

В.С. Бердников, В.А. Винокуров, В.В. Винокуров, В.А. Гапонов

Институт теплофизики СО РАН, Новосибирск, Россия

СМЕШАННАЯ КОНВЕКЦИЯ В МЕТОДЕ ЧОХРАЛЬСКОГО С НЕПОДВИЖНЫМ ТИГЛЕМ

АННОТАЦИЯ

Исследованы режимы смешанной конвекции расплавов с числами Прандтля 0.05, 16, 45.6 в методе Чохральского. Численные исследования проведены методами конечных и компактных разностей. Исследованы гидродинамика и теплообмен при наложении вынужденной конвекции, возбуждаемой вращающимся кристаллом на заданный режим тепловой гравитационно-капиллярной или термогравитационной конвекции.

1. ВВЕДЕНИЕ

В наиболее широко применяемом для вытягивания монокристаллов из расплавов методе Чохральского тепловая гравитационно-капиллярная конвекция, возникающая из-за перепада температуры между фронтом кристаллизации (ФК) и стенками тигля, принципиально неустранима и плохо управляема [1—11]. Простейший способ управления гидродинамикой и конвективным теплообменом в системах “тигель—расплав—кристалл”, применяемый в технологии, — это вращение кристалла. Но процесс перехода от режима свободной конвекции к технологически оптимальным режимам смешанной или вынужденной конвекции при увеличении угловой скорости вращения кристалла до настоящего времени не исследован достаточно полно. Для решения вопроса о корреляции условий роста кристалла и его объемных кристаллографических характеристик необходимо прогнозировать гидродинамику расплава в объеме и в пограничном слое на фронте кристаллизации и обусловленные ее особенностями формы изотерм и радиальные распределения локальных тепловых потоков. Данная работа является продолжением цикла работ [4—10]. Численно, методами конечных и компактных разностей, вначале была исследована ламинарная термогравитационная и тепловая гравитационно-капиллярная конвекция, а затем на выбранные свободноконвективные режимы (при заданных начальных значениях $G\Gamma$ и Ma) накладывалось равномерное вращение кристалла и исследовались эволюция структуры течения и теплообмен с ростом числа Рейнольдса для $Pr = 0,05; 16; 50$. Экспериментально изучено в ламинарных режимах влияние комбинации сил плавучести и термокапиллярного эффекта при добавке центробежных сил на особенности гидродинамики, конвективный теплообмен и на форму фронта кристаллизации. В качестве жидкости—имитатора расплава использован гексадекан с числом Прандтля $Pr = 45,6$.

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 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:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + U \frac{\partial \omega}{\partial r} + V \frac{\partial \omega}{\partial z} - \frac{U \omega}{r} = \frac{1}{Re} \left(\Delta \omega - \frac{\omega}{r^2} \right) - \frac{Gr}{Re^2} \frac{\partial \theta}{\partial r};$$

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

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

дно тигля (жесткое, адиабатическое):

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

боковая поверхность:

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

свободная поверхность (с учетом термокапиллярного эффекта на теплоизолированной границе):

$$\psi = 0, \quad \omega = -\frac{Ma}{Pr Re} \frac{\partial \theta}{\partial z}, \quad \frac{\partial \theta}{\partial z} = 0, \quad \frac{\partial W}{\partial z} = 0,$$

$$z = H, \quad 1 \leq r \leq R_T;$$

фронт кристаллизации:

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

ось симметрии:

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

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 ΔT ; скорости — линейная скорость кромки кристалла $\omega_K R_K$. Численное моделирование

методом конечных разностей проводилось в основном на равномерной сетке 160×160 или 320×320 . Схема расчетной области понятна из рис. 1, 2.

