

УДК 532, 534-14, 519.63

ВЛИЯНИЕ ВИБРАЦИЙ НА ГИДРОДИНАМИКУ РАСПЛАВА ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ КРИСТАЛЛОВ БЕСКОНТАКТНЫМ МЕТОДОМ БРИДЖМЕНА

Д.В. Любимов¹, Т.П. Любимова², А.О. Иванцов²¹Пермский государственный национальный исследовательский университет, Пермь, Россия²Институт механики сплошных сред УрО РАН, Пермь, Россия

Проведено численное моделирование течений, возникающих в расплаве при выращивании кристалла германия бесконтактным методом Бриджмена. Исследование выполнено в рамках подготовки эксперимента на спутнике ФОТОН. В соответствии с условиями эксперимента математическая модель процесса выращивания кристаллов учитывала отделение кристалла от стенки ампулы и существование дополнительного (технологического) канала. Изучена зависимость интенсивности и структуры течений в расплаве от интенсивности вибраций и формы ампулы. Найдены резонансные частоты. При рассмотрении поведения системы вблизи резонанса определены амплитуды вибраций, при которых вихрь, генерируемый в технологическом канале, достигает фронта кристаллизации.

Ключевые слова: бесконтактный метод Бриджмена, численное моделирование, термовибрационная конвекция, генерация осредненных течений

INFLUENCE OF VIBRATIONS ON HYDRODYNAMICS OF MELT DURING BRIDGMAN CRYSTAL GROWTH

D.V. Lyubimov¹, T.P. Lyubimova² and A.O. Ivantsov²¹Perm State National Research University, Perm, Russia²Institute of Continuous Media Mechanics UB RAS, Perm, Russia

Numerical simulation of melt flows during germanium crystal growth by the detached Bridgman method has been carried out. The study was conducted within the context of preparing an experiment on board the FOTON satellite. To suit experimental conditions, the proposed mathematical model of crystal growth processes takes into account the detachment of the crystal from the crucible wall and the existence of an additional (technological) channel in the crucible. The dependence of the intensity and structure of the melt flow on the vibration intensity and the crucible shape is studied. Resonance frequencies are determined. The analysis of system dynamics in the near-resonance region shows that the vortex generated in the technological channel can reach the crystallization front.

Key words: detached Bridgman method, thermal vibrational convection, average flow generation

1. Введение

В полупроводниковой микроэлектронике для получения монокристаллического материала широко применяется метод Бриджмена. При выращивании кристаллов этим методом исходное сырье помещается в герметичную ампулу и расплавляется. Затем ампула медленно выводится из горячей зоны печи в более холодную, при этом на заостренном дне ампулы образуется кристалл-зародыш, из которого при дальнейшем движении тигля формируется монокристалл.

Развитие современных технологий предъявляет все более высокие требования к качеству монокристаллов. Управляя течениями в расплаве, можно существенно влиять на качество получаемого материала [1]. Одним из наиболее перспективных способов управления процессом кристаллизации является вибрационное воздействие [2–4].

В последние десятилетия проводится большое количество экспериментов по выращиванию кристаллов методом Бриджмена в условиях микрогравитации. На начальном

этапе целью таких исследований было получение материалов со значительно улучшенными свойствами. В настоящее время микрогравитация стала средством, позволяющим более глубоко изучать фундаментальные процессы, сопровождающие рост монокристалла. Приобретенные знания помогают повысить качество кристаллов, создаваемых в земных условиях.

В ходе экспериментов с использованием метода Бриджмена, проведенных в космосе в 70-х годах 20-го века, было обнаружено, что по мере роста может наблюдаться отделение кристалла от стенки ампулы [5]. При этом уменьшаются механические напряжения вблизи стенки ампулы, что положительно влияет на качество монокристалла. Установлено, что кристалл может расти без контакта со стенкой, даже если изначально расплав находился в закрытом контейнере и соприкасался со стенкой [5, 6]. Устойчивость процесса роста кристалла без контакта со стенкой ампулы в условиях микрогравитации исследована в работе [7]. Анализ, проведенный на основе теории устойчивости Ляпунова по методике, использованной ранее в [8], показал, что процесс бесконтактного роста в большинстве случаев устойчив.

В земных условиях отделение кристалла от стенки ампулы при выращивании методом Бриджмена может наблюдаться при создании повышенного давления в ампуле вблизи растущего кристалла. С использованием этой методики проведены эксперименты по получению кристаллов германия [9, 10], при этом в [9] особое внимание уделено изучению качества поверхности созданного кристалла. Показано, что там, где отсутствовал контакт со стенкой ампулы, поверхность кристаллизации искривлена значительно меньше. Обнаруженный эффект объясняется уменьшением радиальной компоненты градиента температуры при отделении кристалла от ампулы, что, в свою очередь, снижает механические напряжения, возникающие вблизи поверхности кристаллизации.

Настоящая статья посвящена изучению течений, возникающих в ходе выращивания кристалла германия бесконтактным методом Бриджмена под действием аксиальных вибраций кристалла. Исследование выполнялось в рамках подготовки эксперимента на спутнике ФОТОН.

2. Постановка задачи

В соответствии с условиями эксперимента математическая модель процесса выращивания должна учитывать отделение кристалла от стенки ампулы и существование дополнительного (технологического) канала (Рис. 1). Размер мениска вблизи поверхности

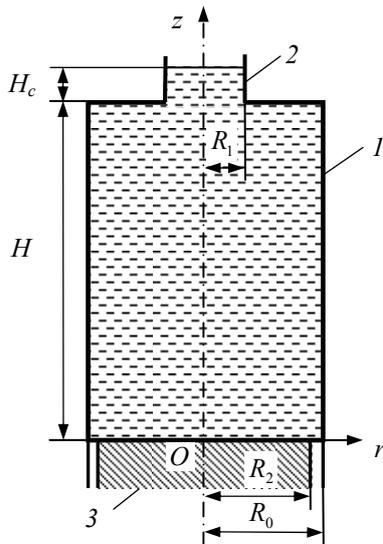


Рис. 1. Схема экспериментальной установки: 1 – ампула; 2 – технологический канал; 3 – кристалл

