

УДК 536.242+536.248.2

Влияние падения уровня расплава в неподвижном тигле в методе Чохральского на конвективный теплообмен*

В.С. Бердников^{1,2}, В.В. Винокуров¹

¹Институт теплофизики им.С.С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск

²Новосибирский государственный технический университет

E-mail: berdnikov@itp.nsc.ru

В режимах смешанной конвекции в методе Чохральского численно исследовано влияние высоты слоя расплава на гидродинамику и конвективный теплообмен в диапазоне относительных высот слоя гептадекана $0,1 \leq H/R_T \leq 2,0$ с шагом 0,1. Расчеты выполнены с использованием метода конечных разностей при фиксированной скорости вращения кристалла, соответствующей числу Рейнольдса $Re = 95$, при значениях чисел Грасгофа, Марангони и Прандтля соответственно $Gr = 1215$, $Ma = 2930$, $Pr = 40,35$, при отношении радиуса тигля к радиусу кристалла $R_T/R_K = 1,94$. В данном диапазоне параметров течение имеет ламинарный, стационарный и осесимметричный характер. В работе изучена эволюция пространственной формы течения, полей скорости и температуры, радиальных распределений локальных тепловых потоков и интегрального теплообмена в зависимости от относительных высот слоя гептадекана.

Ключевые слова: рост кристаллов, термогравитационная конвекция, термокапиллярный эффект, смешанная конвекция, поля скорости и температуры, локальные тепловые потоки, численное моделирование, метод конечных разностей.

Введение

Основными и наиболее производительными методами получения монокристаллов для силовой и микроэлектроники, лазерной техники, нелинейной оптики, тепловизионной техники и многих других областей применения являются методы направленной кристаллизации из расплавов [1–4]. Все эти методы многовариантны и модифицируются с учетом различия теплофизических свойств исходных материалов и конструкций тепловых узлов [4–11]. Общим для методов направленной кристаллизации является то, что структурное совершенство получаемых кристаллов прежде всего зависит от сопряженного конвективного тепло- и массообмена в расплаве у фронта кристаллизации [3–14], т.е. на стадии перехода «расплав–кристалл». Гидродинамика расплава и конвективный теплообмен в области у фронта кристаллизации (ФК) определяют форму изотерм

* Исследования выполнены в рамках государственного задания ИТ СО РАН (код темы: 0257-2021-0003; номер гос. рег. 121031800213-0).

и распределения локальных тепловых потоков, которые и задают форму ФК во всех методах направленной кристаллизации. Особенности локального теплообмена создают термодинамические условия перехода «расплав – кристалл». Несмотря на широкое применение этих методов, многопараметрические теплофизические процессы при росте кристаллов изучены недостаточно полно и выращивание кристаллов во многом все еще является искусством и зависит от опыта технолога, особенно на стадии отработки нового технологического процесса [3 – 15].

Метод Чохральского наиболее широко применяется для вытягивания монокристаллов из расплавов различных материалов [1–3]. Конструкции тепловых узлов при вытягивании оксидных кристаллов, например, ортогерманата висмута (BGO), и щелочногаллоидных материалов из расплавов с числами Прандтля $Pr = 16 \div 45$ [4 – 9] существенно отличаются. Тем более они отличаются от тепловых узлов, применяемых при получении кристаллов кремния из расплава с $Pr = 0,02 \div 0,05$ [3, 9, 10]. Но во всех случаях кристалл вытягивается со свободной поверхности расплава, и даже при малых перепадах температуры между ФК и стенками тигля, такими, какие рассматривались в работах [4 – 7], возникает тепловая гравитационно-капиллярная конвекция, которая принципиально неустранима и плохо управляема [1, 9 – 15]. Независимо от способа и режима нагрева боковых стенок и дна тиглей в методе Чохральского на свободной поверхности расплавов присутствует радиальный градиент температуры, возникающий из-за перепада температуры между стенками тигля и холодным ФК. Поэтому в режиме естественной конвекции, кроме сил плавучести, действует термокапиллярный эффект и течение расплава имеет тепловую гравитационно-капиллярную природу, вследствие чего максимальная амплитуда радиальной компоненты скорости находится на свободной поверхности. В результате на кромку кристалла вдоль свободной поверхности набегает поток с температурой, близкой к температуре стенки тигля, и подплавляет периферию ФК. Кроме этого, в режиме тепловой гравитационно-капиллярной конвекции, обусловленной влиянием условий на кромке ФК на развитие пограничного слоя на ФК, усиливается радиальная неоднородность локального теплового потока на ФК [9 – 15]. Для оттеснения от кромки ФК натекающего потока перегретого расплава [9 – 15] и одновременно как способ управления гидродинамикой и конвективным теплообменом в классическом варианте метода Чохральского с неподвижным тиглем применяется подбор скорости вращения кристалла [1 – 15]. В результате дополнительного влияния центробежных сил под вращающимся ФК рост кристаллов происходит в режимах смешанной конвекции.

Своеобразие пространственных форм течений в режимах смешанной конвекции в системах «тигель – расплав – кристалл» классических вариантов метода Чохральского с неподвижным тиглем заключается в том, что в них наблюдается разделение на зоны преобладающего влияния центробежных сил под вращающимся ФК и подавляющее влияние сил плавучести в области у вертикальных стенок тигля [1 – 15]. В связи с этим в режимах, технологически наиболее близких к оптимальным, на свободной поверхности расплава появляется граница столкновения потоков, движущихся из-под вращающегося ФК и от стенки тигля. Положение этой границы может быть одним из признаков (и даже критериев) оптимальности режима конвективного теплообмена [12 – 15].

При реализации технологического процесса естественно стремиться поддерживать в ближайшей окрестности ФК неизменные термодинамические условия для перехода «расплав – кристалл», соответствующие получению кристалла совершенного кристаллографического качества (например, определенные экспериментально). Однако при вытягивании кристаллов из начального объема без подпитки уровень расплава в тигле монотонно

снижается, и, соответственно, должна меняться относительная роль сил плавучести, термокапиллярного эффекта и центробежных сил. Как влияет снижение уровня расплава в практически важном диапазоне относительных высот H/R_T на эволюцию пространственной формы течения, интенсивность течения и на конвективный теплообмен, практически не изучено. Настоящая работа направлена на исследование влияния снижения высоты слоя расплава на конвективный теплообмен при фиксированных перепаде температуры и скорости вращения кристалла. Изучена гидродинамика и теплообмен в ламинарных режимах течения при дискретном уменьшении относительной высоты слоя расплава H/R_T . Результаты исследований важны для обоснованного поиска методов управления гидродинамикой и теплообменом.

Постановка задачи

Правая часть осесимметричной геометрии расчетной области показана на рис. 1 (здесь H — высота слоя расплава в тигле). Тигель радиусом R_T , содержащий расплав, имел цилиндрическую симметрию и фиксированные прямолинейные границы S1 и S2. Фронт кристаллизации S4 считался плоским и располагался на уровне свободной поверхности расплава S3. В численной модели для поля скорости на границах тигля и на ФК, за исключением поверхности расплава, выполнялись условия прилипания. На неизотермической свободной поверхности S3 учитывалось наличие термокапиллярного эффекта, также на поверхности S3 ставилось условие баланса тангенциальной компоненты силы, обусловленной градиентом поверхностного натяжения и сил трения в режиме тепловой гравитационно-капиллярной конвекции. Задавались постоянные, но разные температуры: холодная модель кристалла S4 и нагретые боковые стенки тигля S2. На дне тигля и на свободной поверхности жидкости ставились условия теплоизоляции. Свободная поверхность расплава от стенок тигля до кромки кристалла считалась плоской и недеформируемой. Заданному перепаду температуры между боковой поверхностью цилиндрического тигля и фронтом кристаллизации соответствует пара значений чисел Грасгофа и Марангони. Фиксированной скорости равномерного вращения кристалла соответствует значение числа Рейнольдса $Re = 95$.

Методом конечных разностей решалась система безразмерных уравнений смешанной конвекции в приближении Буссинеска в переменных: функция тока, вихрь скорости, азимутальная компонента скорости, температура:

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

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

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

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

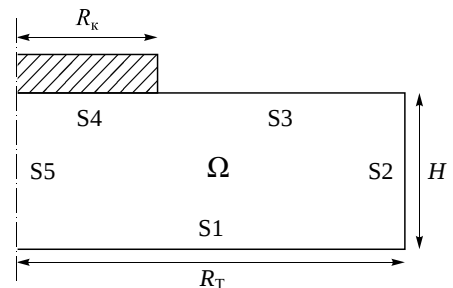


Рис. 1. Схема расчетной области.

