

## СМЕШАННАЯ КОНВЕКЦИЯ В РЕЖИМАХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО ВРАЩЕНИЯ КРИСТАЛЛА И ТИГЛЯ В МЕТОДЕ ЧОХРАЛЬСКОГО

### АННОТАЦИЯ

Проведено численное моделирование смешанной конвекции в расплаве в варианте метода Чохральского с вращающимися в одну и в противоположные стороны кристаллом и тиглем. Расчеты проведены методом компактных разностей (схемы повышенного порядка точности). Исследованы гидродинамика расплава с  $Pr = 0,05$  и конвективный теплообмен при различных соотношениях чисел  $Gr$ ,  $Re_K$ ,  $Re_T$ . Различные режимы ламинарной термогравитационной конвекции были исходными для расчетов смешанной конвекции. Изучены эволюция пространственной формы течения, закономерности локального и интегрального теплообмена при каждом типе конвекции с ростом чисел Грасгофа и Рейнольдса.

### 1. ВВЕДЕНИЕ

В вариантах метода Чохральского при вытягивании из расплавов монокристаллов оксидных материалов применяется простейший способ управления гидродинамикой и конвективным теплообменом — вращение кристалла. При вытягивании крупногабаритных кристаллов щелочно-галогенидных материалов и кремния дополнительно используется вращение тигля. Делается это с целью сгладить влияние возможных несовершенств теплового узла и симметризовать распределение температуры на внешних стенках тигля и на образующих кристалла. Кроме того, делаются попытки минимизировать влияние принципиально неустраняемой и плохо управляемой тепловой гравитационно-капиллярной конвекции, возникающей из-за перепада температуры между фронтом кристаллизации (ФК) и стенками тигля [1—8]. Процессы перехода от режима свободной конвекции к технологически оптимальным режимам смешанной или вынужденной конвекции при вращении кристалла и тигля до настоящего времени практически не исследованы [6—8]. Поэтому нет методической базы для осознанного выбора соотношений угловых скоростей вращения кристалла и тигля. Данная работа является развитием работ [4—7]. Численно, методом компактных разностей, вначале была исследована ламинарная термогравитационная конвекция, а затем на выбранные свободноконвективные режимы (при заданных  $Gr$ ) накладывалось равномерное вращение кристалла и исследовались эволюция структуры течения и теплообмен с ростом числа Рейнольдса  $Re_K$  при  $Pr = 0,05$ . Затем выбирались режимы смешанной конвекции при заданных  $Gr$  и  $Re_K$  и изучалось влияние со- и противовращения тигля в широком диапазоне  $Re_T$ .

Расчеты проведены при значении числа Прандтля  $Pr = 0,05$ , характерном для жидких металлов, близком к значению для расплава кремния и соответствующем расплаву эвтектики галлий-индий-олово, который используется в качестве имитатора расплава кремния при физическом моделировании.

### 2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Идеализированная модель процессов в системе “тигель—расплав—кристалл” — это смешанная конвекция у охлаждаемых и равномерно вращающихся дисков, частично закрывающих свободную поверхность жидкости, находящуюся в неподвижном или в равномерно вращающемся цилиндрическом контейнере с подогреваемыми боковыми стенками. Использована система уравнений конвекции в приближении Буссинеска и в предположении осевой симметрии полей движения и температуры в переменных вихрь, функция тока, температура, азимутальная скорость. Система уравнений и граничных условий для смешанной конвекции:

дно тигля (жесткое, адиабатическое):

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + U \frac{\partial \omega}{\partial r} + V \frac{\partial \omega}{\partial z} - \frac{U \omega}{r} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial z} (W^2) =$$

$$= \Delta \omega - \frac{\omega}{r^2} - Gr \frac{\partial \theta}{\partial r};$$

$$\frac{\partial W}{\partial t} + U \frac{\partial W}{\partial r} + V \frac{\partial W}{\partial z} + \frac{UW}{r} = \Delta W - \frac{W}{r^2};$$

$$\Delta \psi - \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} = r \omega;$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + U \frac{\partial \theta}{\partial r} + V \frac{\partial \theta}{\partial z} = \frac{1}{Pr} \Delta \theta;$$

$$\psi = 0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial z} = 0, \quad \frac{\partial \theta}{\partial z} = 0, \quad W = A^2 r, \quad z = 0, \quad 0 \leq r \leq R_T;$$

