

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ГИДРОДИНАМИКИ И ТЕПЛОМАССОБМЕНА ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ КРИСТАЛЛОВ МЕТОДОМ ЧОХРАЛЬСКОГО

В. И. ПОЛЕЖАЕВ, А. И. ПРОСТОМОЛОТОВ

(Москва)

Разрабатываются математическая модель и численный метод и исследуются нестационарные режимы течения и тепломассообмена в расплаве применительно к выращиванию кристаллов по Чохральскому.

Изучается отдельное и совместное действие вращения, тепловой, концентрационной и термокапиллярной конвекции на распределение температуры и примеси в диапазоне режимных параметров, соответствующих большим загрузочным массам расплава с малым значением кинематической вязкости. Обнаружены крупномасштабные колебания при взаимодействии вращения и тепловой конвекции. Показано существенное влияние термокапиллярной конвекции на результирующее движение при взаимодействии с тепловым и концентрационным видами конвекции. Дано сопоставление с результатами экспериментальных и теоретических исследований других авторов.

Метод Чохральского является одним из наиболее распространенных методов получения качественных монокристаллических слитков (см., например, [1]). На фиг. 1 показана схема метода, идея которого состоит в том, что из тигля 1, заполненного жидким расплавленным металлом 2, вытягивается кристалл с помощью затравки 3. Для обеспечения тепловой и осевой симметрии применяется вращение монокристаллического слитка и тигля.

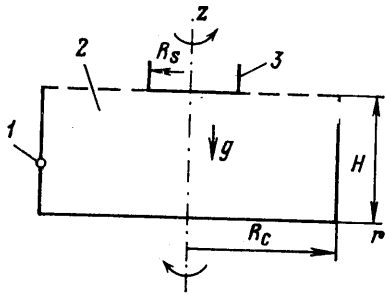
Результаты многочисленных экспериментов и технологических исследований указывают на то, что однородность и структурное совершенство выращиваемых монокристаллов определяется процессами гидродинамики и тепломассообмена в тигле на стадии, предшествующей кристаллизации. Движения расплава могут быть связаны с вынужденным вращением кристалла (тигля), тепловой и концентрационной конвекцией, возникающими в неоднородном по составу и температуре расплаве в связи с действием силы тяжести и центробежной силы, а также с термокапиллярным и капиллярно-концентрационным видами конвекции, имеющими место у свободной поверхности расплава. Взаимодействие указанных частных видов движения приводит к весьма сложной картине, которая еще более усложняется при переходе от малых загрузочных масс и медленного вращения (ламинарные режимы) к большим загрузочным массам и увеличенным скоростям вращения (переходной и турбулентный режимы движения расплава). Получение качественных монокристаллов связано с противоречивыми требованиями к механизмам перемешивания: с одной стороны, перемешивание должно быть достаточно интенсивным для выравнивания состава, с другой стороны, пульсации, возникающие при интенсивной конвекции, могут приводить к дефектам тонкой структуры монокристаллов.

Экспериментальное изучение стационарных течений в методе Чохральского на модельных жидкостях выполнено в работах [2-4]. При переходе к большим загрузочным массам в работе [5] обнаружено существенное изменение характера изотермического движения (образование лепестковых структур). При получении полупроводниковых материалов в расплаве часто наблюдаются температурные колебания [6]. В работе [7] обнаружена количественная зависимость между амплитудами температурных и полосчатой неоднородностью выращиваемых монокристаллов.

Возможности измерений в реальных условиях весьма ограничены, в связи с чем важную роль играет развитие методов численного моделирования, основанных на достаточно полных гидродинамических моделях. Стационарные режимы течения и теплообмена изучались численно в работах [8, 9]. Изучение колебательных режимов при наличии тепловой конвекции и вращения начато в [10, 11]. Исследование нестационарных течений в реальном диапазоне параметров требует как развития методов вычислений, так и дальнейшего изучения всех указанных механизмов движения в

отдельности и при их совместном действии. В последнее время расширяется круг изучения возможных гидродинамических механизмов движения; появились работы [12], где численно исследуется термокапиллярная конвекция в расплаве, и [13], где начато экспериментальное изучение термокапиллярного эффекта при выращивании кристаллов из расплава.