В качестве масштаба длины использовался радиус кристалла R_K , в качестве масштаба температуры была взята величина ΔT (перепад температуры между стенкой тигля и моделью кристалла, вернее ФК), масштаб скорости в режимах смешанной конвекции составлял $\Omega_K R_K$. В систему входили четыре критерия подобия: число Грасгофа Gr , определяющее интенсивность термогравитационной конвекции; число Марангони Ma , определяющее интенсивность термокапиллярной конвекции; число Прандтля Pr , характеризующее теплофизические свойства расплава, и число Рейнольдса Re , определяющее интенсивность вынужденной конвекции, возникающей за счет вращения ФК:

$$Gr = \frac{g\beta}{\nu^2} \Delta T \cdot R_K^3, \quad Ma = \left(-\frac{\partial \sigma}{\partial T} \right) \frac{R_K}{a\mu} \cdot \Delta T, \quad Pr = \frac{\nu}{a}, \quad Re = \frac{\Omega_K \cdot R_K^2}{\nu},$$

здесь σ — коэффициент поверхностного натяжения, μ , ν — коэффициенты динамической и кинематической вязкости, a — коэффициент температуропроводности, Ω_K — скорость вращения ФК. Для оценки значений чисел Прандтля, Грасгофа и Марангони использовались значения теплофизических свойств гептадекана при температуре 22,8 °C [16]: плотность $\rho = 775$ кг/м³, коэффициент теплового расширения $\beta = -8,189 \cdot 10^{-4}$ 1/К, коэффициент динамической вязкости $\mu = 3,66 \cdot 10^{-3}$ Н·с/м², коэффициент кинематической вязкости $\nu = \mu/\rho = 4,72 \cdot 10^{-6}$ м²/с, коэффициент теплопроводности $\lambda = 0,151$ Вт/(м·К), удельная теплоемкость $c_p = 1,66 \cdot 10^3$ Дж/(кг·К), коэффициент температуропроводности $a = \lambda/(\rho \cdot c_p) = 1,17 \cdot 10^{-7}$ м²/с, температурный коэффициент поверхностного натяжения $\partial \sigma / \partial T = -8,38 \cdot 10^{-5}$ Н/(К·м).

Система уравнений решалась при следующих граничных условиях для смешанной конвекции:

- дно тигля: $\psi = 0$, $\frac{\partial \psi}{\partial z} = 0$, $\frac{\partial \theta}{\partial z} = 0$, $W = 0$, $z = 0$, $0 \leq r \leq R_T$;
- боковая поверхность: $\psi = 0$, $\frac{\partial \psi}{\partial r} = 0$, $\theta = 1$, $W = 0$, $0 \leq z \leq H$, $r = R_T$;
- свободная поверхность: $\psi = 0$, $\omega = -\frac{Ma}{PrRe} \frac{\partial \theta}{\partial z}$, $\frac{\partial \theta}{\partial z} = 0$, $\frac{\partial W}{\partial z} = 0$, $z = H$, $1 \leq r \leq R_T$;
- фронт кристаллизации: $\psi = 0$, $\frac{\partial \psi}{\partial z} = 0$, $\theta = 0$, $W = r$, $z = H$, $0 \leq r \leq 1$;
- ось симметрии: $\psi = 0$, $\omega = 0$, $\frac{\partial \theta}{\partial r} = 0$, $W = 0$, $0 \leq z \leq H$, $r = 0$.

Численное моделирование проводилось на равномерных сетках размером 160×160 ячеек. Для аппроксимации уравнения переноса тепла использовались центральные разности и итерационный метод переменных направлений. Схема имела второй порядок аппроксимации. Аппроксимация вихря на твердой границе выполнялась по приграничным значениям функции тока и вихря (формула Вудса): $\omega_{i0} = \frac{3}{ihl^2} \psi_{i1} - \frac{1}{2} \omega_{i1} + O(l^2)$. Был

выбран следующий критерий остановки итерирования системы: 1 — постоянство трех значащих цифр в числах Нуссельта на кристалле и на боковой стенке тигля, 2 — постоянство трех значащих цифр максимума функции тока. Это соответствовало условию:

$$\frac{\max_{ij} |\omega_{ij}^{n+1} - \omega_{ij}^n|}{\max_{ij} |\omega_{ij}^{n+1}|} \leq 10^{-8}. \text{ Особенностью описанной системы уравнений является наличие ста-}$$

ционарного уравнения для функции тока. В рассматриваемом случае уравнение для функции

тока заменялось нестационарным уравнением и решалось итерационным методом переменных направлений: $\frac{\partial \psi}{\partial s} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} - r\omega$, где s — итерационный параметр, аналогичный времени.

Результаты исследований

При вытягивании кристалла из начального объема расплава (без подпитки) уровень последнего монотонно снижается. Однако влияние снижения уровня расплава в широком диапазоне относительных высот H/R_T на гидродинамику и конвективный теплообмен в методе Чохральского практически не исследовано. В настоящей работе изучена эволюция пространственной формы течения и локальных характеристик по мере снижения относительной высоты слоя расплава от $H/R_T = 2,0$ до $H/R_T = 0,1$ с шагом 0,1. Расчеты проводились при следующих заданных величинах: $R_T/R_K = 1,94$, $Pr = 40,34$, $Re_K = 95$, $Gr = 1215$, $Ma = 2932$. В данных режимах смешанной конвекции течение расплава имеет ламинарный, стационарный и осесимметричный характер. Пространственные формы течения состоят из двух областей с четко выраженными радиально-осевыми границами раздела. На рис. 2 показаны только правые части осесимметричных полей изолиний функции тока и изотерм. Под вращающимся модельным плоским фронтом кристаллизации течение имеет вынужденную центробежную природу. Под ФК в приосевой области формируется восходящий поток расплава (рис. 2а, 3) и радиальное растекание под ФК (рис. 2, 4).

В областях, примыкающих к нагретым вертикальным стенкам тигля, течение имеет тепловую гравитационно-капиллярную природу. У боковой стенки тигля формируется восходящий к свободной поверхности поток нагретого расплава. Вдоль свободной поверхности слоя расплава формируется поток, натекающий от стенки тигля на кромку кристалла. Здесь из-за наличия радиального градиента температуры дополнительно к силам плавучести действует термокапиллярный эффект [12–15]. Вследствие этого максимальное значение радиальной компоненты скорости находится на свободной поверхности (рис. 4с, 4ф).

При заданных значениях Gr , Ma и Re_K вынужденное течение из-под вращающегося ФК сталкивается со свободноконвективным потоком у кромки ФК, не оттесняя его за кромку. В результате на кромку кристалла вдоль свободной поверхности набегает поток расплава с температурой, близкой к температуре стенки тигля. Температура в этом потоке в реальном технологическом процессе может снижаться из-за теплоотдачи в газовую среду над свободной поверхностью расплава [9] и теплоотдачи в нижележащие слои расплава [12]. Последний эффект обусловлен структурой и физическим смыслом числа Марангони, т.е. присутствием коэффициента температуропроводности в его определении. Если теплоотдача в газовую среду отсутствует (что соответствует постановке задачи в данной работе), то развитию термокапиллярного течения вдоль свободной поверхности препятствуют вязкое трение и теплоотдача в нижележащий слой расплава.