кристалл–расплав мал ($80 \div 100$ мкм), при этом предполагается, что поверхностные силы не дают расплаву проникать в область между стенкой ампулы и кристаллом, а часть технологического канала заполнена расплавом. Кристалл совершает аксиальные вибрации по гармоническому закону: $\vec{r} = \vec{r}_0 + a\vec{\gamma}\sin(\omega t)$, где $\vec{\gamma}$ — единичный вектор, направленный вдоль оси z , a и ω — амплитуда и частота вибраций, t — текущее время процесса. Объемными силами, возникающими вследствие микрогравитации, можно пренебречь, так как микрогравитационные ускорения ампулы, составляющие $\sim 10^{-6}$ м/с², много меньше вибрационных ускорений кристалла. Несмотря на отсутствие силы тяжести, для удобства описания будем считать, что кристалл находится в «нижней» части ампулы, а технологический канал — в «верхней».

Исследование проводится для частот вибраций $f = 50 \div 400$ Гц ($\omega = 2\pi f$); амплитуда вибраций варьируется в интервале $a = 3 \div 10$ мкм.

Влияние вибраций с такими параметрами эффективно описывается с помощью осредненного подхода [11]. Моделирование на основе неосредненных уравнений в данном случае затруднительно, так как вследствие высокой частоты вибраций необходимо интегрировать уравнения с очень маленьким шагом по времени.

Условиями применимости осредненного подхода являются малость толщины вязкого пограничного слоя δ и амплитуды вибраций по сравнению с характерным размером (в данном случае с радиусом ампулы R_0):

$$\delta = \sqrt{2\nu/\omega} \ll R_0, \quad a \ll R_0, \quad (1)$$

где ν — кинематическая вязкость расплава. Данные условия хорошо выполняются при описанных параметрах вибраций. Следует отметить, что первое из условий (1) — еще одна из причин применения осредненного подхода: в противном случае для корректного учета генерации течения в вязких пограничных слоях потребовалось бы использовать расчетную сетку, имеющую очень высокое разрешение вблизи стенок ампулы и свободных границ расплава.

В соответствии с процедурой осредненного подхода гидродинамические поля скорости и давления разделяются на быстро осциллирующие (пульсационные) \vec{v}_p, p_p и медленно меняющиеся (осредненные по времени) \vec{v}, p компоненты. С помощью метода многих масштабов [12] получаются уравнения и эффективные граничные условия для средних и пульсационных компонент.

Для учета влияния отделения кристалла используется простая модель, основанная на предположении, что в отсутствие вибраций мениск расплава является плоским и горизонтальным. Осредненные деформации мениска и свободной поверхности в технологическом канале не учитываются. Расчеты проведены для следующих геометрических параметров ампулы: $R_0 = 0,75$ см, $H = 4,5$ см. Радиус технологического канала R_1 составлял 0,2 см (за исключением последнего раздела данной работы, где обсуждается влияние формы ампулы на структуру течения). Зазор между кристаллом и расплавом принимался равным $R_0 - R_2 = 1,5 \cdot 10^{-2}$ см, высота заполнения технологического канала — $H_c = 0,2$ см. Физические свойства расплава соответствовали параметрам германия.

3. Пульсационное течение

Первое неравенство из (1) позволяет считать пульсационное течение за пределами вязких пограничных слоев потенциальным (невязким). В этом случае допустимо введение потенциала пульсационной скорости Φ , связанного с \vec{v}_p соотношением $\vec{v}_p = \text{Re}(\nabla\Phi e^{it})$.

Для Φ справедливо уравнение Лапласа:

$$\Delta\Phi = 0, \quad \text{где} \quad \frac{\partial^2\Phi}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial\Phi}{\partial r} \right) = 0. \quad (2)$$

Полагаем, что на твердых границах выполняется условие непроницаемости, на свободных поверхностях в канале и в зазоре кристалл–ампула — динамическое и кинематическое граничные условия, учитывающие диссипацию в пограничном слое [13]:

$$i \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial\xi}{\partial r} \right) = -\text{We} \left[\Phi + i\varepsilon^2 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial\Phi}{\partial r} \right) \right], \quad i\xi = \chi - i\varepsilon^2 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial\chi}{\partial r} \right), \quad (3)$$

где $\chi = (\partial\Phi/\partial z)_{z=0, H+H_c}$, ξ — амплитуда пульсационного отклонения свободной поверхности от невозмущенного положения. Контактная линия свободной поверхности в технологическом канале и контактная линия мениска вблизи кристалла предполагались закрепленными, соответственно, на стенке ампулы и на кристалле.

Уравнения (2), (3) записаны в безразмерной форме, в качестве единиц измерения времени, длины, пульсационной скорости и отклонения свободной поверхности от невозмущенного положения выбраны, соответственно, ω^{-1} , R_0 , $a\omega$, a . Здесь и далее используются цилиндрические координаты r, φ, z . Задача содержит следующие безразмерные параметры: число Вебера $We = \rho\omega^2 R_0^3 / \alpha$, где $\alpha = 570 \text{ г/с}^2$, $\rho = 5,28 \text{ г/см}^3$ — поверхностное натяжение и плотность германия; безразмерную вязкость $\varepsilon^2 = 2\nu / (\omega R_0^2)$, где $\nu = 1,3 \cdot 10^{-3} \text{ см}^2/\text{с}$ — кинематическая вязкость расплава.

Поля потенциалов пульсационной скорости в расплаве, находящемся в ампуле, и скорости в расплаве, находящемся в технологическом канале, находим в виде:

$$\Phi = b_0 + a_0 z + \sum_{n=1}^{\infty} [a_n \exp(k_n(z-H)) + b_n \exp(-k_n z)] J_0(k_n r),$$

$$\Phi = \tilde{b}_0 + \tilde{a}_0 z + \sum_{n=1}^{\infty} [\tilde{a}_n \exp(\tilde{k}_n(z-(H+H_c))) + \tilde{b}_n \exp(\tilde{k}_n(H-z))] J_0(\tilde{k}_n r),$$

где спектр k_n определяется из уравнения: $J_1(k_n) = 0$, $\tilde{k}_n = k_n / R_1$. Коэффициенты $a_n, b_n, \tilde{a}_n, \tilde{b}_n$ вычислялись с помощью метода коллокаций. Система линейных уравнений для коэффициентов получалась из требования выполнения условий сращивания решений и граничных условий на кристалле, в зазоре между кристаллом и стенкой ампулы, на верхней границе ампулы и на свободной поверхности в технологическом канале.