боковая поверхность

$$\psi = 0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial r} = 0, \quad \theta = 1, \quad W = AR_T, \quad 0 \leq z \leq H, \quad r = R_T;$$

свободная поверхность (теплоизолирована)

$$\psi = 0, \quad \omega = 0, \quad \frac{\partial \theta}{\partial z} = 0, \quad \frac{\partial W}{\partial z} = 0, \quad z = H, \quad 1 \leq r \leq R_T;$$

фронт кристаллизации

$$\psi = 0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial z} = 0, \quad \theta = 0, \quad W = r Re_K, \quad z = H, \quad 0 \leq r \leq 1;$$

ось симметрии

$$\psi = 0, \quad \omega = 0, \quad \frac{\partial \theta}{\partial r} = 0, \quad W = 0, \quad 0 \leq z \leq H, \quad r = 0.$$

Здесь  $A = R_K/R_T$ . При приведении уравнений к безразмерному виду в качестве масштабов использованы: масштаб длины — радиус кристалла  $R_K$ ; температуры — разность температур между кромкой кристалла и стенками тигля  $\Delta T$ ; скорости — линейная скорость кромки кристалла  $\omega_K R_K$ . Вычисления проводились методом компактных разностей на неравномерных структурированных сетках. Количество узлов 7000 и 28 000 с минимальным шагом по пространственной переменной  $h = 0,004R_T$  и  $h = 0,002R_T$  соответственно. Схема расчетной области показана на рис. 1.

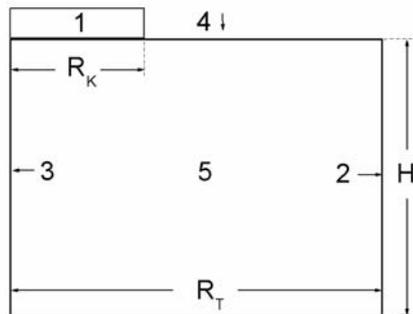


Рис. 1. Схема расчетной области: 1 — кристалл; 2 — тигель; 3 — ось симметрии; 4 — свободная граница расплава; 5 — расплав

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

Локальные характеристики в режиме смешанной конвекции в данном случае зависят от относительного вклада конкурирующего со свободной конвекцией вынужденного течения, которое вызвано вращающимися с разными угловыми скоростями кристаллом и тиглем. В [4—7] экспериментально и численно было показано, что в системе с неподвижным тиглем при достижении критического значения  $Re_K$ , зависящего от  $Gr$  и  $Ma$ , под вращающейся поверхностью возникает центробежный вихрь и формируется четкая граница раздела течений центробежной и свободноконвективной природы. Положением границ раздела в объеме и столкновения на свободной поверхности или под ФК вынужденного и свободноконвективного потоков определяются интенсивность и степень радиальной однородности теплообмена на ФК. Было показано, что существуют режимы с соотношениями  $Re_K$ ,  $Gr$  и  $Ma$ , при которых изотермы вблизи модельного фронта кристаллизации наиболее близки к плоским и радиальные распределения локальных тепловых потоков наиболее равномерны. Можно было ожидать, что именно в этих режимах фронт кристаллизации будет плоским. Поэтому положение границы встречи потоков является важным технологическим параметром [3—8], зависящим от  $Gr/Re_K^2$  при заданном  $Pr$ . Выводы, сделанные из экспериментальных данных и по результатам численного моделирования на однофазных системах, были подтверждены экспе-

риментально с использованием легкоплавких жидкостей—имитаторов расплавов.

Естественны вопросы — можно ли с помощью вращения тигля эффективно управлять гидродинамикой и теплообменом или насколько сильно повлияет вращение тигля, которое необходимо для устранения азимутальных несовершенств узла, и можно ли нежелательные эффекты нивелировать с помощью вращения кристалла? Исходя из таких соображений и имея результаты расчетов в широком диапазоне по  $Re_K$  при значениях  $Gr = 2,3 \cdot 10^4$  и  $4,7 \cdot 10^5$ , были выбраны исходные режимы. Структура течения для них показана на рис. 2 и рис. 3 (блок 3 при  $Re_T = 0$ ). Относительный радиус модели кристалла  $R_T/R_K = 2.76$  и относительная высота слоя жидкости в тигле  $H/R_T = 0.7$  были фиксированы во всех случаях.