Изолинии функции тока совпадают с траекториями движения расплава и дают ясное представление о пространственной форме течения и ее эволюции по мере снижения уровня расплава. На рис. 2а показан восходящий приосевой поток расплава под ФК, затем обтекание ФК в радиальном направлении и столкновение охлажденного расплава у кромки ФК с встречным потоком нагретого расплава от стенок тигля. Течение по замкнутому контуру под ФК происходит по часовой стрелке при всех высотах слоя расплава

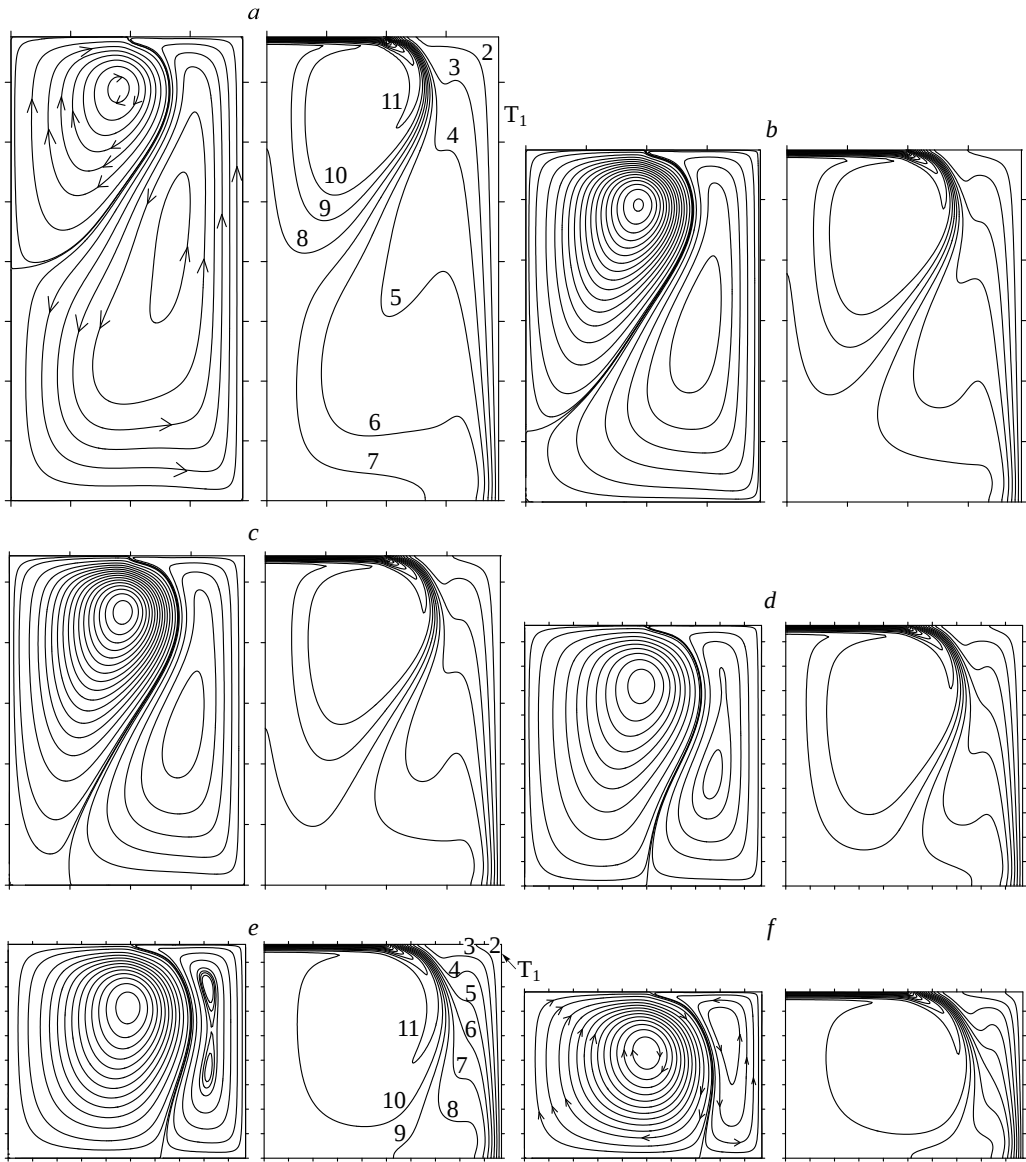


Рис. 2. Зависимости полей изолиний функции тока (слева) и изотерм (справа) от высоты слоя расплава H/R_T при $R_T/R_K = 1,94$, $Pr = 40,35$, $Re = 95$, $Gr = 1214$, $Ma = 2932$ (a – f) и полей изолиний функции тока (сверху) и изотерм (снизу) от высоты слоя расплава H/R_T при $R_T/R_K = 1,94$, $Pr = 40,35$, $Re = 95$, $Gr = 1214$, $Ma = 2932$ (g – i). $H/R_T = 2$ (a), 1,5 (b), 1,4 (c), 1,1 (d), 0,9 (e), 0,7 (f), 0,3 (g), 0,2 (h), 0,1 (i). (Начало).

(рис. 2, 4a, 4b, 4d, 4e). Во внешней части течение тепловой гравитационно-капиллярной природы направлено против часовой стрелки (рис. 2, 3c, 3f). Направления течений в приосевом и периферийном вихрях сохраняются по мере падения высоты слоя расплава, но их пространственные формы и размеры в осевом и радиальном направлениях заметно меняются (см. рис. 2 и 3). Также меняются скорости циркуляции расплава по контурам этих вихрей. Зависимости от H/R_T амплитуд осевой и радиальной компонент скорости и направления течения хорошо видны по радиальным распределениям вертикальной компоненты скорости (рис. 3) и по профилям радиальной компоненты скорости (рис. 4).

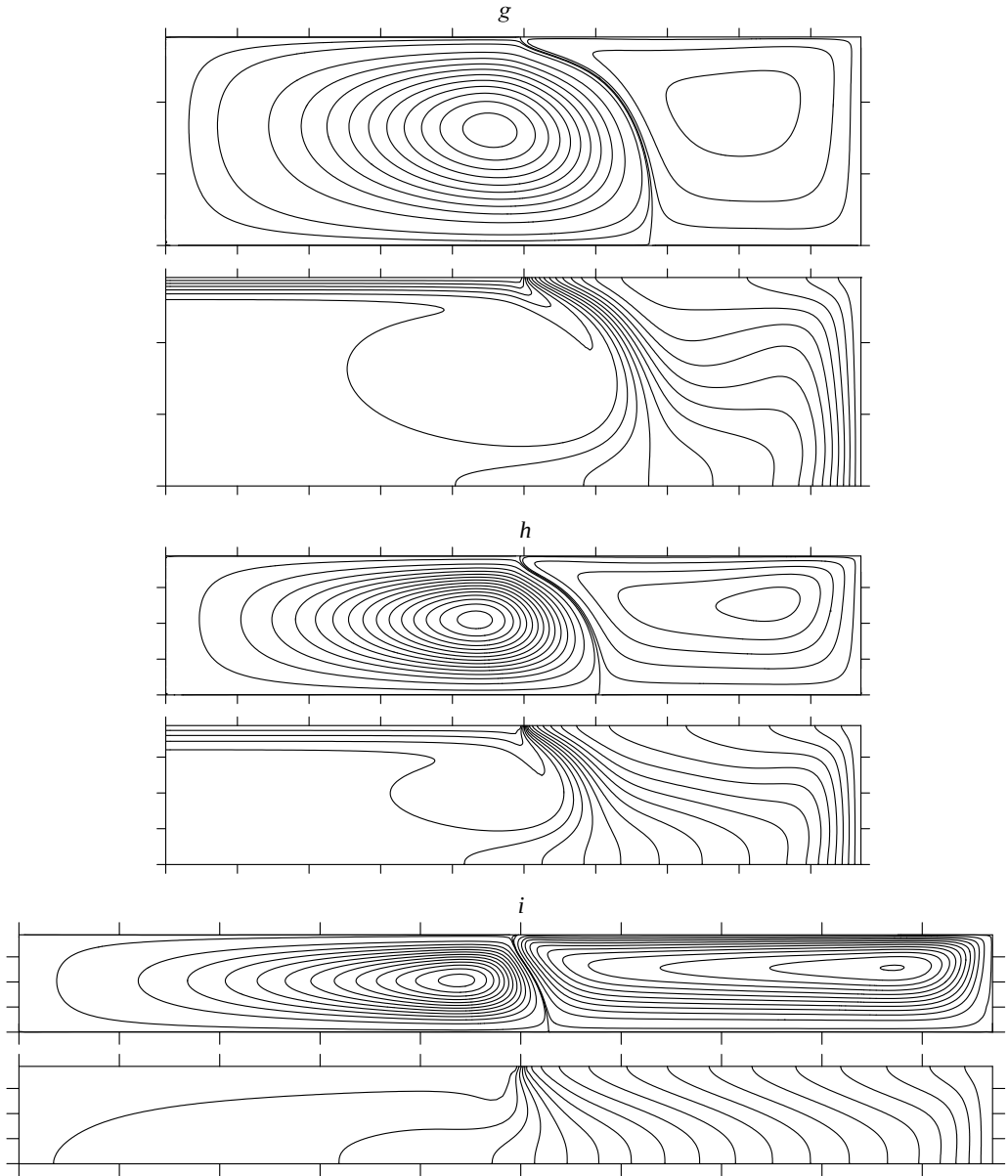


Рис. 2. Окончание.

