

УДК 532.516.013.4:536.25

© 1999 г. Н.В. НИКИТИН, В.И. ПОЛЕЖАЕВ

ТРЕХМЕРНАЯ КОНВЕКТИВНАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ И КОЛЕБАНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ КРИСТАЛЛОВ ПО МЕТОДУ ЧОХРАЛЬСКОГО

Для исследования трехмерных эффектов устойчивости и колебаний температуры, обусловленных тепловой гравитационной конвекцией при выращивании кристаллов по методу Чохральского при малом числе Прандтля, применяется спектрально-разностный метод, использовавшийся для моделирования турбулентных течений в трубах и каналах. Определены критические числа Грасгофа, при которых возникают колебания в осесимметричном и трехмерном приближениях для параметров международного теста. Рассмотрено влияние трехмерных эффектов при малой надкритичности на конвективную устойчивость при вращении кристалла.

Гидродинамическая модель метода выращивания кристаллов из расплава путем вытягивания (метод Чохральского) изучается более 30 лет преимущественно методами численного моделирования на основе осесимметричного приближения [1, 2] (см. также обзоры в [3–6]). Среди многих характеристик, относящихся к так называемым "гидродинамическим критериям качества" [6], одной из наиболее важных является интенсивность колебаний, обусловленных неустойчивостью конвекции в расплаве, а также определение причин и условий возникновения этих колебаний и возможностей их подавления. К числу последних относится уменьшение сил плавучести в условиях микрогравитации. В последнее время поставлена задача о поисках методов стабилизации течения в расплаве, альтернативных микрогравитации [7, 8], что в значительной степени стимулирует разработку эффективных методов моделирования многопараметрических нелинейных задач этого класса. Это требует, согласно [8], развития иерархии математических моделей.

Существенную роль в решении этой проблемы могут играть методы теории гидродинамической устойчивости. Однако их применение к постановке задачи, соответствующей методу Чохральского, практически не развито, хотя этот вопрос неоднократно обсуждался с привлечением тех или иных качественных оценок [9]. Наиболее полный и ориентированный на модель метода Чохральского обзор явлений гидродинамической устойчивости [10] достаточно убедительно иллюстрирует ограниченность конкретных числовых данных, позволяющих, в частности, определить условия возникновения температурных колебаний.

В последние годы начали широко применяться трехмерные гидродинамические модели [8, 11–13]. В связи с тем, что указанные модели применяются и в диапазоне параметров, при которых течение может не иметь стационарного решения, исследование гидродинамической устойчивости приобретает важное значение, особенно в связи с работами по тестам численных решений задач кристаллизации по методу Чохральского [14–17].

В данной работе для исследования устойчивости течения в методе Чохральского применяется спектрально-разностный метод, развитый в [18, 19] и широко использовавшийся для моделирования неустойчивости, перехода и турбулентности в трубах и каналах. В качестве конкретных геометрических параметров и граничных условий

взяты параметры теста [15], ставшего уже международным [16, 17]. Основное внимание уделяется определению в осесимметричной и трехмерной постановках критических чисел Грасгофа, при которых возникают колебания, обусловленные тепловой гравитационной конвекцией при малом числе Прандтля, характерном для расплавов полупроводников. Кроме того, изучаются трехмерные эффекты тепловой гравитационной конвекции при малой надкритичности на основе решения нелинейных уравнений.

1. Математическая модель, постановка и метод решения задачи. Гидродинамическая модель выращивания кристаллов по методу Чохральского представляет собой цилиндрический сосуд радиусом R_c (простейшая модель тигля), заполненный расплавом до высоты H (см. фиг. 1). На свободной поверхности жидкости сносно с сосудом помещается диск (модель кристалла) радиусом R_x . Температуры диска T_x и боковой поверхности сосуда T_c , $T_c \geq T_x$ заданы. Сосуд и диск могут вращаться вокруг оси симметрии с угловыми скоростями Ω_c и Ω_x соответственно.

Для описания движения жидкости (расплава) в тигле используются уравнения Навье – Стокса в приближении Буссинеска. В качестве масштаба длины принимается радиус сосуда R_c , масштаба скорости ν/R_c , ν – кинематическая вязкость жидкости, и масштаба температуры – разность температур сосуда и диска $T_c - T_x$. Безразмерная система уравнений Навье – Стокса и теплопроводности записывается в виде

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \mathbf{v} \times \nabla \times \mathbf{v} - \nabla \Pi - \nabla \times \nabla \times \mathbf{v} + \text{Gr} T \mathbf{k}_z \quad (1.1)$$

$$\nabla \mathbf{v} = 0 \quad (1.2)$$

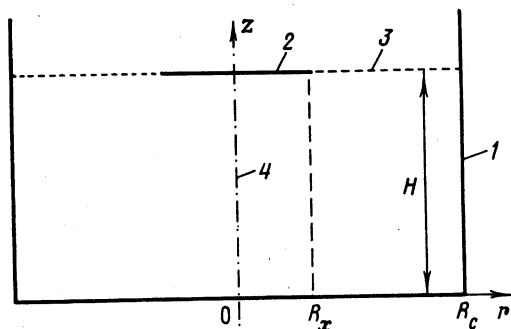
$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla(\mathbf{v}T) = \frac{1}{\text{Pr}} \Delta T \quad (1.3)$$

$$\Pi = \frac{p}{\rho} + \frac{|\mathbf{v}|^2}{2}, \quad \text{Pr} = \frac{\nu}{\kappa}, \quad \text{Gr} = g \gamma (T_c - T_x) \frac{R_c^3}{\nu^2}$$

Здесь $\mathbf{v}(t, r, \theta, z)$ – поле скорости, проекции которой на оси цилиндрической системы координат (r, θ, z) обозначаются через v_r, v_θ, v_z соответственно $p(t, r, \theta, z)$ – давление, ρ – плотность жидкости при температуре T_x , $T(t, r, \theta, z)$ – поле температуры, t – время, Pr – число Прандтля, κ – коэффициент температуропроводности жидкости, Gr – число Грасгофа, g – ускорение силы тяжести, γ – коэффициент объемного расширения жидкости, \mathbf{k}_z – единичный вектор вдоль оси z , направленный вверх.

В основной постановке задачи считается, что на твердых поверхностях – на дне и боковой стенке сосуда, а также на поверхности диска выполнены условия прилипания, а на свободной поверхности жидкости между диском и сосудом, которая считается плоской, отсутствуют касательные напряжения. Одной из возможных ситуаций является наличие на поверхности расплава окисной пленки, что ближе всего соответствует условиям прилипания.