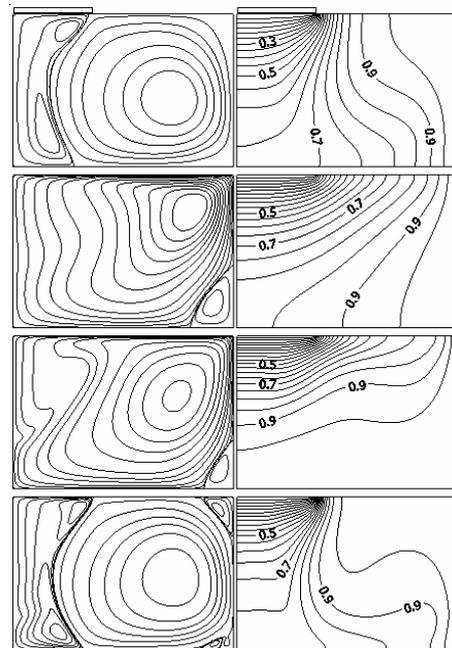


Рис. 2. Структура течения в исходных режимах (сверху вниз: 1 —  $Re_K = 260$ ,  $Gr = 2,3 \cdot 10^4$ ; 2 —  $Re_K = 1040$ ,  $Gr = 2,3 \cdot 10^4$ ; 3 —  $Re_K = 2070$ ,  $Gr = 2,3 \cdot 10^4$ ; 4 —  $Re_K = 1300$ ,  $Gr = 4,7 \cdot 10^5$ )

Выбранные режимы характеризуются тем, что если при заданном значении  $Gr = 2,3 \cdot 10^4$  проследить за качественной перестройкой структуры течения с ростом  $Re_K$ , то можно выделить характерные стадии, которым соответствуют изменения закономерностей теплообмена. С ростом  $Re_K$  при его критическом значении под ФК возникает вихрь центробежной природы, размеры которого растут с  $Re_K$ . При  $Re_K = 260$  центробежный вихрь занимает практически все пространство под ФК. В этом режиме интегральный коэффициент теплоотдачи ниже, чем в режиме свободной конвекции, но еще не достиг минимального значения. При  $Re_K = 1040$  свободная конвекция почти подавлена и коэффициент теплоотдачи вырос относительно минимального значе-

ния, которое наблюдается при  $Re_K = 530$ . При  $Re_K = 2070$  и  $3110$  свободная конвекция практически подавлена и в закрученном восходящем потоке на оси наблюдаются последовательно распад вихря и возникновение рециркуляционной зоны (рис. 2, 3).

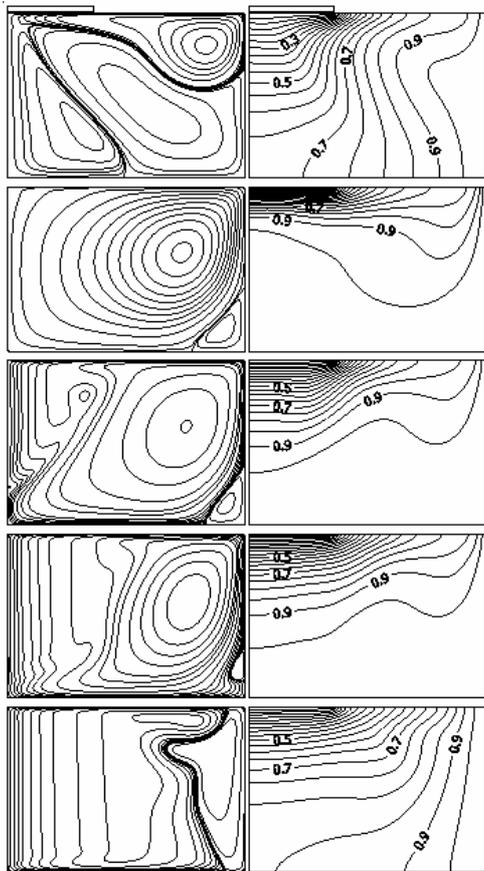


Рис. 3. Зависимость структуры течения от  $Re_T$  при  $Pr = 0,05$ ,  $Re_K = 3110$ ,  $Gr = 2,3 \times 10^4$ : 1 —  $Re_T = -450$ ; 2 —  $Re_T = -132$ ; 3 —  $Re_T = 0$ ; 4 —  $Re_T = 500$ ; 5 —  $Re_T = 2000$