С падением уровня расплава амплитуда скорости восходящего на оси потока монотонно растет в диапазоне $1,0 \leq H/R_T \leq 2,0$ (см. рис. 3а). При $1,0 \leq H/R_T \leq 2,0$ наблюдается более выраженная устойчивая стратификация по температуре и плотности по высоте слоев расплава.

Данные, приведенные на рис. 5, 6, демонстрируют общую закономерность: с ростом высоты слоя усиливается тенденция к устойчивому расслоению расплава в тигле по температуре. Расплав с более высокой температурой находится в верхней части слоя и в восходящей в приосевой области струе силы плавучести работают против центробежных сил, так как к ФК снизу подтягивается расплав с более низкой температурой

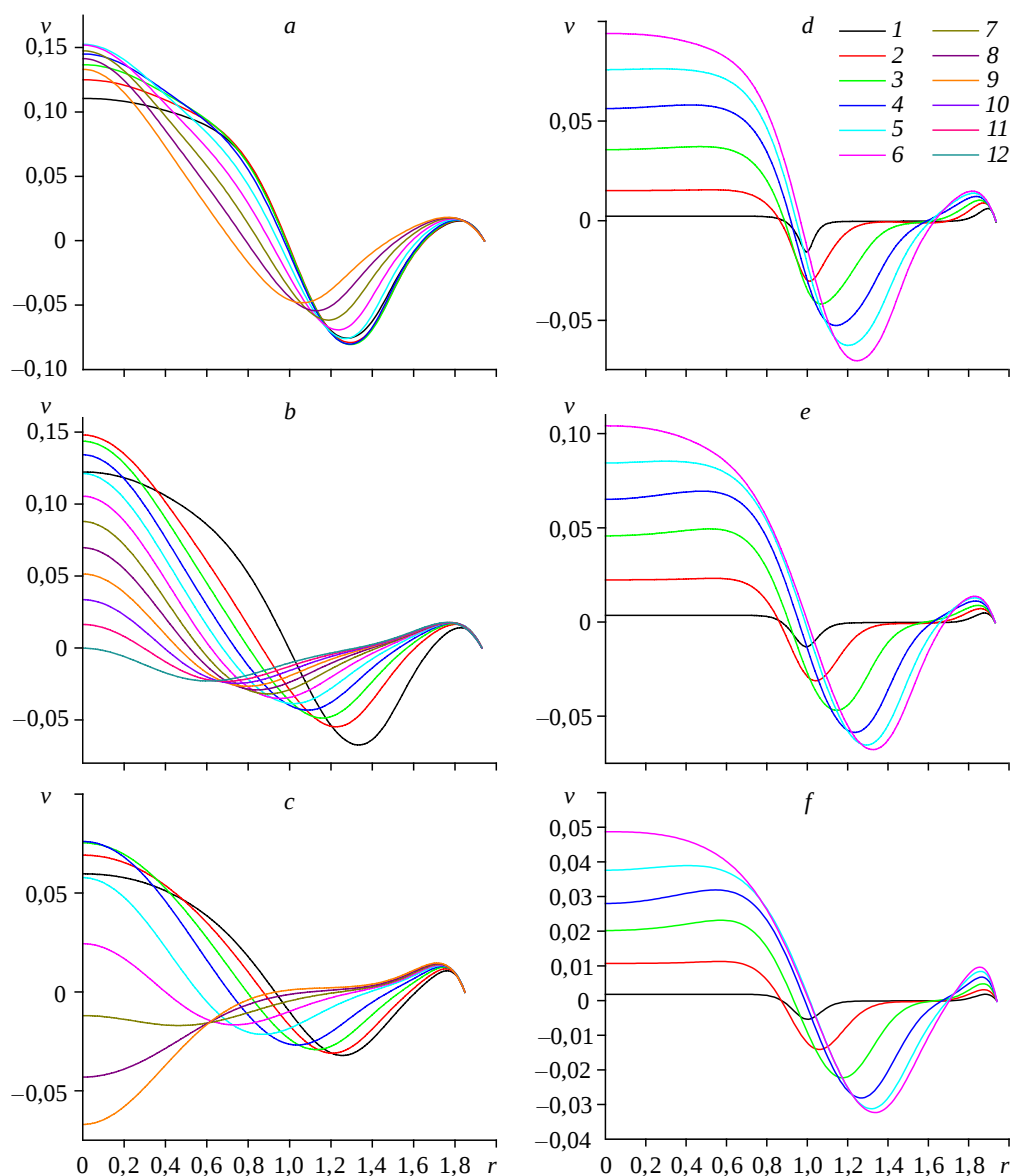


Рис. 3. Профили вертикальной компоненты скорости в сечениях $z = 3H/4$ (a, d), $H/2$ (b, e), $H/4$ (c, f) по высоте слоя жидкости $H/R_T = 0,7$ (1), 0,8 (2), 0,9 (3), 1 (4), 1,2 (5), 1,4 (6), 1,6 (7), 1,8 (8), 2 (9) (a, c), $H/R_T = 0,1$ (1), 0,2 (2), 0,3 (3), 0,4 (4), 0,5 (5), 0,6 (6) (d-f), $H/R_T = 0,7$ (1), 1 (2), 1,1 (3), 1,2 (4), 1,3 (5), 1,4 (6), 1,5 (7), 1,6 (8) (b).

и с большей плотностью. Указанный фактор слабо, но действует и влияет на скорость восходящего потока. Это более заметно в диапазоне $0,7 \leq H/R_T \leq 1,0$. Амплитуда вертикальной компоненты скорости при дальнейшем снижении H/R_T понижается как в сечении по высоте слоя $z = H/2$ (рис. 4), так и непосредственно под ФК (рис. 4). Обусловлено это перестройкой полей температуры (рис. 5b), снижением интегрального теплового потока со стенки тигля и монотонным снижением температуры в придонной области.