Исследование влияния тепловых условий на устойчивость течения расплава – одна из основных задач при поиске методов стабилизации, что требует рассмотрения различных вариантов. В настоящей работе основное внимание уделено варианту, соот-



Фиг. 1. Схема гидродинамической модели метода выращивания кристаллов путем вытягивания из расплава (метод Чохральского): 1 – сосуд (тигель), 2 – вращающийся диск (кристалл), 3 – поверхность расплава, 4 – ось вращения

ветствующему международному тесту [15]. В этой постановке дно сосуда теплоизолировано, распределение температуры вдоль свободной поверхности жидкости от диска до стенки сосуда является линейным. Кроме того, рассмотрен вариант, соответствующий модели технологического режима выращивания кристаллов под флюсом при наличии донно-бокового подогрева [7]. Формальная запись основного варианта граничных условий на дне, боковых стенках, диске и свободной поверхности имеет вид

$$v_r = v_z = 0, v_\theta = r \operatorname{Re}_c, \frac{\partial T}{\partial z} = 0, 0 \leq r \leq 1, z = 0$$

$$v_r = v_z = 0, v_\theta = \operatorname{Re}_c, T = 1, r = 1, 0 \leq z \leq \alpha$$

$$v_r = v_z = 0, v_\theta = r \operatorname{Re}_x, T = 0, 0 \leq r \leq \beta, z = \alpha$$

$$\frac{\partial v_r}{\partial z} = \frac{\partial v_\theta}{\partial z} = v_z = 0, T = \frac{r - \beta}{1 - \beta}, \beta \leq r \leq 1, z = \alpha$$

Критическое число Грасгофа, при котором возникают колебания, обусловленные тепловой гравитационной конвекцией, в данной постановке задачи определяется критериальной зависимостью вида $Gr = F(\alpha, \beta, Pr, \operatorname{Re}_x, \operatorname{Re}_c)$. Сюда входят два геометрических параметра $\alpha = H/R_c$ и $\beta = R_x/R_c$, один параметр, характеризующий свойства жидкости – число Прандтля Pr и два числа Рейнольдса $\operatorname{Re}_x = R_c^2 \Omega_x / \nu$, $\operatorname{Re}_c = R_c^2 \Omega_c / \nu$. В более общей постановке к числу параметров должны быть добавлены характеристика граничных условий и характеристика начальных условий.

Ввиду замкнутости области и сложного характера граничных условий критическое число Грасгофа до недавнего времени для этой задачи не были найдены. Среди многих параметров рационально иметь хотя бы некоторую "точку отсчета", за которую принимаются параметры теста [15]: $\alpha = 1$, $\beta = 0,4$, $Pr = 0,05$. Все приведенные ниже результаты получены при отсутствии вращения тигля ($\operatorname{Re}_c = 0$).

Численное решение задачи проводится смешанным спектрально-конечно-разностным методом. В угловом направлении θ все искомые функции периодичны с периодом 2π , что позволяет отыскивать приближенное решение в виде частичной суммы ряда Фурье

$$f(t, r, \theta, z) = \sum_{|n| \leq N_\theta} f^n(t, r, z) \exp(in\theta) \quad (1.4)$$

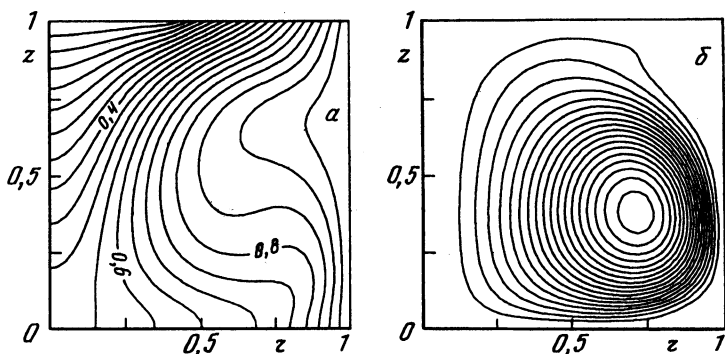
$$f^n(t, r, z) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(t, r, \theta, z) \exp(-in\theta) d\theta$$

Для действительных f комплексные амплитуды Фурье f^n удовлетворяют соотношениям $f^{-n} = (f^n)^*$ (индекс звездочка обозначает операцию комплексного сопряжения), таким образом разложение (1.4) включает в себя $2N_\theta + 1$ независимое действительное слагаемое.

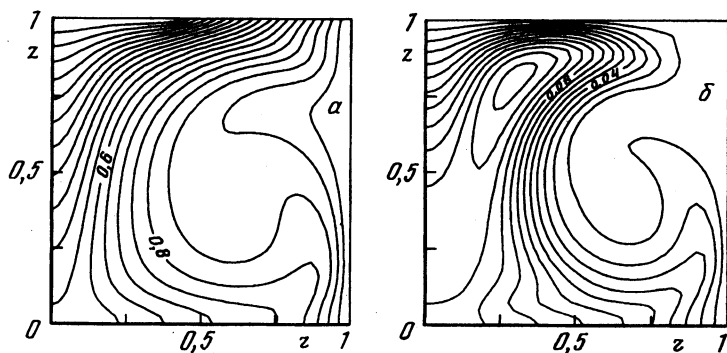
В плоскости (r, z) используется конечно-разностный метод дискретизации на перемежающихся сетках [20, 21]. Производные аппроксимируются центральными разностями 2-го порядка точности. В направлении z используется равномерная сетка, в радиальном направлении – неравномерная. Конвективные члены уравнения для температуры аппроксимируются по схеме работы [21], модифицированной на случай неравномерной сетки. Аппроксимация нелинейных членов в уравнениях Навье – Стокса и постановка граничных условий на оси симметрии ($r = 0$), где уравнения имеют сингулярность, проводятся по методу [18]. Вычисление сверток рядов Фурье, а также решение эллиптической части уравнений Навье – Стокса проводятся с использованием алгоритма быстрого преобразования Фурье.

Интегрирование по времени ведется полуявным методом Рунге – Кутты [19]. Оценка локальной погрешности и алгоритм автоматического выбора шага [18] включены в схему интегрирования.