Т.е. это режимы с сильно отличающейся гидродинамической структурой. Направления движения потоков можно понять, анализируя рис. 9, на котором показаны радиальные распределения осевой компоненты скорости в центральном сечении по высоте слоя жидкости. Значения динамических параметров соответствуют рис. 3, 6. Режим с параметрами  $Re_K = 1300$ ,  $Gr = 4,7 \cdot 10^5$  на качественном уровне (в смысле зависимости  $Nu$  от  $Re_K$  при фиксированном  $Gr$ ) соответствует из вышеперечисленных случаю с  $Re_K = 260$ . Соответствующая ему структура течения представлена на рис. 2 (блок 4). Видно, что с ростом абсолютных значений  $Re_K$  и  $Gr$ , но при примерно одинаковых или близких значениях  $Gr/Re_K^2$  пространственная форма течения качественно совпадает. Но свободная конвекция подавляется с меньшей эффективностью, поскольку ее структура сильно изменилась от режима с существенным вкладом теплопроводности к режиму с преобладанием конвективного теплообмена. Этот факт помогает понять сравнение формы изотерм в

свободноконвективных вихрях на рис. 2 в блоках 1 и 4. Блоком здесь названа пара — изолинии функции тока и поле изотерм. При больших значениях  $Gr$  в интенсивном свободноконвективном вихре форма изотерм демонстрирует сильное устойчивое расслоение жидкости по температуре и плотности и резкое увеличение градиента температуры у кромки кристалла.

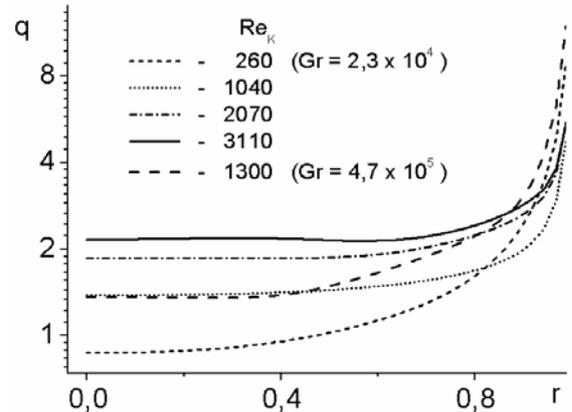


Рис. 4. Радиальные распределения локальных тепловых потоков

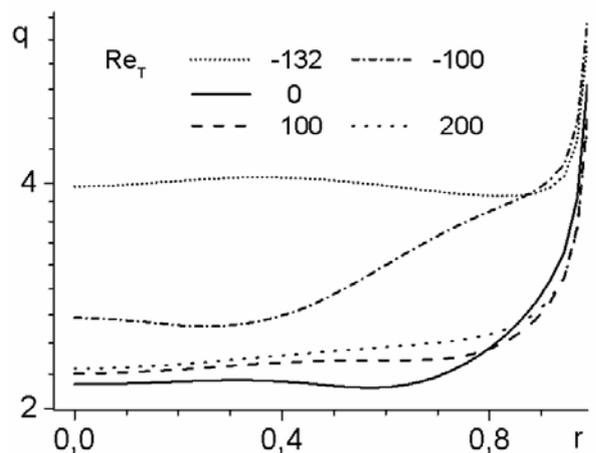


Рис. 5. Радиальные распределения локальных тепловых потоков,  $Re_K = 3110$ ,  $Gr = 2,3 \cdot 10^4$