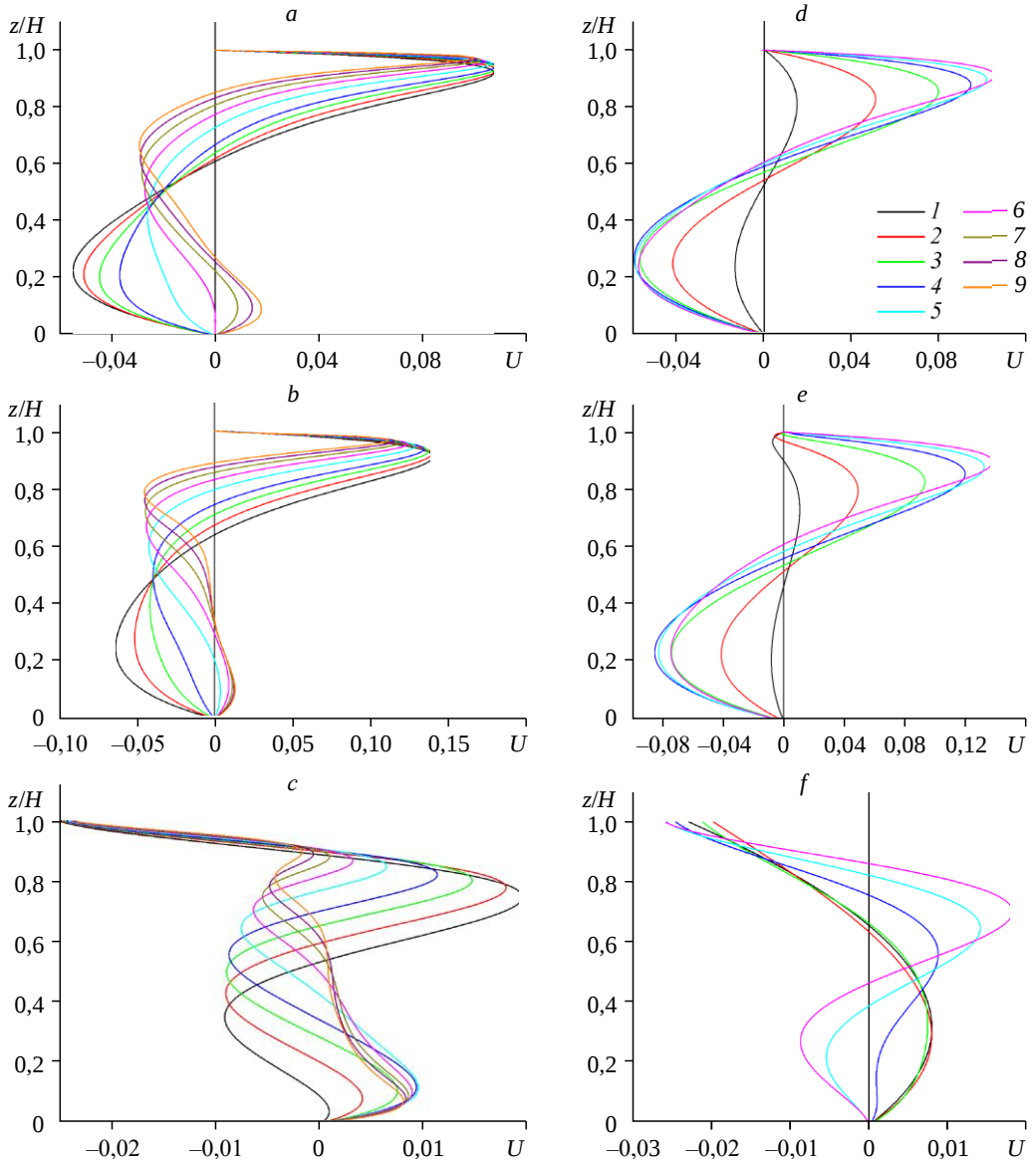


Рис. 4. Профили горизонтальной компоненты скорости в сечениях по радиусу $r = R_K/2$ (a, d), R_K (b, e), $(R_T + R_K)/2$ (c, f).
 a–c: $H/R_T = 0,7$ (1), 0,8 (2), 0,9 (3), 1 (4), 1,2 (5), 1,4 (6), 1,6 (7), 1,8 (8), 2 (9);
 d–f: $H/R_T = 0,1$ (1), 0,2 (2), 0,3 (3), 0,4 (4), 0,5 (5), 0,6 (6).

По данным, представленным на рис. 2, видно, что при заданных значениях чисел Грасгофа, Марангони и Рейнольдса, характеризующих относительную роль сил плавучести, термокапиллярного эффекта и центробежных сил, при всех высотах слоя жидкости сохраняется пространственная форма течения с выраженной границей раздела их зон влияния. По мере падения уровня расплава в тигле меняется положение и форма границы раздела и соответственно меняются объемы расплава, вовлеченные во внутренних и внешний вихри. От области столкновения потоков у кромки ФК в сторону дна тигля формируется опускной поток расплава, состоящий из спутных течений охлажденного

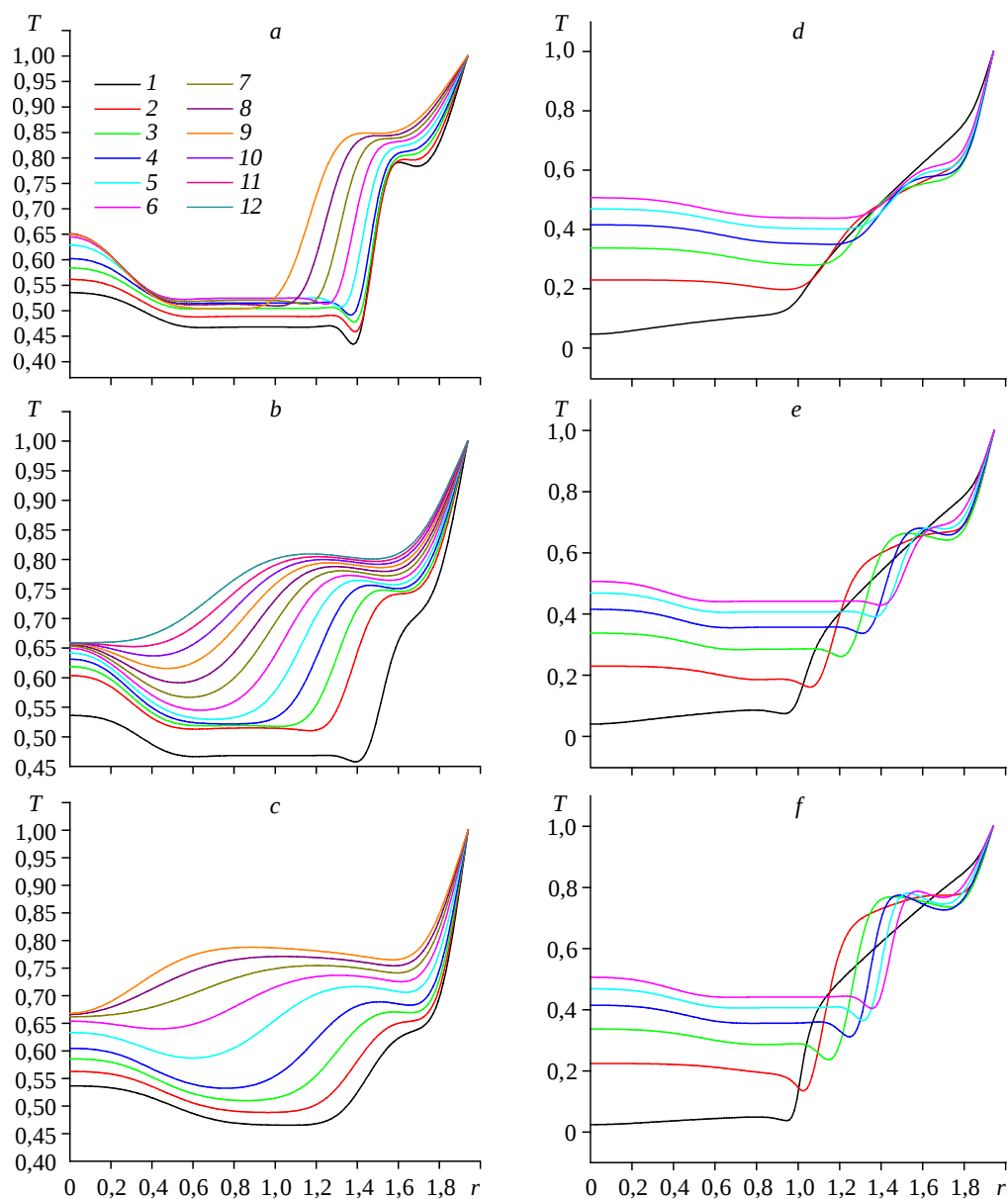


Рис. 5. Радиальные распределения температуры на уровнях $z = 3H/4$ (a, d), $H/2$ (b, e), $H/4$ (c, f) по высоте слоя жидкости.

Обозначения см. на рис. 3.

под ФК расплава, а также нагретого на вертикальных стенках тигля. На рис. 2a в центре спутного потока, направленного от кромки ФК к дну тигля, показана граница раздела между вихрями тепловой, гравитационно-капиллярной и центробежной природы. На этой границе происходит теплоотдача от внешнего вихря, в котором аккумулирована нагретая жидкость, в центробежный вихрь. Нагретая в этой спутной струе жидкость затем натекает на ФК, но ее температура постепенно понижается по мере падения уровня расплава, что взаимосвязано с эволюцией пространственной формы течения и теплоотдачи от стенки тигля.

