CG-1065.
6. Федюшкин А.И., Иванов К.А. Гидродинамика и теплообмен при вибрационных воздействиях на расплав в процессах выращивания монокристаллов - Препринт № 1085, Москва: ИПМех РАН. 2014. 107 с. (ISBN 978-5-91741-125-5).
7. Бурого Н.Г., Кукуджанов В.Н. Численное решение упругопластических задач методом конечных элементов. М.: ИПМех АН СССР, 1988. Препринт N326, С. 1-63. Второе издание в кн. Вычислительная механика твердого деформируемого тела. Вып. 2. М.: Наука, 1991. С. 78-122.
8. Бурого Н.Г. Вычислительная механика. Электронная книга. 2012. 275 с. DOI: 10.13140/RG.2.1.4610.5047.