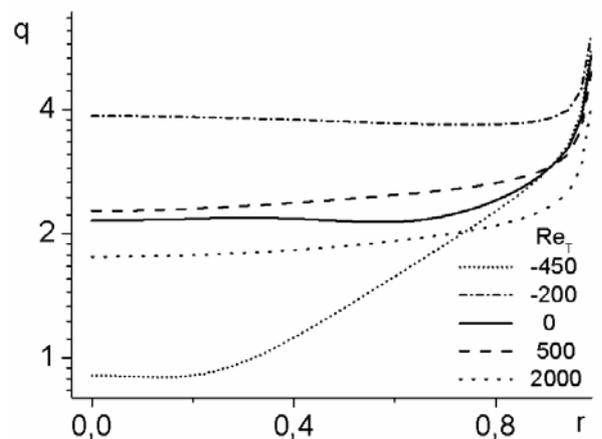


Рис. 6. Радиальные распределения локальных тепловых потоков,  $Re_K = 3110$ ,  $Gr = 2,3 \cdot 10^4$

Соответствующие этим режимам радиальные распределения локальных тепловых потоков на фронте кристаллизации представлены на рис. 4. Значения тепловых потоков на рис. 4—6 представлены в логарифмическом масштабе, чтобы разнести кривые их радиальных зависимостей. Кривые, соответствующие  $Re_K = 2070$  и  $3110$ , например, показывают, что распределения близки к тому наиболее однородному, которого можно добиться с помощью регулирования угловой скорости вращения кристалла при данной интенсивности термогравитационной конвекции.

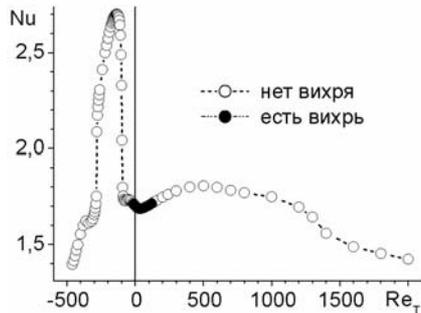


Рис. 7. Зависимости  $Nu$  от  $Re_T$ ;  $Re_K = 3110$ ,  $Gr = 2,3 \cdot 10^4$

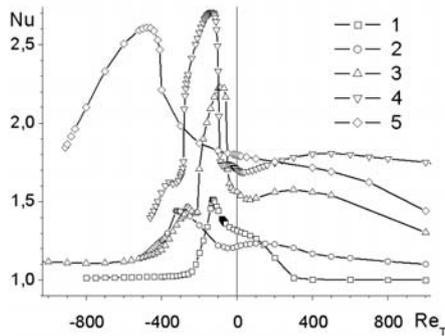


Рис. 8. Зависимости  $Nu$  от  $Re_T$ : 1 —  $Re_K = 260$ ,  $Gr = 2,3 \cdot 10^4$ ; 2 —  $Re_K = 1040$ ,  $Gr = 2,3 \cdot 10^4$ ; 3 —  $Re_K = 2070$ ,  $Gr = 2,3 \cdot 10^4$ ; 4 —  $Re_K = 3110$ ,  $Gr = 2,3 \cdot 10^4$ ; 5 —  $Re_K = 1300$ ,  $Gr = 4,7 \cdot 10^5$

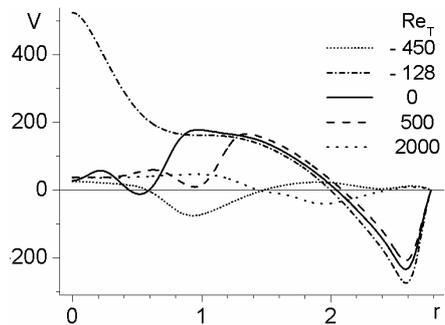


Рис. 9. Профили вертикальной компоненты скорости при  $z = H/2$ ;  $Re_K = 3110$ ,  $Gr = 2,3 \cdot 10^4$

Следующий шаг — изучение влияния вращения тигля. На рис. 5 показаны радиальные распределения локальных тепловых потоков при относительно небольших угловых скоростях в режимах со- и противовращения (соответствующие числа Рейнольдса