1. Математическая модель. В математической модели метода Чохрального (фиг. 1) предполагается цилиндрическая симметрия. Искривленность межфазной границы, зависящая от теплового баланса в системе кристалл — расплав, и кривизна мениска, обусловленного действием сил поверхностного натяжения при вытягивании слитка, обычно малы по



Фиг. 1

сравнению с радиусом кристалла (тигля), поэтому фронт кристаллизации и свободная поверхность расплава считаются плоскими. Характерные скорости движения расплава значительно больше скорости вытягивания кристалла v_s , поэтому и понижение уровня расплава с течением времени не учитывается. Тепловые условия на границах расчетной области (2, фиг. 1) предполагаются заданными. Концентрация примеси на дне и боковых стенках тигля считается фиксированной, на фронте кристаллизации выполняется условие материального баланса по аналогии с моделью

предложенной в работе [14]. На свободной поверхности предполагается, что массообмен отсутствует. Задаются угловые скорости вращения кристалла Ω_c и тигля Ω_s .

Исходная система нестационарных уравнений Навье — Стокса в приближении Буссинеска с учетом кругового движения расплава, переноса тепла и изменения концентрации примеси записывается в следующем безразмерном виде:

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial \omega}{\partial t} + u \frac{\partial \omega}{\partial r} + v \frac{\partial \omega}{\partial z} - u \frac{\omega}{r} - \frac{1}{r} \frac{\partial \omega^2}{\partial z} = \\
 & = \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 \omega}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \omega}{\partial r} - \frac{\omega}{r^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial z^2} \right) - \frac{\text{Gr}}{\text{Re}^2} \frac{\partial \theta}{\partial r} + \frac{\text{Gr}_d}{\text{Re}^2} \frac{\partial c}{\partial r} \\
 & \frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial r} + v \frac{\partial w}{\partial z} + u \frac{w}{r} = \\
 & = \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 w}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial r} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} - \frac{w}{r^2} \right) \\
 & \frac{\partial \theta}{\partial t} + u \frac{\partial \theta}{\partial r} + v \frac{\partial \theta}{\partial z} = \frac{1}{\text{Re Pr}} \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \theta}{\partial r} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} \right) \\
 & \frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial r} + v \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{1}{\text{Re Sc}} \left(\frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial c}{\partial r} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) \\
 & \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = r \omega
 \end{aligned}
 \tag{1.1}$$

Здесь θ — температура, c — концентрация примеси, u , v , w — соответственно радиальная, осевая и окружная компоненты вектора скорости,

связанные с вихрем ω и функцией тока ψ следующими соотношениями:

$$\omega = \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{\partial v}{\partial r}, \quad u = \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z}, \quad v = -\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r}$$

Граничные условия на дне тигля, на кристалле, на свободной поверхности, на оси и боковой стенке тигля задаются в виде

$$(1.2) \quad z=0, \quad \psi=0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial z}=0, \quad w=Ro r, \quad \theta=1, \quad c=1$$

$$(1.3) \quad z=H, \quad 0 \leq r \leq 1, \quad \psi=0, \quad \partial \psi / \partial z=0, \quad w=r$$

$$\theta=0, \quad \frac{\partial c}{\partial z} = -Bi_d c$$

$$(1.4) \quad z=H, \quad 1 \leq r \leq R_c, \quad \psi=0,$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = -\frac{r Mn}{Re Pr} \frac{\partial \theta}{\partial r} - \frac{r Mn_d}{Re Sc} \frac{\partial c}{\partial r}, \quad \frac{\partial w}{\partial z} = 0$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = -Bi(\theta - \theta_0), \quad \frac{\partial c}{\partial z} = 0$$

$$(1.5) \quad r=0, \quad \psi=0, \quad \omega=0, \quad w=0, \quad \frac{\partial \theta}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial c}{\partial r} = 0$$

$$(1.6) \quad r=R_c, \quad \psi=0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial r} = 0, \quad w=Ro R_c$$

$$\theta=1, \quad c=1$$

Критериальная зависимость полей скорости течения, температуры и концентрации примеси, являющаяся следствием системы уравнений и граничных условий, имеет следующий вид:

$$(1.7) \quad f=f(t, r, z, H, R_c, Pr, Sc, Bi, Bi_d, Re, Ro, Gr, Gr_d, Mn, Mn_d)$$

Искомое решение зависит от времени, координат, геометрии расчетной области. Кроме того, в (1.7) входят следующие безразмерные критерии подобия: тепловое число Прандтля $Pr = \nu/a$, концентрационное число Шмидта $Sc = \nu/D$, число Рейнольдса $Re = \Omega_s R_s^2/\nu$, число Россби $Ro = \Omega_c/\Omega_s$, числа Грасгофа $Gr = g\beta_s R_s^3(\theta_c - \theta_s)/\nu^2$ (тепловое) и $Gr_d = g\beta_d R_s^3(c_c - c_s)/\nu^2$ (концентрационное), числа Марангони $Mn = \sigma\beta_{\sigma s} R_s(\theta_c - \theta_s)/\rho\nu a$ (тепловое) и $Mn = \sigma\beta_{\sigma d} R_s(c_c - c_s)/\rho\nu D$ (концентрационное), числа Био $Bi = kR_s/a$ (тепловое) и $Bi_d = (k_0 - 1)\nu_s R_s/D$ (концентрационное). При этом считаются заданными коэффициенты: кинематической вязкости ν , температуропроводности a , диффузии D , теплового и концентрационного объемного расширения β_s и β_d , и аналогично поверхностного расширения $\beta_{\sigma s}$ и $\beta_{\sigma d}$, поверхностного натяжения σ , теплообмена на свободной поверхности k , распределения примеси на фронте кристаллизации k_0 , плотность ρ .