Поскольку в основе вычислений лежали уравнения, записанные в безразмерной форме, то полученные результаты приводятся далее также в безразмерных переменных. Однако обсуждение результатов, для удобства сравнения с экспериментом, осуществляется в размерных величинах.

При решении пульсационной задачи, вследствие малого размера мениска между кристаллом и стенкой ампулы, необходимо использовать достаточно большое количество

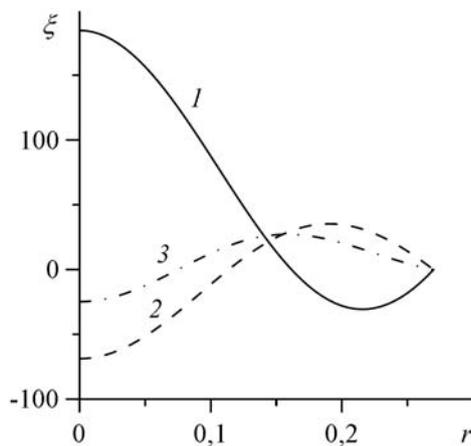


Рис. 2. Форма пульсационных отклонений свободной поверхности в технологическом канале при различных значениях частоты вибраций f , Гц: 180 ($We = 5,0 \cdot 10^3$, $\varepsilon = 2,0 \cdot 10^{-3}$) (кривая 1); 220 ($We = 7,5 \cdot 10^3$, $\varepsilon = 1,8 \cdot 10^{-3}$) (2); 300 ($We = 1,39 \cdot 10^4$, $\varepsilon = 1,6 \cdot 10^{-3}$) (3)

точек коллокации. Основные расчеты проводились с числом точек коллокации 400 на горизонтальных границах ампулы и 50 точек на границах канала; тестовые расчеты выполнялись и для других наборов точек.

Результаты вычислений показывают, что вибрации кристалла приводят к возбуждению колебаний свободной поверхности в технологическом канале и в зазоре между кристаллом и стенкой ампулы. На свободной поверхности расплава в технологическом канале образуются первая (кривая 1) или вторая (кривые 2, 3) осесимметричные моды колебаний (Рис. 2).

Зависимость амплитуды вынужденных колебаний свободной поверхности в технологическом канале от частоты вибраций показывает наличие резонансов в системе (Рис. 3). Для значений параметров, использованных в расчетах, частота первой моды собственных колебаний равнялась 190 Гц, частота второй моды — 400 Гц. При переходе через резонанс фаза

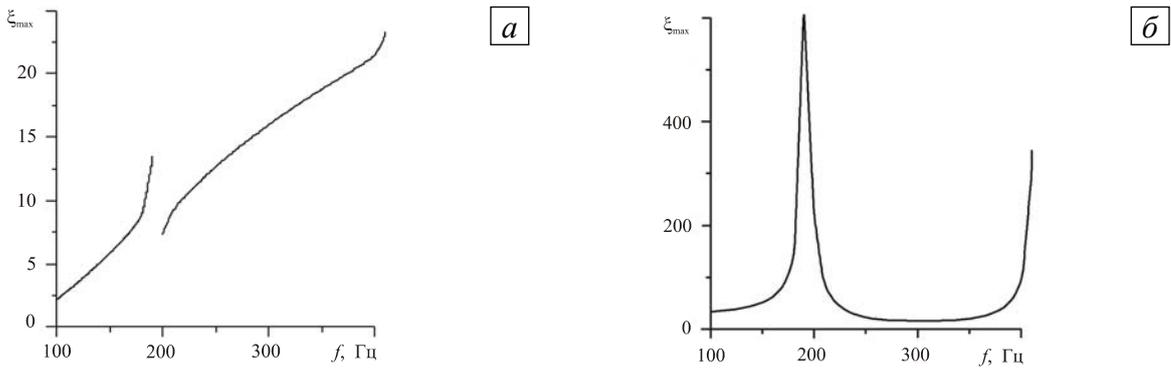


Рис. 3. Максимальные отклонения свободных поверхностей в зависимости от частоты вибраций вблизи мениска (а) и в технологическом канале (б)

колебаний меняется на π (Рис. 2). На рисунке также видно, что в непосредственной близости к резонансу значение амплитуды колебаний свободной поверхности велико, поэтому следует учитывать нелинейные эффекты. Однако в данной работе при решении задачи пульсационного течения нелинейные эффекты считались пренебрежимо малыми.

В силу малости размера области отрыва кристалла частоты собственных колебаний свободной поверхности в этой области много больше частот собственных колебаний свободной поверхности в верхнем технологическом канале. В этой связи на свободной поверхности в зазоре между кристаллом и стенкой ампулы возбуждается только первая мода колебаний. Амплитуда колебаний поверхности в целом растет с увеличением частоты, однако обращает на себя внимание наличие разрыва (Рис. 3). Его происхождение связано с тем, что колебания свободной поверхности вблизи кристалла обусловлены двумя причинами: во-первых, колебаниями самого кристалла в силу того, что жидкость прикреплена к краю кристалла; во-вторых, влиянием интенсивных колебаний свободной поверхности в технологическом канале. Как отмечалось выше, при переходе через резонансную частоту фаза последних меняется на π . В результате при частотах ниже резонансной воздействие колебаний в технологическом канале приводит к усилению колебаний в области отрыва, а при частотах выше резонансной — к ослаблению.