2. Тепловая гравитационная конвекция в осесимметричном приближении при отсутствии вращения. В случае отсутствия вращения сосуда и диска ($\operatorname{Re}_x = \operatorname{Re}_c = 0$) дви-



Фиг. 2. Стационарное осесимметричное конвективное течение при $Re_c = Re_x = 0$ и $Gr = 10^6$: a – изотермы, b – линии тока



Фиг. 3. Периодическое осесимметричное конвективное течение при $Re_c = Re_x = 0$ и $Gr = 6 \cdot 10^6$: a – изотермы осредненного движения, b – распределение среднеквадратичной амплитуды колебаний температуры

жение при $Gr > 0$ вызывается тепловой гравитационной конвекцией под действием разности температур стенки сосуда и поверхности диска ввиду отсутствия гидростатического равновесия. Потенциальной причиной возникновения конвекции может быть также неустойчивость равновесия при охлаждении диска (механизм Рэлея – Бенара).

В расчетах осесимметричных движений ($N_\theta = 0$ в (1.4)) число узлов сетки N_r в радиальном направлении и число узлов сетки N_z в осевом направлении варьировались от 16 до 128. При увеличении числа Грасгофа устанавливаются при $t \rightarrow \infty$ движения оказываются стационарными до $Gr \approx 2,5 \cdot 10^6$. При больших Gr возникают нестационарные движения. В диапазоне Gr от $2,5 \cdot 10^6$ до $6 \cdot 10^6$ предельные движения являются периодическими.

Некоторые характеристики рассчитанных стационарных и периодических движений и их зависимость от используемого пространственного разрешения приведены на фиг. 2, 3 и ниже.

$N_r \times N_z$	16×16	32×32	64×64	128×128	$\infty \times \infty$
Ψ_{\max}	90,384	92,441	92,998	93,134	93,179
Δ_Ψ	$3 \cdot 10^{-2}$	$8 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{-4}$	0

Здесь приведены максимальные значения функции тока

$$\Psi_{\max} = \max_{r,z} \psi(r,z), \quad v_r = \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z}, \quad v_z = -\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r}$$

в стационарных течениях при $Gr = 10^6$, полученных на сетках различного размера при $\psi = 0$ на

границах расчетной области. Значение Ψ_{\max} при $N_r \times N_z = \infty \times \infty$ получено экстраполяцией по Ричардсону в предположении, что погрешность приближенных значений Ψ пропорциональна квадрату шага сетки в каждом из пространственных направлений. В 3-й строке табл. 1 приведены относительные погрешности

$$\Delta_{\Psi} = \left| \frac{\Psi_{\max}(N_r \times N_z) - \Psi_{\max}(\infty \times \infty)}{\Psi_{\max}(\infty \times \infty)} \right|$$

показывающие, что ошибка в определении Ψ_{\max} пропорциональна квадрату шага сетки, начиная с наиболее грубого пространственного разрешения. Погрешность в определении Ψ_{\max} в стационарных режимах составляет менее 1%, начиная с $N_r = N_z = 32$. Предельное значение Ψ_{\max} в данной работе (93,179) согласуется с аналогичным значением (93,037), полученным конечно-разностным методом в [17]. На сетке 64×64 значения Ψ_{\max} в данной работе, [16] и [17] равны 92,998, 92,100 и 92,518 соответственно.

Характеристики периодических течений более чувствительны к размеру сетки. Погрешность 1% в $\langle \Psi_{\max} \rangle$ (угловыми скобками обозначается осреднение по периоду колебаний) достигается, только начиная с $N_r = N_z = 64$. Сетка с $N_r = N_z = 32$ в этих случаях дает занижение значений $\langle \Psi_{\max} \rangle$ примерно на 5%. Критические числа Грасгофа Gr_c , при которых стационарные режимы движения сменяются периодическими, для сеток 64×64 и 128×128 имеют близкие значения $Gr_c \approx 2,5 \cdot 10^6$. Для сетки 32×32 $Gr_c \approx 2,8 \cdot 10^6$. Во всех случаях амплитуда колебаний Ψ_{\max} пропорциональна $(Gr - Gr_c)^{1/2}$. Амплитуда колебаний Ψ_{\max} на сетке 64×64 при всех Gr имеет большую величину, чем на сетке 128×128 . При $Gr = 6 \cdot 10^6$ это отличие достигает 10%.

Сравнение распределений полей температуры и скорости в области течения показывает качественно правильное воспроизведение результатов как в стационарных, так и в периодических режимах даже на предельно грубых сетках при $N_r = N_z = 16$. На фиг. 2 изображены изотермы и линии тока в плоскости (r, z) течения в стационарном режиме ($Gr = 10^6$), а на фиг. 3, а – изотермы осредненного течения в периодическом режиме ($Gr = 6 \cdot 10^6$). Эти результаты получены при $N_r = N_z = 128$. Формы течения близки в обоих случаях, хотя движение в периодическом режиме более интенсивное, чем в стационарном (характерная величина скорости приблизительно пропорциональна корню из числа Грасгофа). Жидкость поднимается вдоль стенки сосуда и опускаются вдоль оси симметрии. В окрестностях точек $(r = 1, z = 0)$ и $(r = 1, z = 0,8)$ имеются слабые рециркуляционные зоны. При дальнейшем повышении Gr до 10^7 кроме усиления интенсивности движения появляется застойная зона в области $(r = 0,7-1, z = 0,9)$ и еще одна рециркуляционная область вблизи свободной поверхности жидкости, примыкающая к границе кристалла.

Распределение средней температуры в периодическом режиме близко к соответствующему распределению в стационарном режиме. Характер колебаний температуры в каждой фиксированной точке близок к гармоническому. Амплитуда кратных гармоник пренебрежимо мала по сравнению с амплитудой основного тона. Период колебаний с ростом Gr монотонно уменьшается от $\sim 2 \cdot 10^{-3}$ при $Gr = 2,5 \cdot 10^6$ до $\sim 1,4 \cdot 10^{-3}$ при $Gr = 6 \cdot 10^6$. На фиг. 3, б изображены изолинии распределения среднеквадратичной амплитуды колебаний температуры $T_{\text{rms}} = \langle (T - \langle T \rangle)^2 \rangle^{0,5}$. Максимум T_{rms} достигается в подкристалльной области вблизи точки $(r = 0,3, z = 0,8)$ и составляет около 13% разности температур сосуда и диска.

Целью дальнейших исследований, излагаемых ниже, является определение различий между моделями осесимметричного и пространственного течения. В рамках данной работы это сделано лишь для малых надкритичностей.