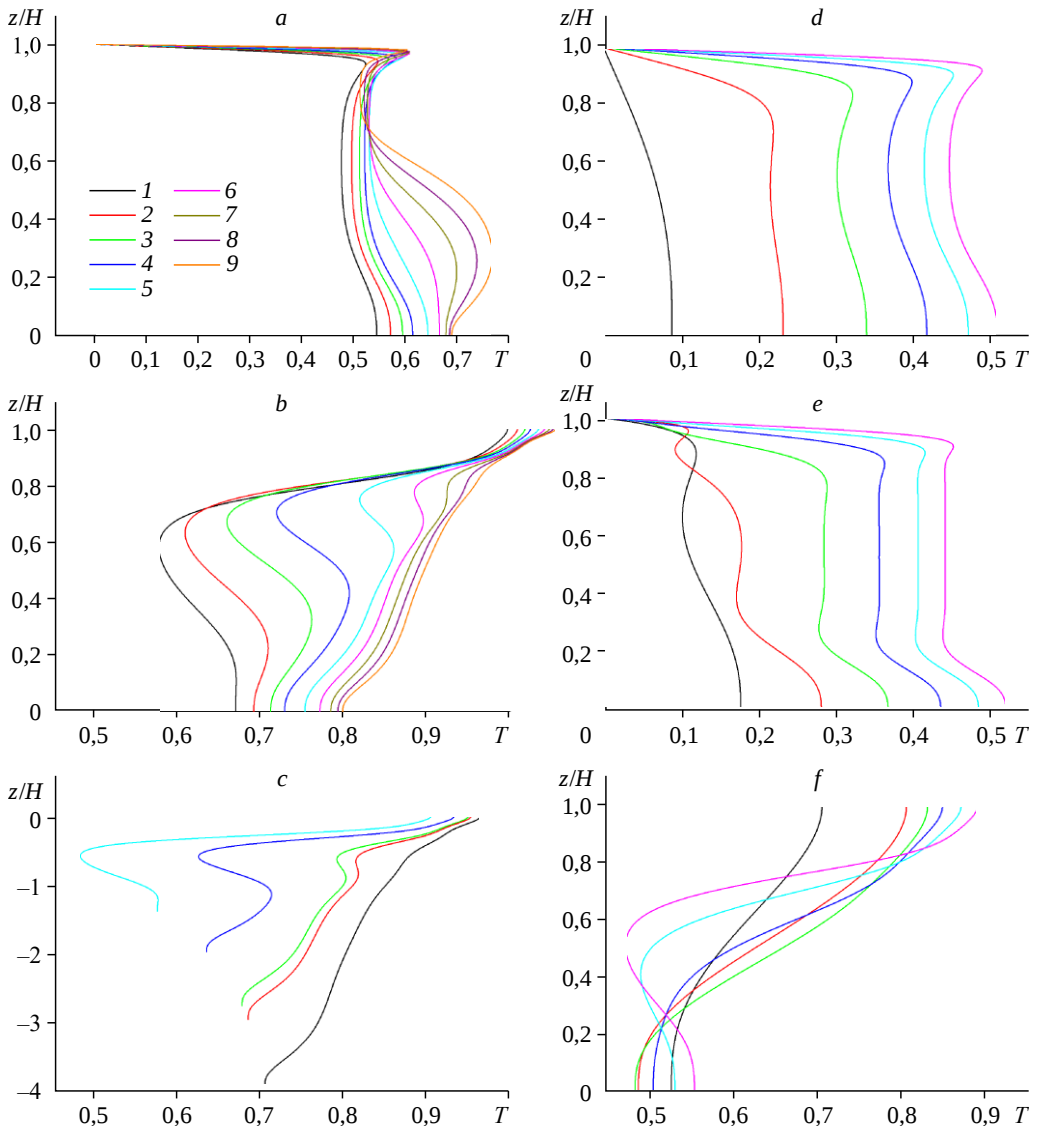


Рис. 6. Распределения температуры по высоте слоя в сечениях по радиусу $r = R_K/2$ (a, d), $(R_T + R_K)/2$ (b, c, f), R_K (e).

a, b: $H/R_T = 0,7$ (1), $0,8$ (2), $0,9$ (3), 1 (4), $1,2$ (5), $1,4$ (6), $1,6$ (7), $1,8$ (8), 2 (9);

c: $H/R_T = 2$ (1), $1,5$ (2), $1,4$ (3), 1 (4), $0,7$ (5);

d–f: $H/R_T = 0,1$ (1), $0,2$ (2), $0,3$ (3), $0,4$ (4), $0,5$ (5), $0,6$ (6).

При $1,5 \leq H/R_T \leq 2,0$ нижняя граница центробежного вихря под вращающимся ФК не достигает дна тигля. В придонной области вертикальная компонента скорости направлена к дну тигля (рис. 2a, 3c — кривые 7–9), т.е. расплав, циркулирующий под вращающимся ФК, по всей внешней границе обтекается нагретым на стенках тигля расплавом. С уменьшением значения H/R_T нижняя граница центробежного вихря смещается ко дну тигля при одновременном увеличении высоты этого вихря. При $1,4 \leq H/R_T \leq 1,5$ нижняя граница центробежного вихря касается дна (рис. 2c). Границы раздела потоков к стенке тигля и к оси симметрии у дна с лобовой точкой на дне обнаруживаются при $H/R_T \leq 1,4$

(рис. 2с – 2h). При $1,5 \leq H/R_T \leq 2,0$ границы раздела потоков «утыкаются» в ось симметрии (рис. 2а, 2b). При $H/R_T \leq 1,4$ границы раздела потоков смещаются к стенке тигля вдоль дна по мере снижения уровня расплава (рис. 2с – 2h). В спутном потоке, кроме теплоотдачи в верхней части слоя, от внешнего вихря во внутренний идет обратный процесс охлаждения, и уже холодный расплав во внешнем вихре натекает на стенку тигля вдоль дна. Среднемассовая температура расплава в области под ФК монотонно снижается по мере падения уровня расплава, все более охлажденный расплав натекает на стенку тигля у дна. Нагретый расплав все менее эффективно передает тепло в спутном потоке, но все в большей степени подогревает холодный поток, натекающий вдоль дна к стенке тигля (рис. 2е – 2g).

При снижении значения H/R_T до 0,7 линия раздела вихрей в нижней части у дна смещается в сторону стенки тигля. Положение и форма этой границы раздела является следствием и индикатором изменения относительной роли центробежных сил и сил плаваемости и интенсивности течений в приосевом и внешнем вихрях. Так как на этой границе происходит теплоотдача от внешнего вихря, омывающего нагретую стенку тигля, в приосевой вихрь и в восходящий поток нагретого расплава, натекающего на ФК, то это значит, что сжимается объем нагретой жидкости, а под ФК увеличивается объем охлажденного расплава. Изменение формы этой границы раздела вихрей сопровождается также изменением площади теплообмена в спутном потоке от кромки ФК к дну тигля. В результате меняется конвективный поток тепла к ФК.

С падением уровня расплава меняются взаимосвязанные поля температуры и пространственные формы течения: меняются объемы жидкости, вовлеченные в течения вынужденной природы под вращающимся фронтом кристаллизации и свободноконвективной природы в области у вертикальной стенки тигля. При $H/R_T = 0,9$ наблюдаются два центра вращения в ядре свободно конвективного вихря. Такая пространственная форма течения существует только в узком диапазоне значений H/R_T . При дальнейшем снижении уровня расплава H/R_T принципиально меняется режим теплообмена. С падением уровня расплава до $0,1 \leq H/R_T \leq 0,6$ и высоты обогреваемого участка боковой стенки тигля все более заметно снижается относительная роль конвективного механизма теплопереноса от нагретой стенки тигля под ФК и растет вклад теплопроводности. На рис. 2g – 2i по картине полей и формам изотерм видно, как все в большей степени происходит переход от конвективной теплоотдачи от стенок тигля в спутный поток и к кромке ФК к режиму теплопроводности.

Наиболее заметна перестройка полей температуры в диапазоне $0,1 \leq H/R_T \leq 0,3$ (рис. 2g – 2i, 6d, 6e). При снижении уровня расплава до $H/R_T = 0,1$ под ФК формируется зона охлажденного расплава (рис. 2i, 6d, 6e). Обусловлено это снижением скорости циркуляции расплава под ФК, что видно по данным рис. 3. При $H/R_T = 0,1$ в области под ФК интенсивность циркуляции и скорость восходящего к ФК потока резко падает (рис. 3d – 3f, 4d). Заметно снижаются градиенты температуры у границы раздела внутреннего и внешнего вихрей. Средняя температура расплава под ФК резко снижается (рис. 2i, 6d, 6e). Этот факт имеет существенное значение, так как определяет возможность наиболее полного использования расплава (его предел или границу) при вытягивании монокристалла из начальной загрузки. Наблюдаемая перестройка поля температуры объясняет возможность (или вероятность) примерзания кристалла ко дну тигля. Видно, что существует вероятность примерзания ФК к непогрееваемому дну тигля.