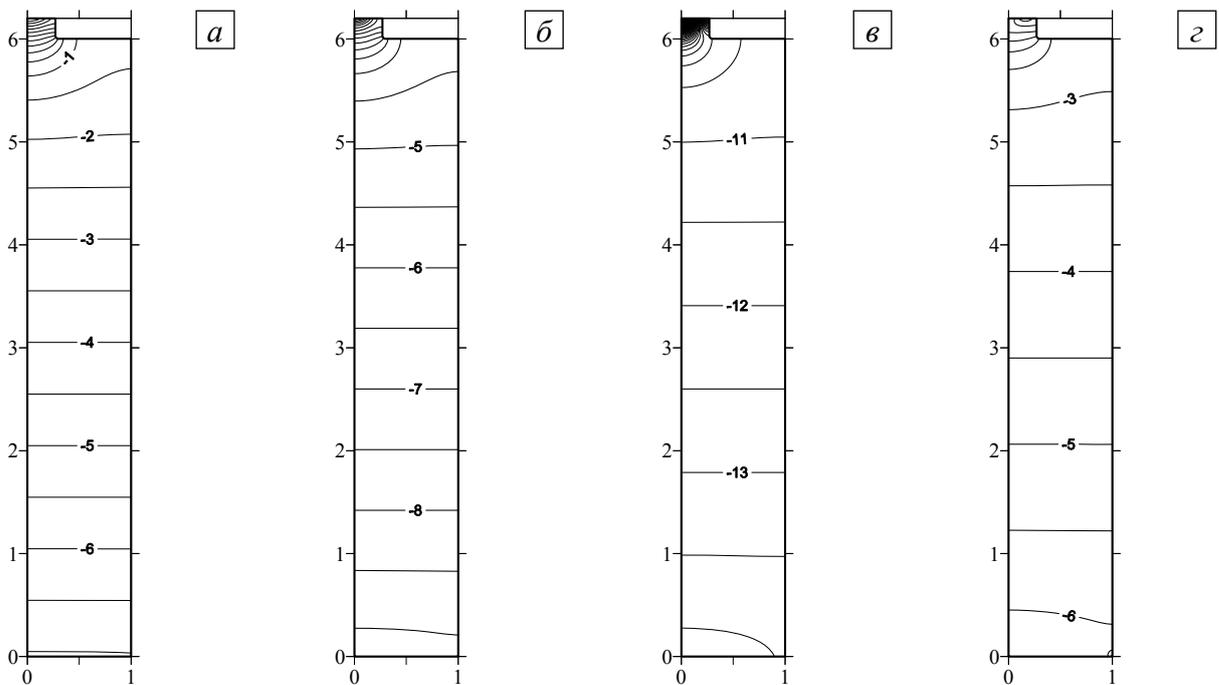


Рис. 4. Изолинии потенциала пульсационной скорости Φ при частоте вибраций f , Гц: 50 ($We = 0,38 \cdot 10^3$, $\varepsilon = 3,8 \cdot 10^{-3}$) (а); 150 ($We = 3,5 \cdot 10^3$, $\varepsilon = 2,2 \cdot 10^{-3}$) (б); 190 ($We = 5,6 \cdot 10^3$, $\varepsilon = 2,0 \cdot 10^{-3}$) (в); 300 ($We = 1,39 \cdot 10^4$, $\varepsilon = 1,6 \cdot 10^{-3}$) (г)

Полученные изолинии потенциала скорости показаны на рисунке 4. Как видно, в центральной части ампулы поле скорости однородно, а вблизи ее верхней границы и в технологическом канале наблюдаются значительные неоднородности поля. Отделение кристалла от стенки ампулы приводит к искривлению изолиний потенциала в нижней части ампулы.

4. Осредненное течение. Изотермический случай

Средние поля определялись численно в предположении осевой симметрии решения. Начнем исследование осредненных течений с изучения ситуации, когда температура расплава одинакова во всем объеме ампулы. Уравнение осредненного движения в безразмерной форме запишем как

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{v}}}{\partial t} + (\bar{\mathbf{v}} \nabla) \bar{\mathbf{v}} = -\nabla p + \Delta \bar{\mathbf{v}}, \quad \operatorname{div} \bar{\mathbf{v}} = 0. \quad (4)$$

В качестве единиц измерения длины, времени, скорости, давления выбираем следующие величины: R_0 , R_0^2/ν , ν/R_0 , $\rho\nu^2/R_0^2$.

Для описания осредненной динамики системы вводим функцию тока ψ и завихренность осредненного течения $\Omega = \operatorname{rot}_\varphi \bar{\mathbf{v}}$: $v_z = -\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r}$, $v_r = \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z}$, $\Omega = \frac{\partial v_z}{\partial r} - \frac{\partial v_r}{\partial z}$.

Уравнение (4) в терминах ψ и Ω перепишем в виде:

$$\frac{\partial \Omega}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial \Omega}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial \psi}{\partial z} \Omega - \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \frac{\partial \Omega}{\partial z} = \frac{\partial^2 \Omega}{\partial z^2} + \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial (r\Omega)}{\partial r} \right), \quad \frac{1}{r} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) = -\Omega.$$

Влияние генерации осредненного течения в вязких пограничных слоях учитываем с помощью эффективных граничных условий. Для фронта кристаллизации и стенок ампулы эффективные граничные условия имеют вид [11, 14]:

– на вертикальных стенках ампулы ($r=1$, $0 \leq z \leq \tilde{H}$) и канала ($r=\tilde{R}_1$, $\tilde{H} \leq z \leq \tilde{H} + \tilde{H}_c$):

$$\psi = 0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial r} = \operatorname{Re}_p \left\{ \frac{3}{4} \Re \left[(1+i) \frac{\partial \Phi}{\partial z} \frac{\partial^2 \Phi^*}{\partial z^2} \right] \right\}; \quad (5)$$

– на верхней стенке ампулы ($z=\tilde{H}$, $\tilde{R}_1 \leq r \leq 1$) и на поверхности кристалла ($z=0$, $0 < r < \tilde{R}_2$):

$$\psi = 0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial z} = -\operatorname{Re}_p \left\{ \frac{3}{4} r \Re \left[(1+i) \frac{\partial \Phi}{\partial r} \frac{\partial^2 \Phi^*}{\partial r^2} \right] + \frac{1}{2} \left| \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right|^2 \right\}. \quad (6)$$

Здесь \tilde{H} , \tilde{H}_c , \tilde{R}_1 , \tilde{R}_2 — безразмерные параметры ампулы, соответствующие H , H_c , R_1 , R_2 ; $\operatorname{Re}_p = a^2 \omega / \nu$ — вибрационное число Рейнольдса; \Re обозначает операцию взятия действительной части комплексного числа; звездочкой обозначена операция комплексного сопряжения.