В качестве масштабов приняты следующие величины: радиус кристалла R_s , максимальное значение окружной скорости вращающегося кристалла $R_s \Omega_s$, время полного оборота кристалла $2\pi/\Omega_s$, разность температур тигля и кристалла $\theta_c - \theta_s$ и соответствующая разность концентраций $c_c - c_s$. При отсутствии вращения масштабами скорости и времени соответственно являются ν/R_s и R_s^2/ν , с учетом которых число Рейнольдса $Re=1$. Заметим, что указанный выше способ масштабирования является общепринятым [°], но не единственным. В условиях слабого вращения кристалла

более естественно взять масштабные единицы, соответствующие тиглю, при этом значения критериев подобия в (1.7) будут несколько иными.

Для получения качественного монокристаллического слитка требуется обеспечить радиальную однородность теплового потока из расплава в кристалл, равномерность радиального распределения легирующей примеси на фронте кристаллизации, а также уменьшить колебания температуры во времени в подкристалльной области. В данной работе структура течения и теплообмена изучается при постоянной геометрии и неизменных тепловых (диффузионных) свойствах материалов в зависимости от характера динамического режима. Исследование проводится в следующем диапазоне значений режимных параметров:

$$(1.8) \quad H=2.2, \quad R_c=3.3, \quad Pr=10^{-2}, \quad Sc=10^{-1/2},$$

$$Bi=10^{-2}, \quad Bi_d=10^2, \quad \theta_0=0$$

$$1 \leq Re \leq 3300, \quad -0.1 \leq Ro \leq 0.3,$$

$$(1.9) \quad 0 \leq Gr \leq 10^7, \quad 0 \leq Gr_d \leq 10^4,$$

$$0 \leq Mn \leq 10^4, \quad Mn_d=0$$

Здесь в (1.8) даны значения неизменяемых параметров, причем H — это глубина расплава, R_c — радиус тигля.

Согласно экспериментальным данным, при наибольших значениях динамических параметров (1.9) движение расплава становится гидродинамически неустойчивым, в связи с чем при численном исследовании возникают известные трудности. Однако в последние годы накоплен определенный опыт численного решения уравнений Навье — Стокса для переходных и турбулентных режимов тепловой конвекции [15], что позволяет систематически изучать и обрабатывать нестационарные численные реализации.

2. Численный метод. При численном решении задачи (1.1) — (1.6) применяется метод конечных разностей и аналог метода переменных направлений, позволяющие свести двумерную задачу к системе одномерных, которые аппроксимируются неявной разностной схемой на неравномерной сетке.

Схема для первых четырех уравнений системы (1.1) записывается на полуслое $n+1/2$ и целом $n+1$ временном слое с первым по времени и вторым по пространственным переменным порядком точности. При этом в уравнениях для ω , w , θ и c при линеаризации используются компоненты скорости с нижнего временного слоя n . Для конвективных членов применяется монотонная аппроксимация [16], согласно которой в конечно-разностных аналогах уравнений (1.1) коэффициенты при старшей производной имеют следующий вид:

$$(2.1) \quad \eta_u = \frac{1}{1 + Ru(|u|/h_i)/2} \quad \text{или} \quad \eta_v = \frac{1}{1 + Ru(|v|/l_j)/2}$$

что обеспечивает монотонность схемы при втором порядке точности по пространственным переменным при условии, если произведение сеточного числа Рейнольдса $Re_h = |u|h_i/2$ (или $Re_l = |v|l_j/2$) на масштабный параметр Ru не превышает 1.

При этом если $Ru Re_h > 1$, то, как показано в [17], монотонность схемы может сохраняться, однако порядок точности в этом случае понижается до первого и схема соответствует обычным направленным разностям.

Здесь в (2.1) $Ru = Re$ или $RePr$, или $ReSc$; h_i и l_j — шаги сетки по r и z .

Важным фактором при расчетах по данной схеме в случае наибольших чисел Рейнольдса, Грасгофа и Марангони (см. режимные параметры (1.9)) является использование в итерационном методе установления оптимального набора итерационных параметров для определения поля функции тока ψ из уравнения Пуассона системы (1.1) и применение критерия выхода из внутреннего цикла по величине относительной невязки конечно-разностного аналога этого уравнения.