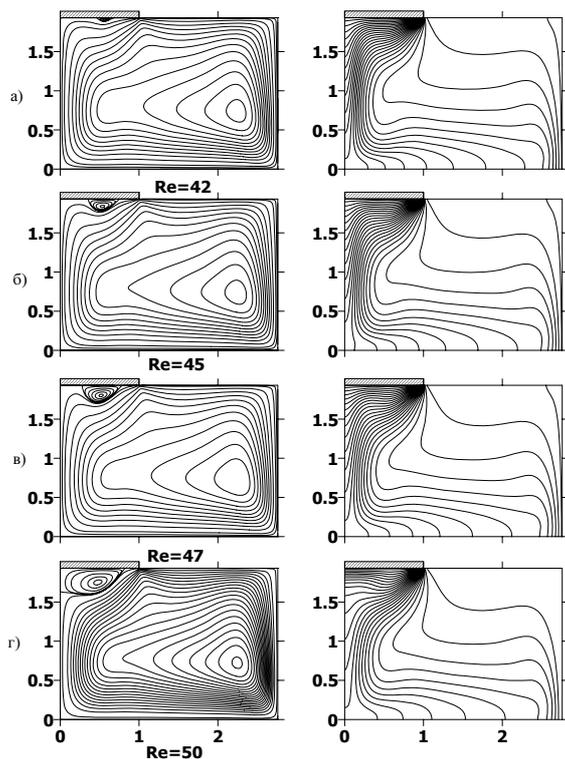


Рис. 1. Зависимость структуры течения от Re при $Pr = 16$

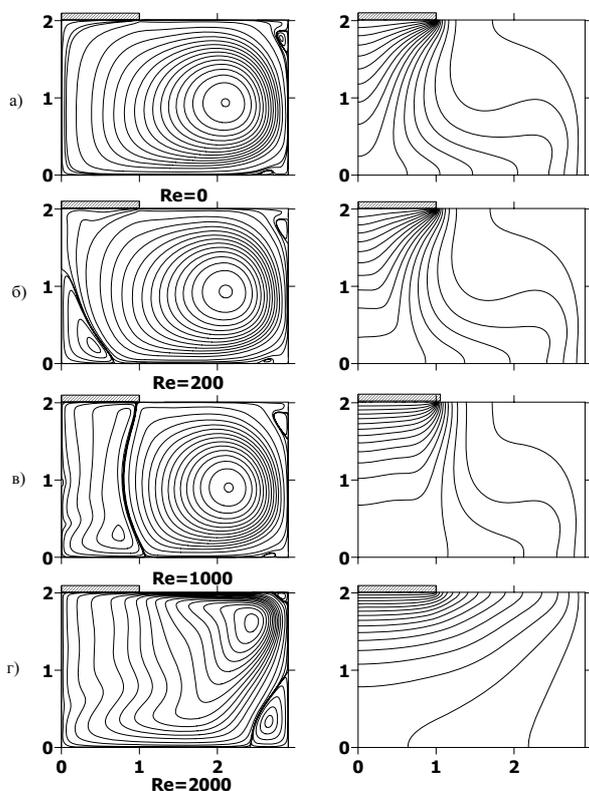


Рис. 2. Зависимость структуры течения от Re при $Pr = 0,05$, $Gr = 84\,170$, $Ma = 103,5$

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

Локальные характеристики в режиме смешанной конвекции зависят от относительного вклада конкурирующего со свободной конвекцией вынужденного течения. В [4, 5, 7] экспериментально было показано, что 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 (рис. 1, 2) определяются интенсивность и степень радиальной однородности теплообмена на ФК (рис. 3—7). Поэтому положение границы встречи потоков является важным технологическим параметром [3—5], зависящим от Gr/Re_K^2 при заданном Pr .

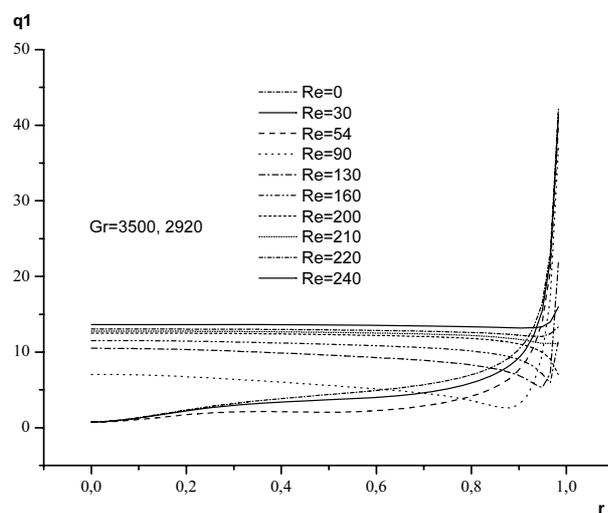


Рис. 3. Зависимости радиальных распределений локальных тепловых потоков от Re при $Pr = 16$