На свободной поверхности: в технологическом канале ($z=\tilde{H} + \tilde{H}_c$, $0 < r < \tilde{R}_1$) и мениске между кристаллом и стенкой ампулы ($z=0$, $\tilde{R}_2 < r < 1$) граничные условия запишем в виде [11]:

$$\psi = 0, \quad \Omega = \operatorname{Re}_p \Re \left\{ -i \frac{\partial \xi}{\partial r} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial \Phi^*}{\partial r} + 2 \frac{\partial^2 \Phi^*}{\partial r^2} \right] \right\}. \quad (7)$$

Для численного решения осредненной задачи использовался метод конечных объемов [15]. Расчетная область делилась на конечное число контрольных объемов. В центре

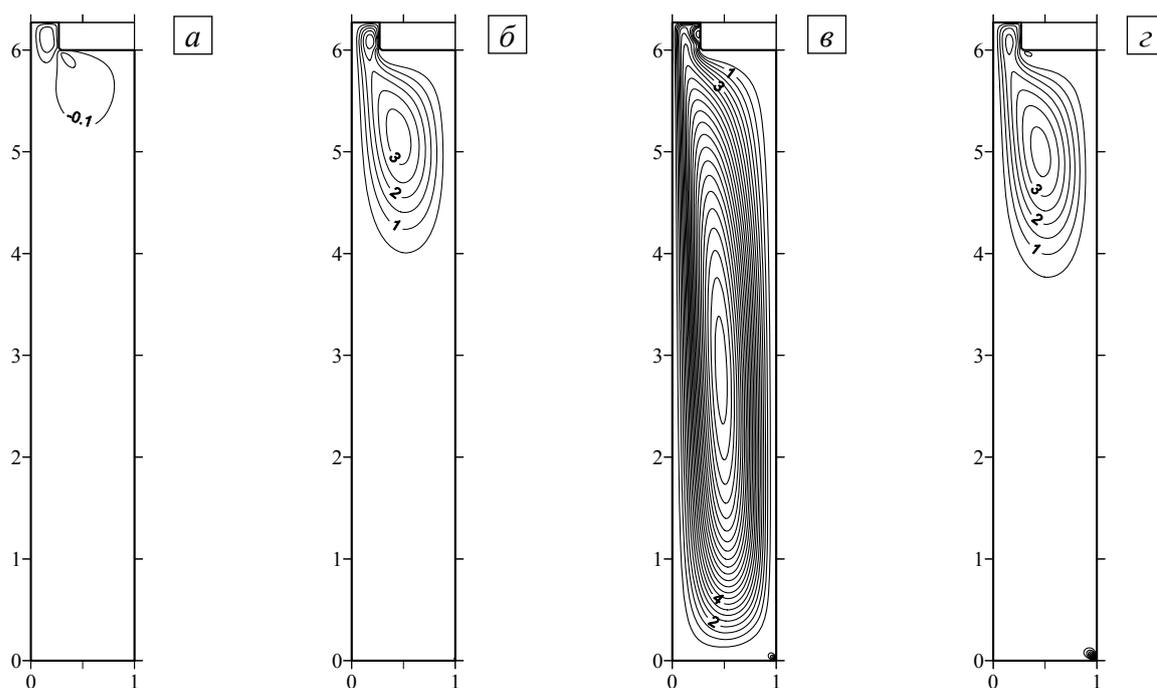


Рис. 5. Изолинии функции тока (изотермический случай) при различной частоте вибраций f , Гц: 50 при $Re_p = 0,24$ (а); 150 при $Re_p = 0,72$ (б); 190 при $Re_p = 0,92$ (в); 300 при $Re_p = 1,45$ (г); шаг изолиний – 0,5

каждого контрольного объема на основе интегральной формы уравнений сохранения вычислялось значение переменной. Поверхностные и объемные интегралы аппроксимировались с помощью конечных разностей второго порядка точности. Вычисления осуществлялись на однородной сетке, имеющей 201×1255 узлов. Уравнение Пуассона для функции тока решалось неявно методом обобщенных минимальных невязок, реализованным в библиотеке SPARSKIT [16]. Тестовые расчеты, проведенные на сетках других размеров, в том числе на неоднородной сетке, сгущающейся к мениску, показали хорошее совпадение вычисленных результатов с результатами, полученными на однородной сетке указанной выше размерности. Амплитуда вибраций принималась равной 10 мкм.

Изолинии функции тока осредненного течения приведены на рисунке 5. На низких частотах вибраций течение в верхней части ампулы представляет собой два вихря с противоположными знаками завихренности (Рис. 5, а). При увеличении частоты вибраций интенсивность течения в канале возрастает, образующийся в результате вихрь распространяется за пределы канала. При этом интенсивность вихря, расположенного вблизи верхней границы ампулы, уменьшается (Рис. 5, б). Осредненное течение около кристалла имеет форму локализованного вблизи мениска вихря. С ростом частоты или амплитуды вибраций его интенсивность увеличивается. При частоте вибраций, близкой к резонансной, интенсивность верхнего вихря возрастает так, что вихрь может достичь нижней границы ампулы и значительно повлиять на рост кристалла (Рис. 5, в). Выше частоты первого резонанса интенсивность шликтинговского вихря в верхней части ампулы уменьшается, на частоте порядка 300 Гц наблюдается минимум интенсивности осредненного течения в верхней части ампулы. (Рис. 5, г).