3. Устойчивость стационарной осесимметричной конвекции к малым трехмерным возмущениям. При исследовании устойчивости стационарных осесимметричных движений к малым трехмерным возмущениям поле температуры представ-

ляется в виде

$$T(t, r, \theta, z) = T^{\circ}(r, z) + T^{n n}(t, r, \theta, z), \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.1)$$

$$T^{n n}(t, r, \theta, z) = \text{Real}\{T^n(t, r, z) \exp(in\theta)\} \quad (3.2)$$

Здесь T° – стационарное решение осесимметричных уравнений, а T^n – возмущение. Аналогичным образом представляются компоненты поля скорости. Подставляя выражения вида (3.1), (3.2) в уравнения (1.1) – (1.3) и граничные условия, считая возмущения малыми и пренебрегая квадратичными относительно возмущений членами, получим линейную эволюционную задачу. Общее решение этой задачи имеет вид

$$T^{n n}(t, r, z) = \sum_{j=1}^{\infty} T^{n, j}(r, z) \exp(\lambda^{n, j} t) \quad (3.3)$$

где $\lambda^{n, j}$ – собственные значения, а $T^{n, j}$ – собственные функции соответствующей спектральной задачи (для простоты предполагаем, что кратные собственные значения отсутствуют). Если действительные части всех собственных значений отрицательны, то $|T^{n n}(t \rightarrow \infty, r, z)| \rightarrow 0$ при любых начальных условиях, что означает устойчивость течения к малым возмущениям вида (3.2). Если $|T^n(t \rightarrow \infty, r, z)|$ не стремится к нулю при некоторых начальных условиях, то течение неустойчиво.

Решая эволюционную задачу при некоторых случайных начальных условиях, получим при $t \rightarrow \infty$

$$T^n(t, r, z) \rightarrow T^{n, 1}(r, z) \exp(\lambda^n t) \quad (3.4)$$

где $\lambda^n = \sigma^n + i\omega^n$ – собственное значение с максимальной действительной частью, а $T^{n, 1} = T_r^n + iT_i^n$ – соответствующая собственная функция ($\sigma^n, \omega^n, T_r^n$ и T_i^n – действительные). Из (3.2) получаем выражение для возмущения температуры

$$T^{n n}(t, r, \theta, z) \rightarrow \exp(\sigma^n t) [T_r^n(r, z) \cos(n\theta + \omega^n t) - T_i^n(r, z) \sin(n\theta + \omega^n t)] \quad (3.5)$$

Выражение в квадратных скобках в правой части (3.5) описывает бегущую (вращающуюся) волну, линии равной фазы которой вращаются в угловом направлении с угловой скоростью $-\omega^n/n$.

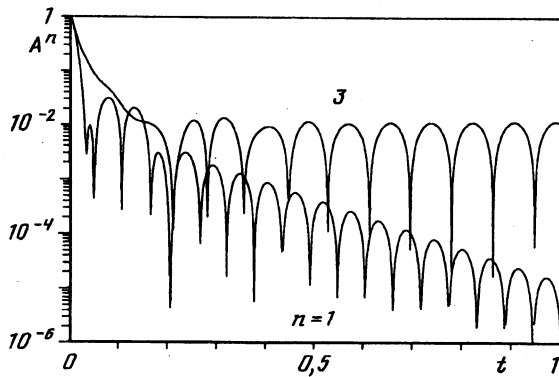
При отсутствии вращения сосуда и диска отсутствует выделенная угловая ориентация течения. Можно показать, что в этом случае спектр линейризованного оператора задачи состоит из действительных и комплексно-сопряженных пар собственных значений. Если собственное значение с максимальной действительной частью действительно ($\omega^n = 0$), то правая часть (3.5) описывает стоячую волну. Из соображений симметрии следует, что при надлежащей нормировке собственной функции и подходящем выборе начала отсчета полярного угла поведение возмущения на больших временах может быть представлено в виде

$$T^{n n}(t, r, \theta, z) = \exp(\sigma^n t) T_r^n(r, z) \cos(n\theta) \quad (3.6)$$

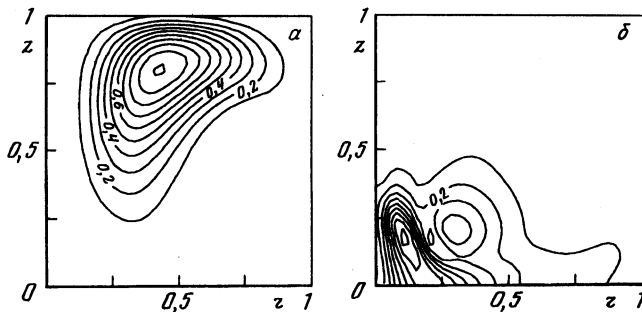
Для этого достаточно взять действительное начальное значение для T^n .

Если максимальная действительная часть принадлежит комплексно-сопряженной паре собственных значений, то соответствующие собственные функции также являются комплексно-сопряженными, и возмущение при $t \rightarrow \infty$ представляет собой сумму двух волн, вращающихся в противоположных направлениях

$$T^{n n}(t, r, \theta, z) = \exp(\sigma^n t) [A(T_i^n \cos(n\theta + \omega^n t) - T_r^n \sin(n\theta + \omega^n t)) + B(T_r^n \cos(n\theta - \omega^n t) + T_i^n \sin(n\theta - \omega^n t))] \quad (3.7)$$



Фиг. 4. Поведение функций $A^n(t)$ (3.9) при $Gr = 5 \cdot 10^5$ и $Re_x = 0$



Фиг. 5. Распределения амплитуды (3.12) собственных функций наиболее растущих возмущений при $Gr = 5 \cdot 10^5$: а – $Re_x = 0$ ($n = 3$), б – $Re_x = 10^3$ ($n = 1$)

Действительные константы A и B могут иметь произвольные значения и определяются начальными условиями. В частности, если $A = B$, то (3.7) переходит в

$$T^n(t, r, \theta, z) = \exp(\sigma^n t) \cos(n\theta) [T_r^n(r, z) \cos(\omega^n t) - T_i^n(r, z) \sin(\omega^n t)] \quad (3.8)$$

что так же, как и (3.6), представляет собой стоячую волну, но уже не стационарную, а колебательную. Для обеспечения условия $A = B$ достаточно взять действительным начальное значение для $T^n(r, z)$.

С учетом приведенных обоснований начальные возмущения температуры полагались действительными и задавались в виде

$$T^n(0, r, z) = C(1 - z^2)r^n(1 - r^2)$$

Начальные возмущения поля скорости брались нулевыми. Наличие возмущения температуры при $Gr > 0$ приводит к появлению при $t > 0$ возмущений поля скорости. Собственные функции определялись согласно (3.6), (3.8) из асимптотических при $t \rightarrow \infty$ распределений соответствующих полей.