Для аппроксимации пространственных производных на границе области в (1.2)–(1.6) используются односторонние разности второго порядка точности. Применяется эффективный метод аппроксимации граничного условия для вихря посредством подправления функции тока в узлах, отстоящих на один шаг внутрь основной расчетной области [17], причем при аппроксимации условия $\partial\psi/\partial n=0$ (здесь n — нормаль к границе) используются односторонние разности третьего порядка точности. Для решения системы сеточных уравнений применяется метод прогонки [16].

На каждом временном слое вычисления проводятся в следующей последовательности. Вначале определяется значение вихря ω_γ^{n+1} на границе области Q_γ , отстоящей внутрь основной области Q_T на один шаг сетки, из конечно-разностного аналога уравнения Пуассона системы (1.1). На следующем этапе решается уравнение для вихря в области Q_γ с определенным граничным условием ω_γ^{n+1} . Затем в области Q_T вычисляется поле функции тока из уравнения Пуассона. После этого значения функции тока на границе γ подправляются по разностным аналогам условия $\partial\psi/\partial n=0$. Наконец, в основной области Q_T определяются поля окружной компоненты скорости w , температуры θ и концентрации примеси c .

Расчетная сетка вводилась посредством задания массива шагов по соответствующим координатам r и z , причем при сгущении сетки (с учетом известной априорной оценки толщины пограничного слоя $\delta \sim 1/Re^{1/2}$) несколько расчетных узлов попадали в зону пограничного слоя. Сетка сгущалась на дне и около боковой стенки тигля, однако наибольшее сгущение задавалось вблизи поверхности кристалла. Основные расчеты выполнены на последовательности сеток 20×10 , 31×21 , 30×90 (последняя сетка использовалась только при изучении вращения изотермического расплава, см. п. 3). Значение временного шага τ выбиралось из условий аппроксимации нестационарного процесса и устойчивости численного счета.

Например, при расчетах тепловой конвекции (см. п. 4) использовались следующие параметры разностной схемы: сетка 31×21 , диапазон шагов по r от 0.02 до 0.12, диапазон шагов по оси z от 0.01 до 0.18, итерационные параметры внутреннего цикла по r — $\sigma_r = 0.0641$, 0.3779, 0.0003, 0.0066 и по z — $\sigma_z = 0.0743$, 1.4439, 0.0012, 0.0077, количество внутренних итераций на временном слое $N_t = 4$, безразмерный шаг по времени $\tau = 10^{-5} - 10^{-4}$, что соответствует 0.02–0.2 сек в масштабе реального времени.

В случае нестационарного режима взаимодействия тепловой конвекции и вращения для значений параметров п. 5 в качестве начальных использовались стационарные поля функции тока, вихря и температуры тепловой конвекции, соответствующие п. 4. При численном счете в этом динамическом режиме осуществлялось построение мгновенных картин линий тока и изотерм с шагом 0.5 сек реального времени при помощи графопроектиратора, при этом смонтирована кинограмма нестационарного процесса. При визуальной обработке этой кинограммы обнаружен характерный режим колебаний в структуре течения и теплообмена. Согласно данным эксперимента [7], характерный период пульсаций в этом динамическом режиме соответствует ~ 10 сек и временной шаг при графической обработке колебательного режима, видимо, достаточно мал. Суммарная

длительность нестационарной численной реализации составила ~ 1.5 мин реального времени.

3. Вращение изотермического расплава. Движение расплава при всех возможных видах вращения кристалла и тигля (отдельное вращение, совместное и противовращение) изучалось при $-0.1 \leq Ro \leq 0.3$ и небольшим числе Рейнольдса ($Re=3.3$). При вращении только кристалла ($\Omega_c=0$) действие центробежных сил приводит к одновихревой структуре течения с максимальным значением функций тока, равным $\psi_{\max}^- = -10^{-3}$. Круговое движение сосредоточено вблизи вращающейся поверхности, причем окружная составляющая скорости уменьшается на порядок при удалении от кристалла на расстояние, равное его радиусу. При изовращении кристалла и тигля ($Ro=0.3$) реализуется аналогичное одновихревое меридиональное течение, однако в этом случае круговое движение обусловлено вращающимся тиглем и слабо отличается от вращения расплава как единого твердого тела, за исключением небольшой зоны вблизи кристалла.