с отрицательным знаком). На рис. 6 представлены данные для больших абсолютных значений угловой скорости вращения тигля. Распределения  $q(r)$ , соответствующие  $Re_T = -132$  на рис. 5 и  $Re_T = -200$  на рис. 6, однозначно показывают, что тонкая подстройка с помощью управления вращением тигля возможна. Но остается открытым вопрос об устойчивости таким образом подобранных режимов относительно вариаций  $\omega_T$ , обобщающие результаты расчетов зависимости интегральных коэффициентов теплоотдачи от  $Re_T$  представлены на рис. 7, 8. Вращение тигля в одну сторону с кристаллом играет стабилизирующую роль. С ростом  $Re_T$  система приближается к режиму свободной конвекции в равномерно вращающейся системе (рис. 3, блок 5). При вращении кристалла и тигля в противоположные стороны структура течения сложнее из-за конкуренции между вращающимися поверхностями (рис. 3). Соответственно меняются закономерности теплообмена.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Численно исследована смешанная конвекция жидкости с  $Pr = 0,05$ . Исходный режим — термогравитационная конвекция. Вынужденная конвекция возбуждалась вращающимися с различными угловыми скоростями и в разных направлениях кристаллом и тиглем. Показано, что существуют соотношения параметров, отвечающих за относительную роль сил плавучести и центробежных сил, при которых радиальные распределения локального теплового потока практически идеально равномерны. Выводы о возможных плоских формах фронта кристаллизации подтверждают эксперименты на модельной жидкости (с  $Pr = 45,6$ ) с реальной кристаллизацией.

Работа была поддержана РФФИ (гранты № 02-01-00808а и № 05-01-00813а) и СО РАН (интеграционные проекты № 155-2003 и № 84-2006).

## СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ

$Gr = \beta g \Delta T R_K^3 / \nu^2$  — число Грасгофа;

$Ra = \beta g \Delta T R_K^3 / \alpha \nu$  — число Рэлея;

$Ma = (-\partial \sigma / \partial T) \cdot \Delta T \cdot R_K / \mu \alpha$  — число Марангони;

$Re_K = \omega_K R_K^2 / \nu$ ;  $Re_T = \omega_T R_T^2 / \nu$  — числа Рейнольдса;

$Pr = \nu / \alpha$  — число Прандтля;

$T$  — температура, К;

$\Delta T$  — перепад температуры, К;

$H$  — высота слоя расплава;

$R_K, R_T$  — радиусы кристалла и тигля;

$\omega_K, \omega_T$  — угловые скорости вращения кристалла и тигля;

$\beta$  — коэффициент объемного расширения;

$g$  — ускорение свободного падения;

$a = \lambda / \rho c_p$  — коэффициент температуропроводности;

$\mu$  — коэффициент динамической вязкости;

$\nu$  — коэффициент кинематической вязкости;

$\sigma$  — коэффициент поверхностного натяжения;

$\lambda$  — коэффициент теплопроводности.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Тепло- и массообмен** при получении монокристаллов / П.К. Конаков, Г.Е. Веревошкин, Л.А. Горяинов и др. М.: Металлургия, 1971. 240 с.
2. **Шашков Ю.М.** Выращивание монокристаллов методом вытягивания. М.: Металлургия, 1982. 312 с.
3. **Полежаев В. И.** Гидродинамика, тепло- и массообмен при росте кристаллов // Итоги науки и техники, сер. МЖГ. М.: ВИНТИ, 1984. Т. 18. С. 198—268.
4. **Бердников В.С., Борисов В.Л., Марков В.А., Панченко В.И.** Лабораторное моделирование макроскопических процессов переноса в расплаве при выращивании монокристаллов методом вытягивания // Гидродинамика и теплообмен в технологии получения материалов. М.: Наука, 1990. С. 68—88.
5. **Бердников В.С., Винокуров В.В., Панченко В.И., Соловьев С.В.** Теплообмен в классическом методе Чохральского // ИФЖ. 2001. Т. 74. № 4. С. 122—127.
6. **Berdnikov V.S., Vinokurov V.V., Gaponov V.A., Markov V.A.** Complex simulation of crystal pulling from the melt // Single crystal growth and heat & mass transfer: Proc. 4-th Int.Conf. Obninsk. 2001. Vol. 1. P. 80—106.
7. **Berdnikov V.S., Vinokourov V.A., Vinokourov V.V., Gaponov V.A.** Mixed convection flow of the melt and heat transfer during Czochralski crystal growth // Single crystal growth and heat & mass transfer: Proc. 5-th Int.Conf. Obninsk. 2003. Vol. 1. P. 43—67.
8. **Математическое** моделирование конвективного теплообмена на основе уравнений Навье-Стокса / В.И. Полежаев, А.В. Бунэ и др. М.: Наука, 1987. 272 с.