Характер поведения возмущения (затухающий или нарастающий, монотонный или колебательный) может быть определен из наблюдения за эволюцией движения в некоторой фиксированной точке в плоскости (r, z) . В качестве такой контрольной точки была выбрана точка $(r_0, z_0) = (0,64, 0,5)$. На фиг. 4 изображены графики амплитуды $A^n(t)$ возмущения температуры

$$(A^n(t))^2 = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} (T^n(t, r_0, z_0, \theta))^2 d\theta \quad (3.9)$$

Gr	λ^1	λ^2	λ^3	λ^4	λ^5	λ^6
10^5	$-70 + 210i$	$-70 + 80i$	$-45 + 170i$	$-95 + 250i$		
$5 \cdot 10^5$	$-70 + 550i$	$-76 + 190i$	$1,3 + 375i$	$-34 + 755i$	$-65 + 820i$	$-140 + 940i$
10^6	$-54 + 795i$	$-80 + 247i$	$48 + 478i$	$38 + 966i$	$-68 + 1030i$	$-39 + 424i$

при $Gr = 5 \cdot 10^5$, $n = 1$ и 3 . В соответствии с (3.6), (3.8) при $t \rightarrow \infty$

$$A^n(t) \sim \exp(\sigma^n t), \quad A^n(t) \sim \exp(\sigma^n t) |\cos(\omega^n t - \phi_0)| \quad (3.10)$$

в монотонных и колебательных режимах соответственно. Как видно из представленных графиков на фиг. 4, поведение A^n при обоих n соответствует второй формуле (3.10), т.е. максимальное σ^n отвечает паре комплексно-сопряженных собственных значений. Аналогичное поведение имеют функции A^n и при других значениях n от 1 до 6. При всех n , кроме $n = 3$, возмущения затухают со временем, при $n = 3$ наблюдается небольшой рост.

Оценки собственных значений с максимальной действительной частью, полученные из графиков $A^n(t)$ при $Gr = 10^5$, $5 \cdot 10^5$ и 10^6 , приведены в табл. 1. Как видно из представленных данных, осесимметричные течения при $Re_c = Re_x = 0$ неустойчивы к трехмерным малым возмущениям, начиная с $Gr \approx 5 \cdot 10^5$. Возникающая неустойчивость имеет колебательный характер. Наиболее неустойчивая мода имеет азимутальный номер $n = 3$. При $Gr = 10^6$ имеются также растущие возмущения с $n = 4$. Полученный результат показывает появление колебаний при гораздо меньших числах Грасгофа, чем в рассмотренной выше осесимметричной постановке ($Gr_c = 2,5 \cdot 10^6$).

Распределение в плоскости (r, z) амплитуды трехмерных колебаний, возникающих при $Gr = 5 \cdot 10^5$, приведено на фиг. 5, а, где изображены линии уровня амплитуды колебаний

$$|T^{n,1}(r, z)| = [(T_r^n)^2 + (T_z^n)^2]^{1/2} \quad (3.12)$$

при $n = 3$ и нормировке $\max |T^{n,1}| = 1$. Судя по тому, что максимум амплитуды колебаний достигается в подкристалльной области ($r = 0,37$, $z = 0,8$), возникающая неустойчивость, по-видимому, связана с влиянием на конвективное течение охлаждаемой поверхности диска.

При наличии вращения диска ($Re_x \neq 0$) кроме тепловой конвекции (при $Gr > 0$) движение жидкости вызывается центробежными силами, отбрасывающими жидкость из подкристалльной области к стенкам сосуда. При $Re_x = 10^3$ устанавливающиеся течения являются стационарными до $Gr \approx 2,5 \cdot 10^6$. При дальнейшем увеличении числа Грасгофа так же, как и при отсутствии вращения, возникают периодические движения.

Рассмотрим устойчивость стационарных осесимметричных течений к трехмерным малым возмущениям при наличии вращения диска при $Re_x = 10^3$. Поскольку при вращении диска появляется выделенное угловое направление, в спектре линеаризованного оператора задачи пропадают действительные и комплексно-сопряженные собственные значения. Таким образом, эволюция возмущений на больших временах описывается формулой (3.5) при $\omega^n \neq 0$, соответствующей волне, бегущей в угловом направлении. При этом величины $A^n(t)$, определенные формулой (3.9), имеют асимптотическое поведение, соответствующее первой формуле (3.10). Для определения частот ω^n необходимы дополнительные наблюдения за поведением возмущений $T^{n,1}(t, r, \theta, z)$ в некоторой точке (r, θ, z) .

Собственные значения с наибольшей действительной частью при $Re_x = 10^3$ и нескольких числах Грасгофа приведены в табл. 2. При $Gr = 5 \cdot 10^5$, как и в случае

Gr	σ^1	ω^1	σ^2	σ^3	ω^3	σ^4	σ^5	σ^6
$3 \cdot 10^5$	-15	-1200	-90	-17	-118			
$4 \cdot 10^5$	22	-1460	-95	-4,2	-134			
$5 \cdot 10^5$	61	-1660	-93	8,0	-146	-48	-67	-135
10^6	214	-2310	-95	58	-183	-13	-42	-88

$Re_x = 0$, наблюдается слабый рост возмущения с $n = 3$, однако значительно более сильная неустойчивость при вращении диска относится к возмущению с азимутальным номером $n = 1$. Частоты возникающих колебаний даны в табл. 2 только для возмущений с $n = 1$ и 3. Неустойчивость по отношению к возмущениям с $n = 3$ возникает, начиная с $Gr \approx 5 \cdot 10^5$, так же как и при покоящемся диске. Заметно раньше, при $Gr \approx 3,5 \cdot 10^5$, появляется неустойчивость к возмущениям с азимутальным номером $n = 1$.

Распределение амплитуды колебаний $|T^{n,1}(r,z)|$ при $n = 3$ близко к случаю покоящегося диска. Аналогичное распределение для $n = 1$, приведенное на фиг. 5, б, сильно отличается от $n = 3$. Это говорит о том, что неустойчивость при $n = 1$ имеет другую природу и определяется взаимодействием нисходящего потока вдоль оси симметрии сосуда с вращением жидкости.