В случае противовращения ($Ro=-0.3$) все движение распадается на два вихря, один из которых расположен под кристаллом и вызван его вращением ($\psi_{\max}^- = -5 \cdot 10^{-5}$), а другой, закрученный в противоположную сторону, занимает остальной объем и обусловлен вращением тигля ($\psi_{\max}^+ = 10^{-3}$). Разделяющая линия тока ($\psi^0=0$) начинается на свободной поверхности вблизи кристалла и заканчивается на оси. Линия, разграничивающая две аналогичные зоны кругового движения, совпадает с разделяющей линией тока. Таким образом, при противовращении возникают две изолированные области течения. Этот вывод, полученный также в работах [8, 10], имеет принципиальное значение при перемешивании расплава, так как в этом случае примесь локализована в указанных областях и лишь незначительная ее часть переходит из одной зоны в другую благодаря процессам молекулярной диффузии.

Особенности течения при больших числах Рейнольдса изучались при следующих значениях параметров:

$$Re=3300 \text{ и } Ro=-0.1$$

В этом случае реализуется стационарная картина меридионального и кругового движения.

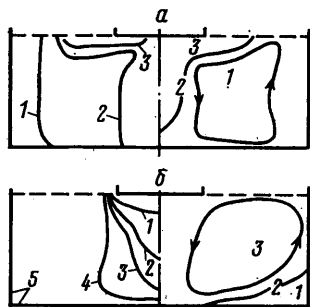
На фиг. 2, а показаны линии тока и изолинии окружной скорости для $Re=3300$, $Ro=-0.1$. При этом линиям 1, 2, 3 (справа от оси) соответствуют значения функции тока: $2.0 \cdot 10^{-3}$, 0.0 , $-6.0 \cdot 10^{-3}$; а линиям 1, 2, 3 (слева) соответствуют значения окружной скорости: -0.2 , -0.06 , 0.08 .

В результате перехода от малых чисел Рейнольдса к большим при противовращении кристалла и тигля проникновение подкристалльного вихря в расплав вблизи оси и его вытягивание в радиальном направлении в приповерхностном слое увеличиваются. Это сопровождается возрастанием общей интенсивности движения до $\psi_{\max}^+ = 2 \cdot 10^{-3}$ от действия тигля и $\psi_{\max}^- = -6 \cdot 10^{-3}$ под кристаллом, причем наиболее значительно увеличивается интенсивность подкристалльного вихря. Точка, соответствующая максимуму значения функции тока ψ_{\max}^+ , при возрастании Re перемещается вверх, что указывает на усиление расхода жидкости непосредственно вблизи разделяющей линии тока в узком приповерхностном слое.

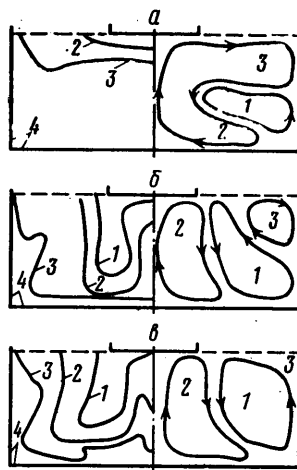
Исследование вращения при малых числах Рейнольдса не вызывает затруднений и результаты совпадают с экспериментальными и численными данными других авторов [2-4, 8]. Однако при переходе к большим числам $Re=1500$ в случае отдельного вращения тигля в работе [5] экспериментально обнаружена лепестковая структура течения и потеря осевой

симметрии течения. В работах [10, 18] численно реализованы колебательные режимы течения изотермического расплава в случае противовращения кристалла и тигля, причем в [18] колебания наблюдались и в рассмотренном выше диапазоне параметров. Однако расчеты данной работы, выполненные на сетке 30×90 , определенно указывают на наличие стационарного режима течения в этом случае.

4. Тепловая конвекция. Движе-



Фиг. 2



Фиг. 3

ние расплава в тигле при тепловой конвекции вызывается двумя основными причинами: во-первых, нарушением равновесия в связи с боковым подводом тепла, что приводит к основной циркуляции, во-вторых, из-за конвективной неустойчивости при подогреве дна. В последнем случае движение возникает при характерной критической разности температур тигля и кристалла (т.е. при некотором значении критического числа Рэлея).

Теплообмен в случае тепловой конвекции изучался при следующих значениях параметров:

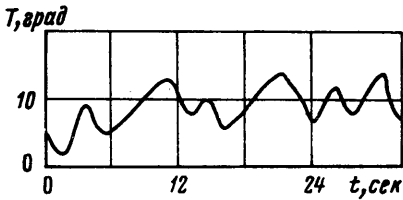
$$Pr=10^{-2}, \quad Vi=10^{-2}, \quad Gr=10^7$$

Линии тока и изотермы при наличии конвекции показаны соответственно на фиг. 2, б. Здесь линиям 1, 2, 3 соответствуют (справа от оси) значения функции тока: $-0.6 \cdot 10^3$, 0, $1.3 \cdot 10^3$, и линиям изотерм 1-5 (слева) соответствуют значения θ : 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0.