5. Осредненное течение. Неизотермический случай

Неоднородность температуры расплава приводит к появлению двух дополнительных механизмов генерации осредненного течения: термовибрационной конвекции и термокапиллярной конвекции. Считаем, что изменения плотности расплава, вызванные неоднородностью температуры, малы. С учетом этого уравнения осредненного неизотермического течения можно записать в виде [11]:

$$\frac{\partial \Omega}{\partial t} + J\left(\psi, \frac{\Omega}{r}\right) = \frac{\partial^2 \Omega}{\partial z^2} + \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial (r\Omega)}{\partial r} \right) + \frac{Ra_v}{Pr} J(T, E),$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{r} J(\psi, T) = \frac{1}{Pr} \left[\frac{\partial^2 \Omega}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) \right],$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) = -\Omega, \quad J(u, v) = \frac{\partial u}{\partial z} \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{\partial u}{\partial r} \frac{\partial v}{\partial z}.$$

Здесь $Ra_v = \beta \theta (a\omega R_0)^2 / (4\nu\chi)$ — вибрационное число Рейля (β — коэффициент объемного расширения, θ — характерный перепад температур в ампуле, χ — температуропроводность); $Pr = \nu/\chi$ — число Прандтля; E — энергия пульсационного течения, которая вычисляется по формуле: $E = \frac{\partial \Phi}{\partial r} \frac{\partial \Phi^*}{\partial r} + \frac{\partial \Phi}{\partial z} \frac{\partial \Phi^*}{\partial z}$.

В соответствии с условиями эксперимента температуру кристалла и твердых границ ампулы задаем формулой $T = \text{th} az$, где $a = 0,4$. Свободные поверхности считаем теплоизолированными. Эффективное граничное условие для завихренности на свободных поверхностях расплава (7) с учетом термокапиллярной конвекции перепишем в виде: $\Omega = -\frac{Ma}{Pr} \frac{\partial T}{\partial r} + Re_p \Re \left\{ -i \frac{\partial \xi}{\partial r} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial \Phi^*}{\partial r} + 2 \frac{\partial^2 \Phi^*}{\partial r^2} \right] \right\}$, где $Ma = \alpha_T \theta R_0 / (\nu r \chi)$ — число Марангони ($\alpha_T = \partial \alpha / \partial T$). Функция тока должна удовлетворять граничным условиям (5), (6), учитывающим генерацию осредненных течений вблизи твердых границ, и условиям на оси симметрии.

Коэффициент объемного расширения и температуропроводность германия равны: $\beta = 0,97 \cdot 10^{-4} \text{ 1/K}$ и $\chi = 0,21 \text{ см}^2/\text{с}$. В ходе моделирования предполагалось, что характерный перепад температур в ампуле θ составляет 100 К, $\alpha_T = -0,06 \text{ г/(K} \cdot \text{с}^2)$. При таких

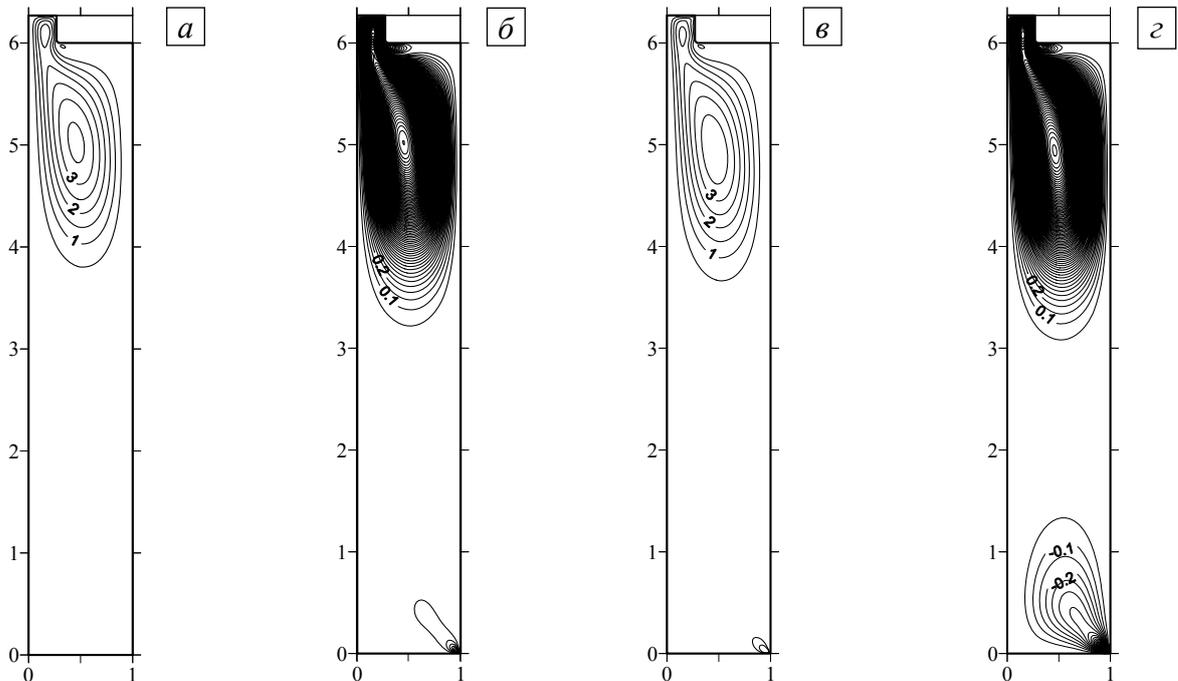


Рис. 6. Изолинии функции тока (неизотермический случай) при частоте вибраций f , Гц: 150 при $Re_p = 0,72$, $Ra_v = 4,4$ (а, б); 300 при $Re_p = 1,45$, $Ra_v = 17,8$ (в, г); шаг изолиний 0,5 (а, в); 0,05 – (б, г)

параметрах $Ma = -3,1 \cdot 10^3$, $Pr = 6,2 \cdot 10^{-3}$. Амплитуда вибраций, как и в предыдущем разделе, принималась равной 10 мкм.

Вследствие конвекции Марангони в технологическом канале образуется вихрь малой интенсивности. Поскольку радиус канала значительно меньше радиуса ампулы, то неоднородность температуры свободной поверхности невелика. Течение около кристалла имеет форму локализованного вблизи мениска вихря.