4. Трехмерные конвективные течения конечной амплитуды. Расчеты в рамках линеаризованных уравнений позволяют определить порог устойчивости и вид нарастающих малых возмущений. Для расчета устанавливающихся трехмерных течений необходимо интегрировать полные нелинейные уравнения (1.1)–(1.3) с представлением всех искомым функций в виде (1.4). Возникающие при $t \rightarrow \infty$ трехмерные конечно-амплитудные движения могут зависеть от начальных условий. Например, если при $Re_c = Re_x = 0$ начальное поле температуры и скорости обладает диаметральной симметрией в плоскости (r, θ) , т.е. при всех r и z

$$T(-\theta) = T(\theta), \quad v_r(-\theta) = v_r(\theta), \quad v_z(-\theta) = v_z(\theta), \quad v_\theta(-\theta) = -v_\theta(\theta)$$

то эти условия будут выполнены в силу уравнений во все время движения. Для избежания такой ситуации начальные условия при $Gr > 0$ задавались в несимметричном виде

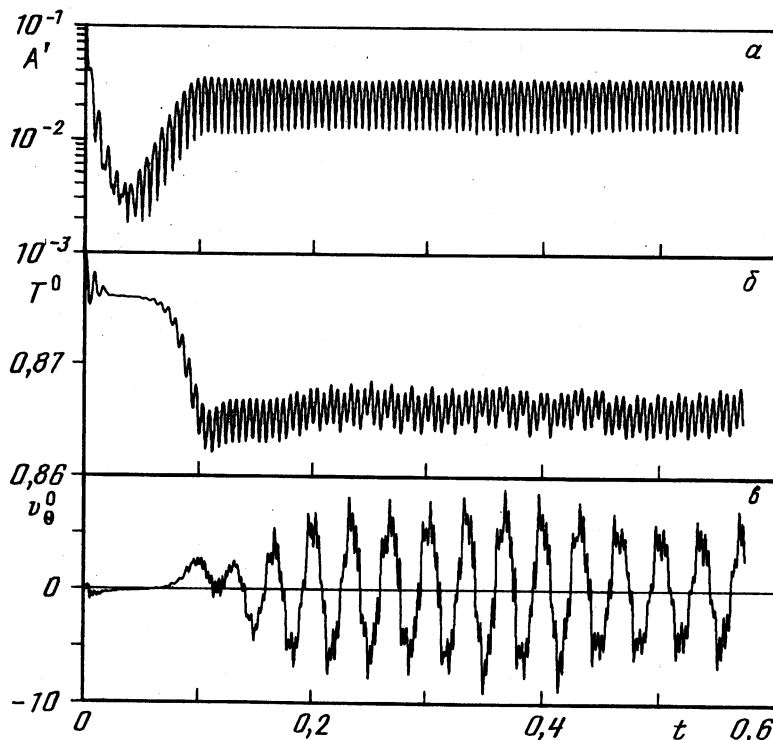
$$T(0, r, \theta, z) = T_{2D}(r, z) + Cr(1 - r^2)(1 - z^2)(\cos \theta + (0,25 - r^2) \sin \theta) \quad (4.1)$$

$$v(0, r, \theta, z) = v_{2D}(r, z)$$

Здесь T_{2D} , v_{2D} – распределения температуры и скорости в осесимметричном движении при соответствующих параметрах, C – нормировочный коэффициент. Поле температуры (4.1) содержит только нулевую и первую угловые гармоники, а составляющие при других азимутальных номерах n рождаются при $t > 0$ в силу нелинейных взаимодействий. Трехмерность поля температуры порождает при $Gr > 0$ трехмерное поле скорости, отсутствующее при $t = 0$.

Рассмотрим особенности трехмерной конвекции при $Re_c = Re_x = 0$ и $Gr = 10^6$. Осесимметричное движение при этих параметрах является стационарным. Согласно результатам исследования устойчивости, это движение неустойчиво к трехмерным возмущениям с азимутальными номерами $n = 3$ и 4 (табл. 1). Расчет проводился с пространственным разрешением $N_r = N_z = 32$. В разложении (1.4) сохранялись 10 членов ряда ($N_\theta = 10$).

На фиг. 6, а демонстрируется эволюция трехмерного возмущения с начальным распределением (4.1). Здесь изображена зависимость от времени взвешенной по объему



Фиг. 6. Эволюция трехмерного течения при $Re_c = Re_x = 0$, $Cr = 10^6$: a – амплитуда возмущений температуры A' (4.2); $b, в$ – осесимметричные компоненты температуры и азимутальной скорости в точке $(r_0, z_0) = (0,64, 0,5)$

амплитуды несимметричной составляющей температуры A' , где

$$A'(t)^2 = \frac{1}{\pi_0} \int_0^1 dr \int_0^{2\pi} rd\theta \int_0^1 dz |T(t, r, \theta, z) - \langle T(t, r, \theta, z) \rangle_\theta|^2 \quad (4.2)$$

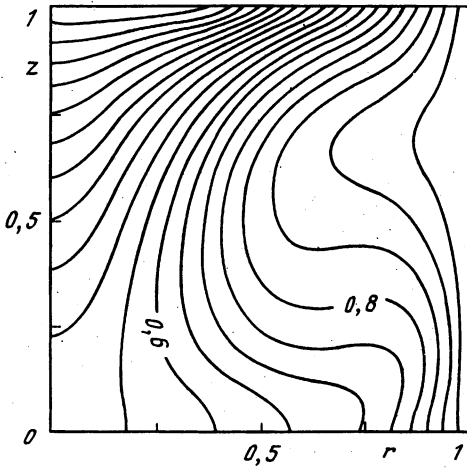
Угловыми скобками здесь обозначено осреднение по угловой координате, дающее нулевую угловую гармонику в разложении (1.4)

$$\langle f(t, r, \theta, z) \rangle_\theta = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(t, r, \theta, z) d\theta = f^0(t, r, z)$$

Нормировочный множитель C в начальном возмущении (4.1) соответствовал $A'(0) = 0,1$.

По виду графика $A'(t)$ можно условно выделить четыре временных отрезка эволюции течения. На первом этапе $0 \leq t \leq 0,04$ из начального возмущения (4.1) отбирается неустойчивая мода, амплитуда возмущения при этом сильно уменьшается. Второй временной отрезок $0,04 \leq t \leq 0,1$ описывается линеаризованными уравнениями, амплитуда возмущений здесь экспоненциально растет. После насыщения при $t = 0,1$ наступает этап формирования конечно-амплитудного трехмерного движения $0,1 \leq t \leq 0,2$. При $t > 0,2$ движение имеет вид автоколебательного статистически стационарного режима. Колебания $A'(t)$ в предельном режиме близки к периодическим.