При этом в расплаве возникает основное движение, обусловленное всплыванием теплых масс жидкости вверх вдоль горячей вертикальной стенки, их охлаждением в приповерхностном слое и подкристалльной области, приводящим к формированию опускного течения холодных слоев вблизи оси. В придонном слое расплав прогревается за счет подогрева снизу. Движение имеет установившийся характер, причем максимальная интенсивность основного вихря, вращающегося против часовой стрелки, соответствует $\psi_{\max}^+ = 1.3 \cdot 10^3$ и вторичная циркуляция с противоположным направлением вращения сосредоточена в угловой области и имеет максимальное значение функции тока $\psi_{\max}^- = -0.6 \cdot 10^3$.

5. Совместное действие тепловой конвекции и вращения. Вращение кристалла, соответствующее малым числам Рейнольдса ($Re \leq 100$), создает слабую меридиональную циркуляцию, которая практически не изме-

няет интенсивность и структуру течения, вызванного развитой тепловой конвекцией. Однако сама тепловая конвекция при наличии вращения существенно усложняется за счет появления дополнительных составляющих, связанных с действием центробежной массовой силы. Эта сила дей-



Фиг. 4

ствует по нормали к боковой стенке тигля и создает вблизи последней движение, обусловленное тепловой неустойчивостью (такого же типа, как около дна при действии силы тяжести). На фоне этого существует основное движение за счет «бокового подогрева» (обусловленное центробежной силой от вращения кристалла). Сложное взаимодействие этих четырех механизмов тепловой конвекции, обусловлен-

ных силой тяжести и центробежной силой, приводит к появлению крупномасштабных колебаний при сравнительно малых числах Грасгофа. В данной работе при увеличенной скорости вращения кристалла обнаружен колебательный режим течения и теплообмена для следующей совокупности значений параметров:

$$Re=3300, Pr=10^{-2}, Vi=10^{-2}, Gr=10^7, \Omega_s \neq 0, \Omega_c=0$$

На фиг. 3, *a* – *e* показаны мгновенные картины колебаний в температурном поле (слева от оси симметрии) и в структуре течения (справа). Здесь линиям 1, 2, 3, 4 соответствуют следующие значения изотерм θ : 0.7, 0.8, 0.9, 1.0. Максимальная интенсивность ψ_{max} движений, соответствующих линиям 1, 2, 3, равна 1.3, –1.2, –1.2 для (*a*), 1.4, –0.8, –0.8 для (*b*) и 3.0, –0.8, –0.3 для (*e*).

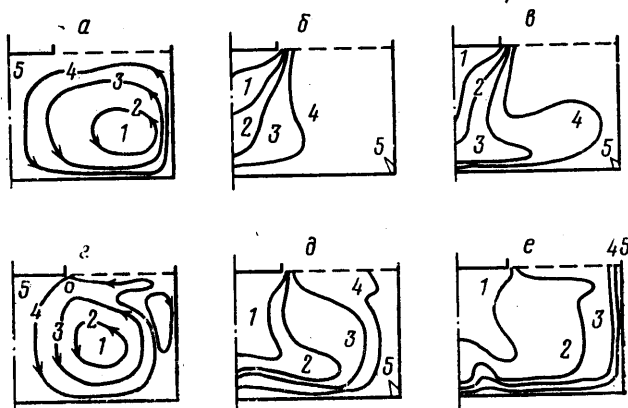
Периодическая смена характера движения вызвана чередованием роли вторичных движений в результате действия центробежной силы. Взаимодействие основного и вторичного течений приводит к регулярному усилению центробежных потоков в подкристалльной области и ослаблению тепловой конвекции (см. фиг. 3, *a*). В следующий момент времени картина течения перестраивается (фиг. 3, *b*) и происходит расширение влияния основного течения с одновременным ослаблением интенсивности вторичного вихря вблизи поверхности расплава (фиг. 3, *e*). В момент, соответствующий фиг. 3, *b*, температура под кристаллом понижается, а переход к структуре, показанной на фиг. 3, *a*, приводит к заметному повышению температуры.

Температурные колебания обычно приводят к неустойчивости фронта кристаллизации и могут быть причиной полосчатой неоднородности монокристаллов. Амплитудно-частотные характеристики температурных пульсаций вблизи поверхности кристалла при $r=0.1, z=2.1$ даны на фиг. 4 и соответствуют диапазону экспериментально измеренных [7].