Термовибрационная конвекция приводит к возникновению двух вихрей: в верхней части ампулы и вблизи кристалла. Интенсивность этих вихрей значительно меньше интенсивности течения, возникающего в результате шлихтинговской и поверхностно-волновой генераций.

На рисунке 6 приведены решения осредненной задачи с учетом термовибрационной и термокапиллярной конвекции, шлихтинговской генерации и генерации осредненной завихренности вблизи свободной поверхности. Вблизи кристалла, в отличие от изотермического случая, наблюдается вихрь, интенсивность которого возрастает при увеличении частоты вибраций. Конвекция Марангони приводит к небольшому усилению течения в верхней части ампулы. Конвективные и вибрационные течения слабо влияют на поле температуры расплава в ампуле.

6. Влияние параметров ампулы и интенсивности вибраций на течения в расплаве

Расчеты показывают, что значительный вклад в осредненное течение дает генерация завихренности в вязких пограничных слоях около стенок ампулы. Вследствие этого представляется актуальным исследование связи интенсивности и структуры течения расплава с геометрией ампулы.

Рассматривалось влияние сглаживания угла между верхней стенкой ампулы и технологическим каналом на течения в расплаве. Сглаживание производилось путем срезания части стенки ампулы под углом 45° к вертикали. Численное исследование показало, что сглаживание угла приводит к появлению одного или нескольких дополнительных вихрей вблизи угла. В результате интенсивность основного вихря, появляющегося вследствие поверхностно-волновой генерации осредненного течения вблизи свободной верхней поверхности, несколько уменьшается, структура и интенсивность течения вблизи мениска при этом практически не меняются.

Изучалось течение расплава при уменьшенном в 2 раза радиусе технологического канала ($R_1 = 0,1$ см). При этом наблюдался сдвиг частот собственных колебаний, а именно, первому резонансу стала отвечать частота вибраций 550 Гц. Установлено, что, как и в случае $R_1 = 0,2$ см, при переходе через резонанс фаза колебаний верхней поверхности изменяется на π , что обуславливает резкое изменение амплитуды колебаний свободной поверхности вблизи кристалла. Формы пульсационных отклонений свободных поверхностей при $R_1 = 0,1$ см качественно не меняются в рассматриваемом интервале частот ($f = 50 \div 400$ Гц). На свободных поверхностях возбуждаются первые осесимметричные моды колебаний. Уменьшение радиуса технологического канала приводит к возрастанию интенсивности пульсационного течения вблизи свободной поверхности канала. В результате при $R_1 = 0,1$ см интенсивность осредненного течения довольно высока даже при малых частотах вибраций.

Уменьшение амплитуды вибраций приводит к значительному снижению интенсивности осредненного течения, так как его генерация пропорциональна квадрату амплитуды вибраций (см. (5)–(7)). На рисунке 7 представлены численные результаты, иллюстрирующие зависимость интенсивности и структуры среднего течения от амплитуды вибраций для узкого канала ($R_1 = 0,1$ см).

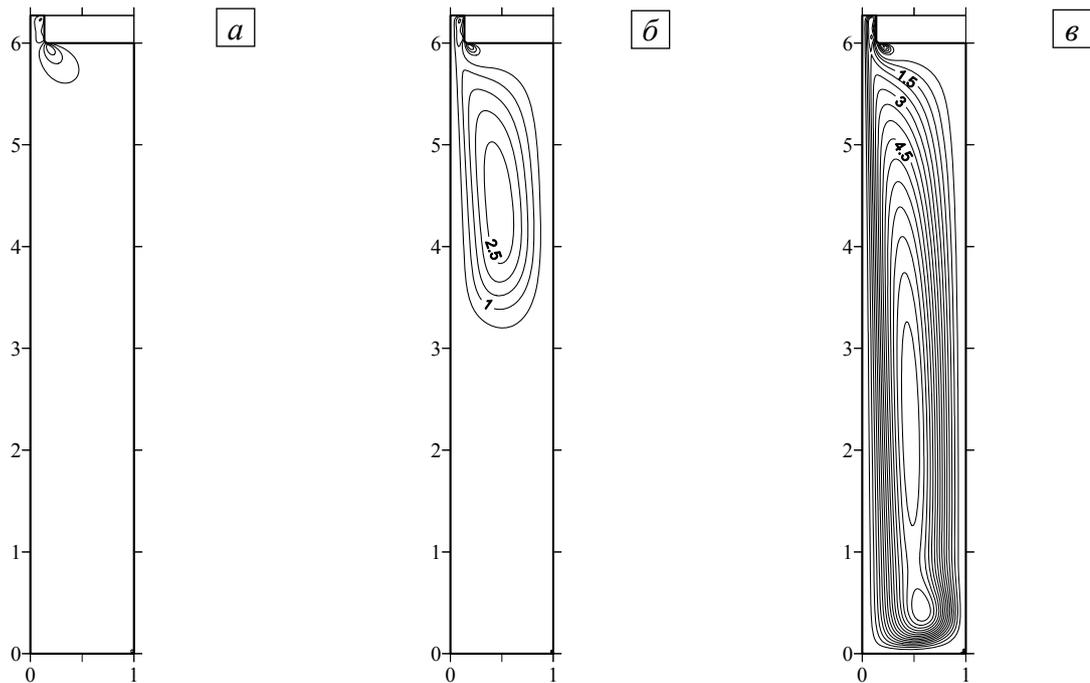


Рис. 7. Изолинии функции тока при частоте 200 Гц и различных значениях амплитуды вибраций a , мкм: $Re_p = 8,7 \cdot 10^{-2}$, $Ra_v = 0,71$ (а); $Re_p = 0,24$, $Ra_v = 1,97$ (б); $Re_p = 0,47$, $Ra_v = 3,7$ (в); радиус технологического канала – 0,1 см, $We = 6,2 \cdot 10^3$, $\varepsilon = 1,9 \cdot 10^{-3}$; шаг изолиний – 0,5

7. Заключение

Проведено численное моделирование течений, возникающих в ходе выращивания кристалла германия бесконтактным методом Бриджмена под действием аксиальных вибраций кристалла в условиях микрогравитации. Вибрации кристалла приводят к возбуждению колебаний свободной поверхности в верхнем технологическом канале и в зазоре между кристаллом и стенкой ампулы. При исследовании зависимости амплитуды вынужденных колебаний свободной поверхности в технологическом канале от частоты вибраций установлено наличие резонансов в системе. Для значений параметров, использованных при вычислениях, первый резонанс наблюдается при частоте 190 Гц, частота второго резонанса близка к 400 Гц. При переходе через резонанс фаза колебаний свободной поверхности в технологическом канале меняется на π . Амплитуда колебаний свободной поверхности вблизи мениска возрастает при увеличении частоты вибраций.