От интенсивности набегающего на ФК потока и радиального распределения скорости зависят радиальные распределения локальных тепловых потоков $q(r)$. На них сильно влияет поле температуры под ФК, закономерности зависимости которого от H/R_T показаны на рис. 5, 6. Так как при больших значениях H/R_T под ФК находится более нагретый расплав, то это влияет на равномерность радиальных распределений и на значения локальных тепловых потоков (рис. 7, 8), а также на безразмерный коэффициент теплоотдачи (рис. 9). При любом характерном перепаде температуры указанные параметры будут иметь большие значения на ФК в более высоких слоях расплава. Радиальные распределения локальных тепловых потоков являются важнейшим технологическим фактором, так как они определяют локальную форму ФК и качество монокристаллов. Поэтому смысл подробных исследований взаимосвязанных полей температуры и скорости заключается в понимании влияния этих характеристик на радиальные распределения конвективных потоков тепла в расплаве, натекающем на ФК, и в пограничных слоях на ФК. Локальные тепловые потоки (рис. 7) имеют большие значения на ФК в более высоких слоях расплава. При больших значениях H/R_T под ФК находится более нагретый расплав. Изменение высоты боковой стенки тигля, омываемой расплавом, влияет на перестройку пространственной формы течения, на интенсивность течения и на поля температуры. На изменения тепловых потоков на ФК естественно влияет меняющееся соотношение площадей теплоотдающей поверхности на стенке тигля и холодного ФК. Первая площадь монотонно убывает, а вторая остается постоянной (фиксированная). Меняется локальная теплоотдача от стенки в расплав (рис. 8) и интегральный тепловой поток. Закономерно, что безразмерный коэффициент теплоотдачи (рис. 9) имеет большие значения на ФК в более высоких слоях расплава. При $H/R_T = 2,0$ в вихре под вращающимся ФК циркулирует наиболее нагретый расплав.

Данные, представленные на рис. 7–9, наглядно показывают, что при фиксированном относительно низком перепаде температуры и заданной скорости вращения ФК с падением уровня расплава существенно меняются гидродинамика и конвективный теплообмен. Предположения авторов [4–7] о слабом влиянии изменения гидродинамики и конвективного теплообмена на формы фронта кристаллизации по мере снижения уровня расплава в корне неверны и для низкоградиентного варианта метода Чохральского. При снижении уровня расплава уменьшается площадь теплоотдающей поверхности

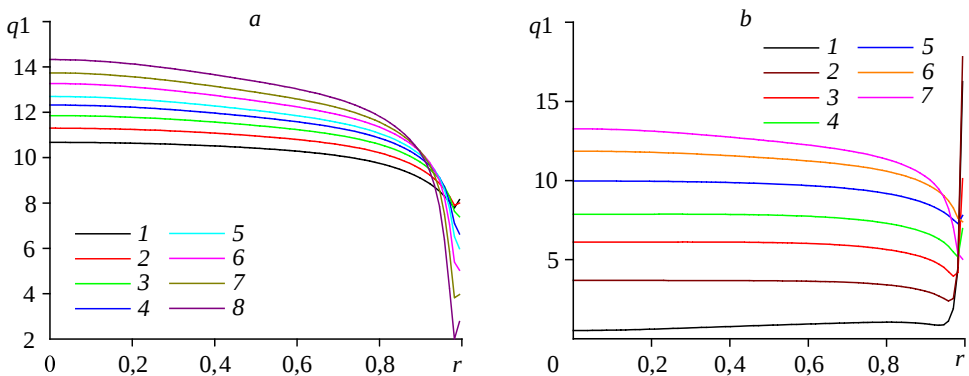


Рис. 7. Зависимости радиальных распределений локальных тепловых потоков на ФК от относительной высоты слоя расплава.

a: $H/R_T = 0,7$ (1), 0,8 (2), 0,9 (3), 1 (4), 1,1 (5), 1,3 (6), 1,6 (7), 2 (8);

b: $H/R_T = 0,1$ (1), 0,2 (2), 0,3 (3), 0,4 (4), 0,6 (5), 0,9 (6), 1,3 (7).

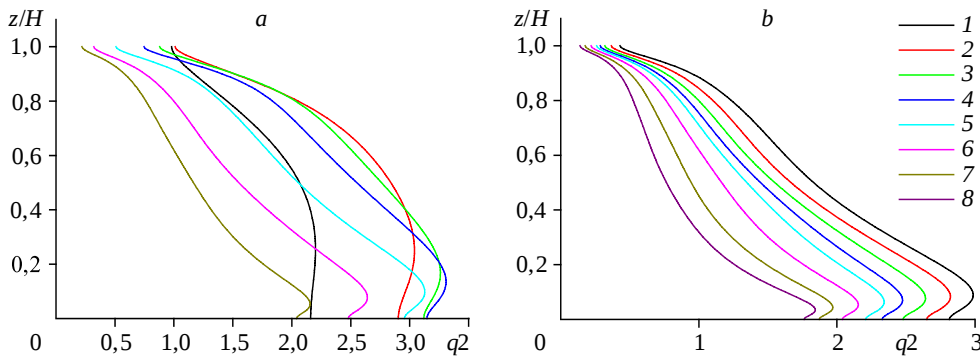


Рис. 8. Распределения локальных тепловых потоков по высоте боковой поверхности тигля.

a: $H/R_T = 0,1$ (1), $0,2$ (2), $0,3$ (3), $0,4$ (4), $0,6$ (5), $0,9$ (6), $1,3$ (7);
b: $H/R_T = 0,7$ (1), $0,8$ (2), $0,9$ (3), 1 (4), $1,1$ (5), $1,3$ (6), $1,6$ (7), 2 (8).

тигля, соответственно уменьшается интегральный тепловой поток на ФК, площадь которого постоянна (или слабо меняется в реальном технологическом процессе).

Сопоставление данных, приведенных на рис. 5 и 8, позволяет понять особенности теплоотдачи с боковой стенки тигля в расплав. На рис. 5 видно, что градиенты температуры по нормали к стенке монотонно растут при снижении уровня расплава до $0,4 \leq H/R_T \leq 2,0$. Это компенсирует уменьшение теплоотдающей поверхности стенки тигля, и интегральный тепловой поток снижается относительно медленно. При малых $0,1 \leq H/R_T \leq 0,4$ данная закономерность нарушается (рис. 5d). Это видно по распределениям температуры у стенки на всех уровнях по высоте слоя: при $z = H/4, H/2, 3H/4$. Так как восходящие к ФК потоки расплава нагреваются в спутном нисходящем потоке, формирующемся у кромки ФК после столкновения потока расплава, нагретого на стенке тигля, с потоком холодного расплава из-под ФК (рис. 2, 4), то интенсивность этого этапа теплопередачи к ФК существенно зависит от формирования полей температуры во внешнем вихре.

Явно наблюдаемый переход к режиму нагрева расплава с заметным ростом относительного вклада механизма теплопроводности при малых значениях H/R_T приводит к качественному и количественному изменению полей температуры в области под ФК в вихре центробежной природы. Это хорошо видно по изменению положений одноименных изотерм. На рис. 2 выведен 21 уровень безразмерной температуры: от 0 на ФК до 1 на стенке тигля. Перепад температуры между изотермами (шаг) составляет $\Delta T/20$. Если изотермы пронумеровать от 1 до 21, то можно обсуждать уровни средней температуры в промежутках между изотермами с одинаковыми номерами (или значениями безразмерной температуры) при различных H/R_T (на рисунке пронумерованы изотермы только для относительных высот расплава $0,9 \leq H/R_T \leq 2,0$, остальные изотермы приведены без нумерации). Положения одноименных изотерм с падением уровня расплава монотонно меняются. В области между

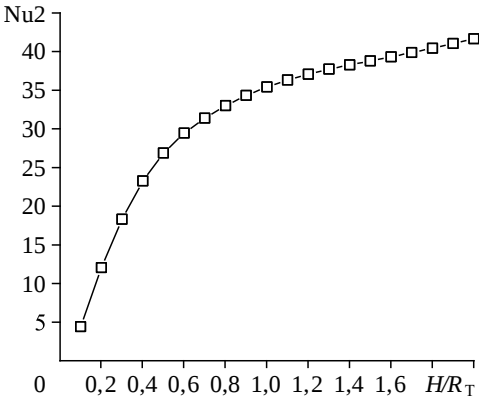


Рис. 9. Зависимость числа Нуссельта (не нормировано на интегральный поток тепла в режиме теплопроводности) от относительной высоты слоя расплава H/R_T при $R_T/R_K = 1,94$, $Pr = 40,35$, $Re = 95$, $Gr = 1214$, $Ma = 2932$.