Данные многочисленных технологических экспериментов указывают на то, что при наличии вращения в тонкой структуре монокристаллов появляются полосы неоднородности, которые отсутствуют в других случаях [19]. В работе [11] на основе численного решения построена нейтральная кривая устойчивости течения при взаимодействии тепловой конвекции и вращения кристалла, причем диапазон параметров, в котором замечено появление колебаний, включает значения, рассмотренные в данной работе. Отметим, что в случае бесконечно длинного горизонтального слоя вращение стабилизирует конвекцию (см., например, [20]). Однако в области конечных размеров при вращении кристалла появляется новый

важный механизм тепловой неустойчивости, приводящий к более ранней потере устойчивости, чем при отсутствии вращения.

6. Термоконцентрационная и термокапиллярная конвекция. До недавнего времени эти механизмы конвекции не принимались во внимание при рассмотрении гидродинамической картины течения и традиционно изучались только тепловая конвекция и вращение в методе Чохральского (см., например, [1, 9, 11]). Вместе с тем зависимость распределения плотности от концентрации легирующей примеси в поле массовых сил приво-



Фиг. 5

дит к особому виду движения, называемому концентрационной конвекцией. При наличии подогрева расплава в сочетании с тепловой конвекцией в этом случае возникает термоконцентрационный механизм движения.

В данной работе структура течения и тепломассообмена при термоконцентрационной конвекции изучалась в следующем диапазоне параметров (здесь, как и ниже, вращение кристалла и тигля не учитывается):

$$Pr=10^{-2}, Sc=10^{-1/2}, Bi=10^{-2}, Bi_d=10^2, 0 \leq Gr \leq 10^7, Gr_d=10^4$$

На фиг 5 приведены: *a* — линии тока 1–5 со значениями от $2.1 \cdot 10^3$ до 0.0 и шагом между ними, равным $0.5 \cdot 10^3$, *б* — изотермы 1–5 со значениями от 0.2 до 1.0 и шагом 0.2, *в* — линии равной концентрации 1–5 со значениями от 0.2 до 1.0 и шагом 0.2.

Из результатов расчета следует, что картина течения существенно зависит от величины теплового числа Грасгофа. При $Gr=10^4$ в расплаве существует слабое одновихревое движение с направлением вращения по часовой стрелке. Течение обусловлено действием концентрационной конвекции за счет стекания примеси вниз вдоль вертикальной стенки тигля и усилено благодаря донному подогреву. Переход к большим числам Грасгофа $Gr=10^7$ приводит к усилению роли бокового нагрева, в результате чего изменяется направление вращения вихря на противоположное и возрастает его интенсивность (см. фиг. 5, *a* — *в*). Сравнение с характером движения при отдельном действии тепловой конвекции (см. п. 4 и фиг. 2, *б*) указывает на усиление интенсивности основного течения при термоконцентрационной конвекции приблизительно на 60% с одновременным исчезновением вторичной циркуляции.

Температурные градиенты вдоль свободной поверхности расплава приводят к термокапиллярной конвекции. При взаимодействии термоконцентрационного и термокапиллярного механизмов движения структура течения и тепломассообмена изучалась для следующих значений критериев

подобия:

$$\text{Pr}=10^{-2}, \text{Sc}=10^{-1/2}, \text{Bi}=10^{-2}, \text{Bi}_d=10^2, \text{Mn}=10^4, \text{Gr}= \\ =10^7, \text{Gr}_d=10^4$$

На фиг. 5 приведены: z — линии тока 1–5 со значениями от $2.0 \cdot 10^4$ до 0.0 и шагом между ними, равным $0.5 \cdot 10^4$, ϑ — изотермы 1–5 со значениями от 0.2 до 1.0 и шагом 0.2, e — линии равной концентрации 1–5 со значениями от 0.2 до 1.0 и шагом 0.2.

Действие термокапиллярных сил приводит к усилению интенсивности основного движения по сравнению со случаем отдельного действия термоконцентрационной конвекции (см. соответствующие параметры и фиг. 5, a — e) и к колебаниям, причем амплитуда колебаний максимального значения функции тока достигает 10% ее величины с периодом, равным 0.5 *сек* реального времени. Одновременно с этим возникает нестационарная вторичная циркуляция с противоположным направлением вращения (по часовой стрелке) около боковой стенки тигля ($0.2 \cdot 10^4 \leq \leq |\psi_{\max}^-| \leq 0.3 \cdot 10^4$). Оценка вклада термокапиллярной составляющей конвекции в результирующее движение изменяет привычное мнение о доминирующей роли тепловой конвекции и указывает на необходимость ее систематического учета при параметрических исследованиях.