Колебательный характер амплитуды трехмерной составляющей движения порождает колебания и в осесимметричной составляющей. На фиг. 6, б приведен график зависимости от времени осесимметричной компоненты температуры T^0 в точке $(r_0, z_0) =$



Фиг. 7. Изотермы осредненного трехмерного движения при $Re_c = Re_x = 0$ и $St = 10^6$

Анализ распределений амплитуд различных гармоник в различных точках показывает, что в предельном режиме доминируют гармоники с угловым номером $n = 3$, что соответствует результатам линейной теории устойчивости. Амплитуды старших гармоник незначительны, что свидетельствует о достаточности выбранного параметра $N_\theta = 10$.

Распределения средней (по времени) температуры $\langle T \rangle$ в плоскости (r, θ) в нескольких сечениях по высоте сосуда показывают, что линии уровня $\langle T \rangle$ близки к окружностям. Это означает, что осредненное движение близко к осесимметричному. На фиг. 7 изображены изотермы осесимметричной составляющей осредненного движения в плоскости (r, z) . В силу осесимметричности осредненного движения вклад остальных угловых гармоник в распределения средней скорости и температуры незначителен. Отметим близость изотерм (также и линии тока) осредненного трехмерного движения к соответствующим распределениям в осесимметричном движении (фиг. 2, а).

На фиг. 8, а изображены линии уровня среднеквадратичной (осреднение по времени и углу) амплитуды колебаний температуры T'_{rms} в плоскости (r, z)

$$T'_{rms}(r, z) = \langle (T(t, r, \theta, z) - T^\circ(t, r, z))^2 \rangle^{1/2}$$

Распределение трехмерных колебаний, полученное решением нелинейных уравнений, соответствует неустойчивой собственной функции линейной задачи (фиг. 5, а). Максимум T'_{rms} составляет около 10% $T_c - T_x$. На фиг. 8, б представлено распределение среднеквадратичной амплитуды колебаний температуры

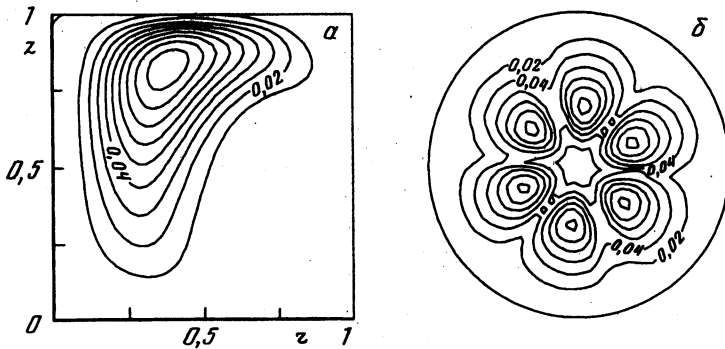
$$T'_{rms}(r, \theta, z) = \langle (T(t, r, \theta, z) - \langle T \rangle(r, \theta, z))^2 \rangle^{1/2}$$

в плоскости $z = 0,85$. Наличие четко выраженной угловой структуры $T'_{rms} \sim |\cos 3(\theta - \theta_0)|$ говорит о том, что трехмерная составляющая близка к стоячей волне.

5. Конвективные течения в модели выращивания кристаллов под флюсом. Поиск путей стабилизации конвективных течений в установке Чохральского — одна из основных задач применения численного моделирования. Одно из направлений такого поиска — вариация тепловых условий на границах области. В настоящей работе была проведена серия вычислений осесимметричных конвективных течений и их устойчивости в постановке, приближенной к технологическим условиям выращивания кристаллов под флюсом. В этой постановке свободная поверхность расплава считается

$= (0,64, 0,5)$. Кроме высокочастотных колебаний в сигнале $T^\circ(t, r_0, z_0)$ заметна низкочастотная модуляция.

Интересно поведение осесимметричной составляющей азимутальной компоненты скорости $v_\theta^\circ(t, r, z)$. В осесимметричном движении при $Re_c = Re_x = 0$, $v_\theta = 0$. В трехмерных движениях при наличии симметрии относительно некоторой плоскости $\theta = \theta_0$ $v_\theta^\circ(t, r, z) \equiv 0$. Таким образом, появление ненулевых значений функции $v_\theta^\circ(t, r, z)$ служит свидетельством наличия асимметрии движения. График $v_\theta^\circ(t, r_0, z_0)$ изображен на фиг 6, в. Отличительной чертой поведения $v_\theta^\circ(t, r_0, z_0)$ является наличие низкочастотных биеений, демонстрирующих периодическую смену направления вращения жидкости.



Фиг. 8. Распределения среднеквадратичной амплитуды колебаний температуры при $Re_c = Re_x = 0$, $Gr = 10^6$: *a* – в плоскости (r, z) , *b* – в плоскости $z = 0,85$

теплоизолированной, поэтому граничные условия на этой поверхности имеют вид

$$\frac{\partial v_r}{\partial z} = \frac{\partial v_\theta}{\partial z} = v_z = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial z} = 0, \quad \beta \leq r \leq 1, \quad z = \alpha.$$

В расчетах, проведенных для покоящихся сосуда и диска, получено, что в отличие от случая с линейным распределением температуры вдоль поверхности расплава осесимметричные конвективные движения остаются стационарными во всем исследованном диапазоне чисел Грасгофа $Gr \leq 10^7$.

Анализ устойчивости осесимметричных течений к малым трехмерным возмущениям показал, что растущие возмущения появляются, только начиная с $Gr = 1,2 \cdot 10^6$ и локализованы в подкристалльной области вблизи границы кристалла и свободной поверхности расплава. Неустойчивость при этом носит монотонный характер и соответствует угловым гармоникам $n = 5$ и 6 .

Заключение. Проведено прямое численное решение линеаризованных и нелинейных уравнений конвекции в приближении Буссинеска для модели выращивания кристаллов по методу Чохральского. Сопоставлены результаты осесимметричной и трехмерной постановки.

Численные результаты, полученные для рассмотренной геометрической конфигурации (отношения высоты расплава H и радиуса кристалла к радиусу тигля R_c равны 1 и 0,4 соответственно), при $Pr = 0,05$ выявляют в качестве источника колебаний неустойчивость крупномасштабного конвективного течения, распространяющегося от нагретой стенки (что может быть не так при других значениях упомянутых параметров, например при $Pr > 1$ и/или $H/R_c < 1$ преобладающую роль могут играть эффекты конвекции Рэлея–Бенара). Критические числа Грасгофа появления температурных колебаний определены как $Gr_c = 2,5 \cdot 10^6$ для осесимметричной модели и $5 \cdot 10^5$ для пространственного случая. Последнее уменьшается до $3,5 \cdot 10^5$ при вращении кристалла с угловой скоростью, соответствующей $Re_x = 10^3$.