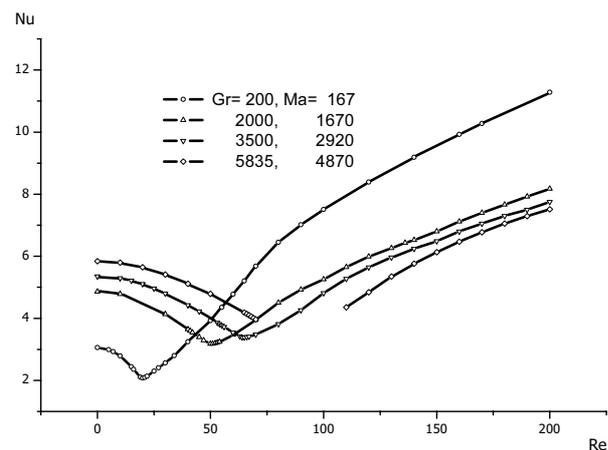


Рис. 4. Зависимость Nu от Re при $Pr = 16$

Для фиксированных перепадов температуры, соответствующих: $Gr = 200$, $Ma = 167$; $Gr = 2000$, $Ma = 1669$; $Gr = 3500$, $Ma = 2920$; $Gr = 5835$, $Ma = 4870$ при $Pr = 16$ была прослежена качественная перестройка структуры течения при увеличении вклада вынужденной конвекции в ее формирование для

чисел $0 \leq Re_k \leq 250$. На рис. 1 представлен пример универсального сценария эволюции структуры течения (изолиний функции тока ψ и изотерм) с ростом числа Re при $Gr = 2000$ и $Ma = 1669$, $Pr = 16$. На рис. 2 то же для $Pr = 0,05$. Слева всюду ось симметрии. Относительный радиус модели кристалла $R_T/R_K = 2.76$, относительная высота слоя жидкости в тигле $H/R_T = 0.7$ во всех случаях. До числа $Re = 40$ при $Pr = 16$ свободноконвективное течение полностью подавляет центробежное. Пространственная организация этого течения: от ФК вниз движется опускающаяся холодная струя, затем следуют радиальное растекание по адиабатическому дну к стенкам тигля, подъемное течение по нагретым боковым стенкам и радиальное течение к кромке кристалла вдоль свободной поверхности жидкости. С ростом Re в физическом эксперименте наблюдается вначале очень слабая подкрутка опускающей струи из-под ФК, и только на начальном участке струи. По мере роста ω_k растет длина закрученного участка. Течение центробежной природы появляется при $Re = 42$ (рис. 1, а): в области $r \approx R_k/2$ появился вихрь, в котором течение в плоскости $r-z$ направлено навстречу свободноконвективному. Структура глобального течения практически не изменилась, но в пограничном слое на вращающейся поверхности изменения кардинальные.

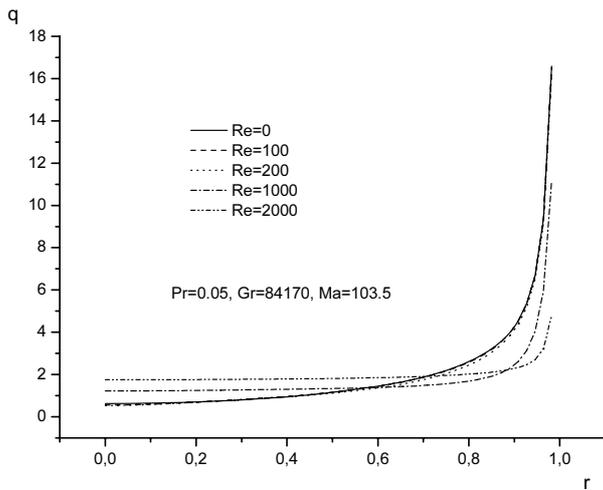


Рис. 5. Зависимости радиальных распределений локальных тепловых потоков от Re при $Pr = 0,05$