восходящим к ФК потоком и спутным потоком от кромки ФК ко дну тигля, т.е. в ядре центробежного вихря под ФК, формируется обширная почти изотермическая зона — «тепловой пузырь». В результате при $H/R_T = 2,0$ «тепловой пузырь» под ФК располагается между изотермами 10–11, т.е. безразмерная температура находится в интервале $0,5 \leq T \leq 0,55$. Это выполняется в интервале $0,9 \leq H/R_T \leq 2,0$. На рис. 2а–2д можно видеть, как меняются форма и объем жидкости в указанной области. Кроме того, монотонно меняется средняя температура в центре потока, натекающего на ФК, и меняется площадь сечения этого потока. Аналогично можно проанализировать, при каких температурах набегает расплав на ФК в приосевой области, в этом случае получим уже характеристику конвективного потока тепла к ФК.

При $1,0 \leq H/R_T \leq 2,0$ на центр ФК набегает поток с температурой между изотермами 8–9, т.е. в центре этого потока безразмерная температура находится в интервале $0,6 \leq T \leq 0,65$. При $0,8 \leq H/R_T \leq 0,9$ на центр ФК набегает поток с температурой между изотермами 9–10, т.е. $0,55 \leq T \leq 0,60$; при $0,6 \leq H/R_T \leq 0,7$ — между изотермами 10–11, т.е. $0,50 \leq T \leq 0,55$; при $H/R_T = 0,5$ — между изотермами 11–12, т.е. $0,45 \leq T \leq 0,50$; при $H/R_T = 0,4$ — между изотермами 12–13, т.е. $0,40 \leq T \leq 0,45$; при $H/R_T = 0,3$ — между изотермами 14–15, т.е. $0,30 \leq T \leq 0,35$; при $H/R_T = 0,2$ — между изотермами 16, 17, т.е. $0,20 \leq T \leq 0,25$; при $H/R_T = 0,1$ — это уже область между изотермами 20–21, т.е. $0,00 \leq T \leq 0,05$. В грубом приближении мы получаем эволюцию картины «тепловых трубок тока расплава» со средней температурой между обозначенными изотермами. Информацию об их поперечных сечениях и пространственных формах дают поля изотерм, изображенные на рис. 2, и дополнительно радиальные распределения температуры на разных уровнях по высоте слоев расплава, приведенные на рис. 5. Реально ситуация с температурами и конвективными потоками тепла к ФК сложнее: необходимо обратить внимание на положения границ раздела в спутном потоке между вихрем под ФК и внешним свободно конвективным. Эти границы показаны на полях изолиний функции тока на рис. 2.

Заключение

Исследовано влияние высот слоя расплава гептадекана ($Pr = 40,35$) на гидродинамику и конвективный теплообмен в режимах смешанной конвекции при фиксированном перепаде температуры между стенками тигля и ФК, соответствующим значениям чисел Грасгофа $Gr = 1215$ и Марангони $Ma = 2932$ в диапазоне относительных высот слоя расплава $0,1 \leq H/R_T \leq 2,0$. Режимы смешанной конвекции реализованы при равномерном вращении кристаллов с заданной скоростью, соответствующей значению числа Рейнольдса $Re = 95$, при отношении радиусов тигля и кристалла $R_T/R_K = 1,94$. Получены новые данные о гидродинамике расплава, о полях температуры и скорости, о локальном и интегральном теплообмене. Показано, как меняется пространственная форма и интенсивность течения, режимы обтекания модельного фронта кристаллизации, радиальные распределения локальных тепловых потоков, которые будут определять формы фронтов кристаллизации. Результаты могут использоваться для определения оптимальных технологических процессов при выращивании оксидных монокристаллов, например галлий-гадолиниевого граната и ортогерманата висмута [4], при создании современного ростового оборудования и поиска методов управления гидродинамикой расплавов и режимами теплообмена. Представленные данные показывают, что при $1,5 \leq H/R_T \leq 2,0$ для реализации режимов с более однородными радиальными распределениями тепловых

потоков необходимо подобрать режимы с большей угловой скоростью вращения кристалла. При угловых скоростях вращения кристалла, близких к соответствующим для $Re = 95$, и при высотах $0,2 \leq H/R_T \leq 0,8$ необходимо увеличить температуру боковой стенки тигля. При $H/R_T \leq 0,2$ необходимо увеличить температуру боковой стенки тигля и добавить умеренный подогрев дна тигля, ориентируясь на результаты исследований [12 – 15].

Список литературы

1. Конаков П.К., Веревошкин Г.Е., Горяинов Л.А., Зарувинская Л.А., Конаков Ю.П., Кудрявцев В.В., Третьяков Г.А. Тепло- и массоперенос при выращивании монокристаллов. М: Металлургия, 1971. 240 с.
2. Шашков Ю.М. Выращивание монокристаллов методом вытягивания. М: Металлургия, 1982. 312 с.
3. Мильвидский М.Г., Освенский В.Б. Структурные дефекты в монокристаллах полупроводников. М: Металлургия, 1984. 256 с.
4. Borovlev Yu.A., Ivannikova N.V., Shlegel V.N., Vasiliev Ya.V., Gusev V.A. Progress in growth of large sized BGO crystals by the low-thermal-gradient Czochralski technique // J. Crystal Growth. 2001. Vol. 229, No. 1. P. 305–311.
5. Yuferev V.S., Budenkova O.N., Vasiliev M.G., Rukolaine S.A., Shlegel V.N., Vasiliev Ya.V., Zhmakin A.I. Variations of solid-liquid interface in the BGO low thermal gradients Cz growth for diffuse and specular crystal side surface // J. Crystal Growth. 2003. Vol. 253, No. 1–4. P. 383–397.
6. Иваницова Н.В., Шлегель В.Н., Васильев Я.В. Оптимизация скорости кристаллизации при росте кристаллов $Bi_4Ge_3O_{12}$ низкоградиентным методом Чохральского // Кристаллография. 2014. Т. 59, № 4. С. 676–680.
7. Grigorieva V.D., Shlegel V.N., Borovlev Y.A., Ryadun A.A., Bekker T.B. Bolometric molybdate crystals grown by low-thermal-gradient Czochralski technique // J. Crystal Growth. 2019. Vol. 523. P. 125–144.
7. Mazaev K., Kalaev V., Galenin E., Tkachenko S., Sidletskiy O. Heat transfer and convection in Czochralski growth of large BGO crystals // J. Crystal Growth. 2009. Vol. 311. P. 3933–3937.
8. Горилецкий В.И., Гринев Б.В., Заславский Б.Г., Смирнов Н.Н., Суздаль В.С. Рост кристаллов. Галогениды щелочных металлов. Харьков: Акта, 2002. 536 с.
9. Критская Т.В. Современные тенденции получения кремния для устройств электроники. Запорожье: Запорожская государственная инженерная академия (ЗГИА), 2013. 356 с.
10. Веревошкин Н.А., Простомолотов А.И., Мильвидский М.Г. Моделирование и оптимизация конструкции теплового экрана в установке «Редмет-90М» для выращивания монокристаллов кремния большого диаметра // Изв. вузов. Материалы электронной техники. 2008. № 4. С. 43–48.
11. Веревошкин Н.А., Простомолотов А.И., Бердников В.С., Винокуров В.А. Расчетно-экспериментальное исследование влияния тепловых процессов на форму фронта кристаллизации гептадекана и галлия в модели метода Чохральского // Изв. вузов. Материалы электронной техники. 2014. Т. 17, № 4. С. 257–267.
12. Бердников В.С., Винокуров В.В., Панченко В.И., Соловьев С.В. Теплообмен в классическом методе Чохральского // Инж.-физ. журн. 2001. Т. 74, № 4. С. 122–127.
13. Бердников В.С., Винокуров В.А., Винокуров В.В., Гапонов В.А. Влияние режимов конвективного теплообмена на форму фронта кристаллизации в системе тигель–расплав–кристалл в методе Чохральского // Тепловые процессы в технике. 2011. Т. 3, № 4. С. 177–186.
14. Бердников В.С., Винокуров В.А., Винокуров В.В. Влияние нестационарных режимов свободной и смешанной конвекции расплавов на теплообмен и формы фронтов кристаллизации в методе Чохральского // Изв. РАН. Серия Физическая. 2017. № 10. С. 1395–1402.
15. Berdnikov V.S., Vinokurov V.A., Vinokurov V.V. Features of convective heat transfer in mixed convection modes in the Czochralski method with different effects of buoyancy forces and thermocapillary effect // J. Physics: Conference Series. 2019. Vol. 1382. P. 012003–012003-9.
16. Варгафтик Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. М.: Наука, 1972. 720 с.

*Статья поступила в редакцию 19 декабря 2023 г.,
после доработки — 28 декабря 2023 г.,
принята к публикации 11 апреля 2024 г.*