Первые количественные результаты по интенсивности термокапиллярных движений, времени их развития, глубине проникновения в массу жидкости и характере теплопереноса для сосудов цилиндрической формы получены в работе [21]. Применительно к методу Чохральского, но без учета концентрационной конвекции, для значений параметров, близких к данным выше, в [12] также делается вывод о значительном влиянии термокапиллярной конвекции на движение. Экспериментальные измерения термокапиллярной конвекции при выращивании кристаллов из расплава начаты в [13], где моделируется несколько иной метод кристаллизации, и также обнаружены колебательные режимы термокапиллярной конвекции.

Поступила в редакцию 23 VI 1980

ЛИТЕРАТУРА

1. Лодиз Р. А., Паркер Р. Л. Рост монокристаллов. М.: Мир, 1974, 540 с.
2. Мильвидский М. Г., Туровский Б. М. Моделирование процесса перемешивания расплава при выращивании кристаллов по методу Чохральского.— Кристаллография, 1961, т. 6, вып. 5, с. 759.
3. Конаков Ю. П., Третьяков Г. А. Экспериментальное исследование скоростного поля расплава при вытягивании монокристаллов.— Тр. Моск. ин-та инж. ж.-д. транспорта, 1967, вып. 254, с. 18.
4. Shiroki K. Simulations of Czochralski growth on crystal rotation rate influence in fixed crucibles.— J. Crystal Growth, 1977, v. 40, No. 1, p. 129.
5. Гришин В. П., Ремизов О. А., Казимиров Н. И., Федюлов Ю. П. Некоторые особенности гидродинамики при выращивании кристаллов кремния методом Чохральского.— Науч. тр. Гос. ин-та редкометаллической пром-ти, 1975, т. 65, с. 11.
6. Wilcox W. R., Fullmer L. D. Turbulent free convection in Czochralski crystal growth.— J. Appl. Phys., 1963, v. 36, No. 7, p. 2201.
7. Филиппов М. А., Черепанова Т. А., Смирнов В. А., Титюник Л. Н. К вопросу о неоднородности распределения легирующей примеси при выращивании монокристаллов германия и арсенида галлия из расплава.— В кн.: Вопросы теории кристаллизации. Вып. 2. Рига, 1975, с. 25.
8. Kobayashi N. Computational analysis of the flow in a crucible.— J. Crystal Growth, 1975, v. 30, No. 2, p. 177.
9. Kobayashi N. Computational simulation of the melt flow during Czochralski growth.— J. Crystal Growth, 1978, v. 43, No. 3, p. 357.
10. Langlois W. E. Digital simulation of Czochralski bulk flow in a parameter range appropriate for liquid semiconductors.— J. Crystal Growth, 1977, v. 42, p. 386.

11. *Langlois W. E.* Effect of the buoyancy parameter on Czochralski bulk flow in garnet growth.— *J. Crystal Growth*, 1979, v. 46, No. 6, p. 743.
12. *Langlois W. E.* Digital simulation of Czochralski bulk flow in microgravity.— *J. Crystal Growth*, 1980, v. 48, No. 1, p. 25.
13. *Schwabe D., Scharmann A., Preisser R., Oeder R.* Experiments on surface tension driven flow in floating zone melting.— *J. Crystal Growth*, 1978, v. 43, No. 3, p. 305.
14. *Wilson L. O.* The effect of fluctuating growth rates on segregation in crystals growth from the melt.— *J. Crystal Growth*, 1980, v. 48, p. 435.
15. *Грязнов В. Л., Полежаев В. И.* Численное моделирование турбулентного режима конвекции в вертикальном слое.— *Изв. АН СССР. МЖГ*, 1977, № 5, с. 8.
16. *Самарский А. А.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1977. 656 с.
17. *Грязнов В. Л., Полежаев В. И.* Исследование некоторых разностных схем и аппроксимаций граничных условий для численного решения уравнений тепловой конвекции. М., 1974, 71 с. (Ин-т пробл. мех. АН СССР, препринт № 40).
18. *Люжкис Е. Д., Маргузан Б. Я., Маргузане Э. Н.* Численное исследование нестационарных гидродинамических и тепловых процессов в методе Чохральского.— *Изв. АН СССР. Сер. физ.*, 1980, т. 44, № 2, с. 373.
19. *Моризейн К., Витт А., Гейтос Х.* Распределение примесей в монокристаллах.— В кн.: Проблемы роста кристаллов. М.: Мир, 1968, с. 277.
20. *Гершуни Г. З., Жуховицкий Е. М.* Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. М.: Наука, 1972, 392 с.
21. *Полежаев В. И.* Термокапиллярная конвекция жидкости в цилиндрическом сосуде при заданном подводе тепла.— В кн.: Некоторые применения метода сеток в газ. динамике. Вып. 3. М.: Изд-во МГУ, 1971, с. 175.