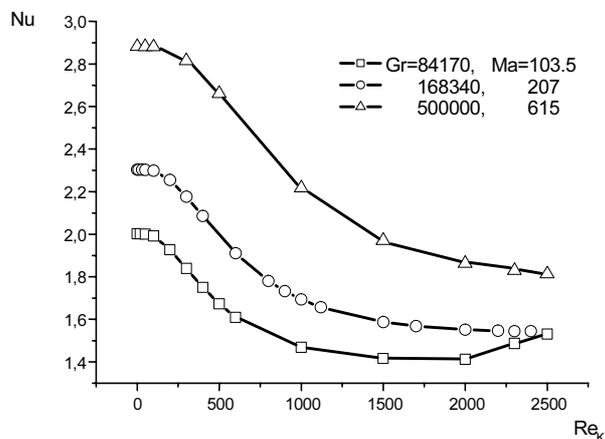


Рис. 6. Зависимость Nu от Re при $Pr = 0,05$

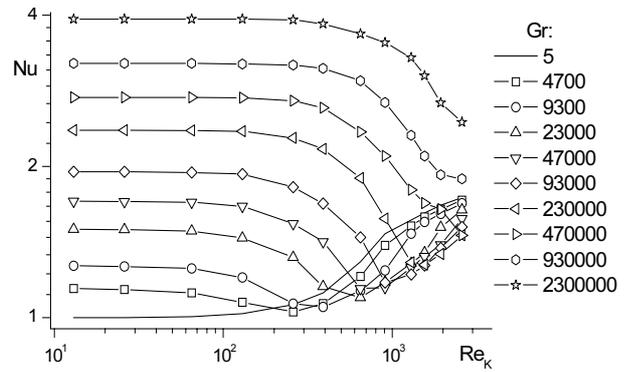


Рис. 7. Зависимость Nu от Re при $Pr = 0,05$

При физическом моделировании [4, 5, 7] размер отчетливо наблюдаемой зоны вынужденного течения с ростом Re практически не увеличивается по радиусу, а сразу же устанавливается практически равным R_k . В численных расчетах после возникновения кольцевого вихря с ростом Re область вынужденного течения увеличивается в радиальном и осевом направлениях (рис. 1, б—г). В диапазоне $50 \leq Re \leq 130$ с ростом Re , как и в эксперименте, быстро растут размеры центробежного вихря в осевом направлении. Граница встречи двух потоков при $Re = 136$ выходит на кромку кристалла. Процесс формирования и развития центробежного течения приводит к принципиальному изменению структуры пограничного слоя на ФК. Меняется направление обтекания ФК и его интенсивность. Соответственно меняется режим теплообмена (рис. 3—7). При увеличении Re наступает момент, когда вынужденное течение полностью подавляет свободноконвективное течение. В этих режимах циркуляция жидкости противоположна описанной выше: жидкость подтягивается к ФК, отбрасывается вдоль свободной поверхности жидкости к стенке тигля, опускается вниз вдоль нее и вновь подтягивается к ФК. Причем жидкость движется не только в радиальном и осевом, но и в азимутальном направлении, т.е. траектории движения частиц жидкости — это намотка на тор, сечение которого видно на рис. 2, г. При $Pr = 0,05$ на начальном этапе с ростом Re центробежный вихрь появляется не под вращающейся поверхностью, а у дна в приосевой области. Расчеты конечными разностями и с использованием схем повышенного порядка точности (методом компактных разностей) при исходных режимах термогравитационной и гравитационно-капиллярной природы дают один и тот же качественный результат: пространственная форма одна и та же, показанная на рис. 2, б. Но критические значения Re зависят от Gr и Ma . С ростом Re вихрь растет в осевом направлении и приобретает форму, универсальную не зависящую от Pr , рис. 2, в. Особенностью случая $Pr = 0,05$ является появление в закрученной струе сначала одной, затем двух рециркуляционных зон (рис. 2, в). Стадия распада закрученной струи слабо выражена, в отличие от случая $Pr = 16$ [5]. Представленные на рис. 1, 2 данные позволяют объяснить закономерности локальной теплоотдачи на ФК (рис. 3, 5) и зависимости

интегрального коэффициента теплоотдачи от Re (рис. 4, 6, 7).

Локальные тепловые потоки на ФК по сравнению с режимами свободной конвекции с ростом Re становятся все более однородно распределенными вдоль всего ФК, за исключением небольшой области около кромки кристалла. С точки зрения оптимизации технологии выращивания совершенных монокристаллов необходимо наличие плоского ФК. Из рис. 3 отчетливо видно, что замечательной особенностью обладает режим при $Re = 210$, когда граница встречи свободноконвективного и вынужденного потоков отнесена от кромки кристалла, но свободная конвекция еще полностью не подавлена. Кроме того, в этом режиме наиболее однородное распределение температуры в подкристалльной области. Т.о. подбирая режим вращения кристалла, можно получить почти плоский ФК и улучшить условия получения совершенных монокристаллов.