Пульсационное течение расплава приводит к генерации осредненного течения в пограничных слоях вблизи свободных поверхностей и твердых стенок. Проявление генерации особенно заметно в верхнем технологическом канале, где высоки градиенты пульсационной скорости. Вследствие этого течение сконцентрировано в верхней части ампулы. Вблизи кристалла при малой интенсивности вибраций течение возникает благодаря конвекции Марангони и имеет форму локализованного вблизи мениска вихря. При увеличении интенсивности вибраций, вследствие развития термовибрационной конвекции, становится заметным вихрь, охватывающий всю нижнюю часть расплава. Структура течения расплава при частотах вибраций близких к резонансу определяется шлихтинговской генерацией. Интенсивность верхнего вихря сильно возрастает, и он достигает нижней границы ампулы. Уменьшение амплитуды вибраций приводит к снижению интенсивности осредненного течения, его структура при этом качественно не меняется. Сглаживание угла между технологическим каналом и верхней стенкой ампулы приводит к снижению интенсивности течения. Уменьшение радиуса технологического канала приводит

к смещению резонансных частот, в частности, при $R_1 = 0,1$ см первый резонанс наблюдается при частоте вибраций 550 Гц, кроме того, интенсивность пульсационного течения в верхней части ампулы возрастает; вследствие этого осредненное течение расплава также усиливается.

Литература

1. Любимова Т.П., Файзрахманова И.С. Численное моделирование влияния магнитного поля на процесс выращивания кристаллов вертикальным методом Бриджмена // Вычисл. мех. сплош. сред. – 2008. – Т. 1, № 3. – С. 85-95.
2. Мельков А.Ю., Зиновьев А.Ю., Романенков М.В., Романенкова Л.В., Аветисов И.Х., Жариков Е.В. Рост монокристаллов теллурида свинца методом Бриджмена при низкочастотном вибрационном воздействии на расплав // Успехи в химии и химической технологии. Сб. научн. трудов. – М.: РХТУ, 2003. – Т. 17. – С. 66-80.
3. Любимов Д.В., Любимова Т.П., Паршакова Я.Н., Ру Б., Чунг-Вен Лан, Ван-Чин Ю. Влияние высокочастотных вибраций на направленную кристаллизацию бинарных сплавов // Поверхность. – 2009. – № 2. – С. 43-48.
4. Любимова Т.П., Паршакова Я.Н. Влияние вращательных вибраций на течения и тепломассообмен при выращивании кристаллов германия вертикальным методом Бриджмена // Вычисл. мех. сплош. сред. – 2008. – Т. 1, № 1. – С. 57-67.
5. Regel L.L., Wilcox W.R. A review of detached solidification in microgravity // Microgravity Sci. Technol. – 1998. – V. 11, N. 4 – P. 152-166.
6. Benz K.W., Dold P. Crystal growth under microgravity: present results and future prospects towards the International Space Station // Journal of Crystal Growth. – 2002. – V. 237-239, Part 3. – P. 1638-1645.
7. Bizet L., Duffar T. Contribution to the stability analysis of the dewetted Bridgman growth under microgravity conditions // Cryst. Res. Technol. – 2004. – V. 39, N. 6. – P. 491-500.
8. Tatarchenko V.A. Shaped crystal growth. – Dordrecht; Boston: Kluwer, 1993. – 287 p.
9. Pätzold O., Jenkner K., Scholz S., Cröll A. Detached growth behaviour of 2-in germanium crystals // J. of Crystal Growth. – 2005. – V. 277, N. 1-4. – P. 37-43.
10. Palosz W., Volz M.P., Cobb S., Motakef S., Szofran F.R. Detached growth of germanium by directional solidification // J. of Crystal Growth. – 2005. – V. 277, N. 1-4. – P. 124-132.
11. Gershuni G.Z., Lyubimov D.V. Thermal vibrational convection. – John Wiley & Sons, 1998. – 358 p.
12. Найфе А. Введение в методы возмущений. – М.: Мир, 1984. – 535 с.
13. Рувинский К.Д., Фрейдман Г.И. Квазипотенциальное приближение для описания нелинейных гравитационно-капиллярных волн на поверхности вязкой жидкости. – Горький: ИПФ, 1988. – 809 с.
14. Ниборг В. Акустические течения // Физическая акустика / Под ред. У. Мэзона, – М.: Мир, 1969. – Т. 2, Часть Б. – С. 302-377.
15. Ferziger J.H., Peric M. Computational methods for fluid dynamics. – Springer, 1999. – 389 p.
16. <http://www-users.cs.umn.edu/~saad/software/SPARSKIT/index.html> (дата обращения: 10.05.2011).

Поступила в редакцию 28.03.11

Сведения об авторах

Любимов Дмитрий Викторович, дфмн, проф., зав. кафедрой, Пермский государственный национальный исследовательский университет (ПГНИУ), Россия, 614990, Пермь, ул. Букирева, д. 15; E-mail: lyubimov@psu.ru

Любимова Татьяна Петровна, дфмн, проф., зав. лаб., Институт механики сплошных сред УрО РАН (ИМСС УрО РАН), Россия, 614013, Пермь, ул. Ак. Королёва, д. 1; E-mail: lyubimovat@mail.ru

Иванцов Андрей Олегович, кфмн, мнс, ИМСС УрО РАН; E-mail: aivantsov@icmm.ru