Числовые значения критических чисел Грасгофа, которым соответствует появление колебательных режимов конвекции в тигле для модели метода Чохральского при малом числе Прандтля при параметрах теста, анонсированные несколько ранее в [8], по-видимому, определены впервые.

Количественные различия решений в пространственном и осесимметричном случаях при $Gr = 10^6$ не соответствуют утверждению работы [16], согласно которому эта разница в рассматриваемом диапазоне чисел Грасгофа отсутствует. Имеется также противоречие с результатами работы [11], полученными при меньших числах Грасгофа, где обнаружено несимметричное конвективное течение. Результаты рас-

четов трехмерных течений при $Gr > 6 \cdot 10^6$, имеющих существенно отличающийся от осесимметричного стохастический характер, предполагается изложить в отдельной статье.

Тепловые граничные условия играют существенную роль в развитии неустойчивости. Так, при теплоизолированной поверхности расплава (выращивание под флюсом) критические числа Грасгофа возрастают как в осесимметричном ($Gr_c > 10^7$), так и в пространственном ($Gr_c = 1,2 \cdot 10^6$) случаях. Это объясняет известный эмпирический факт влияния на качество кристаллов тепловых условий и указывает один из альтернативных путей управления конвекцией.

Авторы благодарят С.А. Никитина за предоставление результатов расчетов осесимметричных моделей и полезные обсуждения изложенных результатов, В.Г. Косушкина за их технологическую интерпретацию.

Работа выполнена в рамках программы НАУКА–НАСА (проект № ТМ-11) при финансовой поддержке РФФИ (проект № 96-01-00602).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Langlois W.E.* Digital simulation of Czochralski bulk flow in a parameter range appropriate for liquid semiconductors // *J. Crystal Growth*. 1977. V. 42. P. 386–399.
2. *Kobayashi N., Arizumi T.* Computational studies on the convection caused by crystal rotation in a crucible // *J. Crystal Growth*. 1980. V. 49. № 3. P. 419–425.
3. *Полежаев В.И.* Гидромеханика, тепло- и массообмен при росте кристаллов // *Итоги науки и техники. Сер. Механика жидкости и газа*. М.: ВИНТИ, 1984. Т. 18. С. 198–269.
4. *Müller G.* Convection and inhomogeneities in crystal growth from the melt // *Crystals: growth, properties and applications*. Berlin etc.: Springer, 1988. V. 12. P. 1–133.
5. *Müller G., Ostrogorsky A.* Convection in melt growth // *Handbook of Crystal Growth*. Amsterdam: Elsevier, 1994. V. 2. P. 711–819.
6. *Polezhaev V.I.* Modelling of hydrodynamics, heat and mass transfer processes on the basis of unsteady Navier-Stokes equations. Applications to the material sciences at earth and under microgravity // *Comput. Methods Appl. Mech. Engr.* 1994. V. 115. № 1–2. P. 79–92.
7. *Захаров Б.Г., Косушкин В.Г., Никитин С.А., Полежаев В.И.* Технологические эксперименты и математическое моделирование процессов гидродинамики и теплообмена при выращивании монокристаллов арсенида галлия // *Изв. РАН. МЖГ*. 1998. № 1. С. 134–142.
8. *Polezhaev V.I., Nikitin N.V., Nikitin S.A.* Gravity-driven and rotational low Prandtl melt flow in enclosure: nonlinear interaction, temperature oscillations and gravitational sensitivity // *Proc. Joint 10th Europ. and 6th Russian Symp. Phys. Sci. in Microgravity*, St.-Petersburg, Moscow: Inst. Probl. Mech. RAS, 1997. V. 1. P. 28–36.
9. *Carruthers J.R.* Thermal convection instabilities relevant to crystal growth from liquids // *Preparation and Properties of Solid State Materials* / Ed. W.R. Wilcox, R.A. Lefever. N.Y.; Basel: Marcel Dekker, 1977. V. 3. P. 1–121.
10. *Ristorcelli J.R., Lumley J.L.* Instabilities, transition and turbulence in the Czochralski crystal melt // *J. Crystal Growth*. 1992. V. 116. № 3/4. P. 447–460.
11. *Bottaro A., Zebib A.* Three dimensional thermal convection in Czochralski melt // *J. Crystal Growth*. 1989. V. 97. № 1. P. 50–58.
12. *Xiao Q., Derby J.J.* Three-dimensional melt flow in Czochralski oxide growth: high-resolution, massively parallel, finite element computations // *J. Crystal Growth*. 1995. V. 152. № 3. P. 169–181.
13. *Seidl A., McCord G., Müller G., Leister H.-J.* Experimental observation and numerical simulation of wave patterns in a Czochralski silicon melt // *J. Crystal Growth*. 1994. V. 137. № 3/4. P. 326–334.
14. *Бердников В.С., Полежаев В.И., Простомолотов А.И.* Течение вязкой жидкости в цилиндрическом сосуде при вращении диска // *Изв. АН СССР. МЖГ*. 1985. № 5. С. 33–40.
15. *Wheeler A.A.* Four test problems for the numerical simulation of flow in Czochralski crystal growth // *J. Crystal Growth*. 1991. V. 102. № 4. P. 691–695.
16. *Bückle U., Schäfer M.* Benchmark results for the numerical simulation of flow in Czochralski crystal growth // *J. Crystal Growth*. 1993. V. 126. № 4. P. 682–694.

17. *Polezhaev V.I., Ermakov M.K., Nikitin N.V., Nikitin S.A.* Nonlinear interactions and temperature oscillations in low Prandtl melt of Czochralski model: validation of computational solutions for gravitydriven and rotatory flows // Proc. Intern. Symp. on Adv. in Comput. Heat Transfer, Cesme, Turkey, 1997. N.Y.: Begel House. 1998. P. 492–499.

18. *Никитин Н.В.* Спектрально-конечно-разностный метод расчета турбулентных течений несжимаемой жидкости в трубах и каналах // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1994. Т. 34. № 6. С. 909–925.

19. *Никитин Н.В.* Статистические характеристики пристенной турбулентности // Изв. АН. МЖГ. 1996. № 3. С. 32–43.

20. *Harlow F.H., Welch J.E.* Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface // Phys. Fluids. 1965. V. 8. № 12. P. 2182–2189.

21. *Williams G.P.* Numerical integration of the three-dimensional Navier-Stokes equations for incompressible flow // J. Fluid Mech. 1969. V. 37. Pt 4. P. 727–750.

Москва

Поступила в редакцию
17.III.1998