С ростом Re вначале наблюдается монотонное уменьшение среднего теплового потока к ФК до момента развития подкристалльного вихря центробежной природы (рис. 4, 6, 7). Начиная с Re , при котором развивается центробежная конвекция, начинается монотонный рост интегрального теплового потока вплоть до полного подавления свободной конвекции и далее. Отличие жидкометаллических сред, как и при свободной конвекции, состоит в том, что конвективный теплообмен вносит существенный вклад на фоне высокой теплопроводности, начиная с критических скоростей течения, определяемых Re (рис. 6, 7).

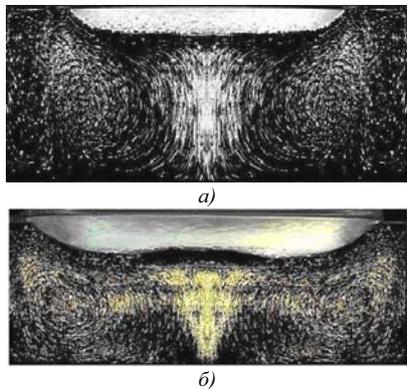


Рис. 8. Зависимость формы фронта кристаллизации от режима течения, $Pr = 45,6$: а — сопоставимый вклад свободной и вынужденной конвекции, $Gr = 3575$; $Ma = 3454$; $Re = 40,4$; б — подавляющее влияние вынужденной конвекции, $Gr = 4750$; $Ma = 4590$; $Re = 91$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведены исследования эволюции пространственной формы течения с ростом чисел Re при заданных Pr , Gr и Ma . При смешанной конвекции можно выделить следующие характерные стадии развития течения: 1) практически чисто тепловая гравитационно-капиллярная конвекция с подкрученной опускной струей холодной жидкости, но структура и направление глобальной циркуляции жидкости в тигле не меняется; 2) режим с характер-

ным именно для данной задачи разделением областей преобладающего влияния сил плавучести и термокапиллярного эффекта и центробежных сил, т.е. с четко выделенной границей раздела областей вынужденного и свободноконвективного течений в некотором диапазоне чисел Re , зависящем от Gr , Ma и Pr ; 3) режим полного подавления свободной конвекции вынужденной. Эксперименты на модельной жидкости с реальной кристаллизацией показали, что выводы о возможных формах фронта кристаллизации, сделанные по результатам исследований однофазной конвекции в различных режимах конвекции, подтверждаются.

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;

$Re = \omega_K R_K^2 / \nu$ — число Рейнольдса;

$Pr = \nu / a$ — число Прандтля;

T — температура, К;

ΔT — перепад температуры, К;

H — высота слоя расплава;

R_K, R_T — радиусы кристалла и тигля;

ω_K — угловая скорость вращения кристалла;

β — коэффициент объемного расширения;

g — ускорение свободного падения;

$a = \lambda / \rho C_p$ — коэффициент теплопроводности;

μ — коэффициент динамической вязкости;

ν — коэффициент кинематической вязкости;

σ — коэффициент поверхностного натяжения;

λ — 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., Панченко В.И.** Экспериментальное моделирование гидродинамики и теплообмена при выращивании монокристаллов методом Чохральского // Теплофизические явления при кристаллизации металлов: Сб. науч. тр. ИТ СО РАН. Новосибирск. 1982. С. 77—92.
5. **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.
6. **Бердников В.С., Панченко В.И., Соловьев С.В.** Тепловая гравитационно-капиллярная конвекция в методе Чохральского // Теплофизика кристаллизации и высокотемпературной обработки материалов: Сб. науч. тр. ИТ СО РАН. Новосибирск. 1990. С. 162—199.

7. **Бердников В.С., Панченко В.И., Соловьев С.В.** Конвективный теплообмен в режиме смешанной конвекции на модели метода Чохральского // Теплофизика кристаллизации и высокотемпературной обработки материалов: Сб. науч. тр. ИТ СО РАН. Новосибирск. 1990. С. 199—221.
8. **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.
9. **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.
10. **Berdnikov V.S., Vinokourov V.A., Vinokourov V.V., Garonov 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.
11. **Математическое** моделирование конвективного теплообмена на основе уравнений Навье-Стокса / В.И. Полежаев, А.В. Бунэ и др. М.: Наука, 1987. 272 с.