

ВЛИЯНИЕ ВИБРАЦИЙ НА ГИДРОДИНАМИКУ И ТЕПЛО-МАССООБМЕН В РАСПЛАВЕ ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ КРИСТАЛЛОВ МЕТОДОМ БРИДЖМЕНА

А.И. Федюшкин¹⁾, Н.Г. Бураго¹⁾, Е.В. Жариков²⁾, В.И. Полежаев¹⁾

¹⁾*Институт Проблем Механики РАН (ИПМех РАН)*

²⁾*Институт Общей Физики РАН (ИОФАН)*

E-mail: fai@ipmnet.ru

Абстракт

В данной работе приведены результаты многопараметрического численного моделирования конвективного теплопереноса при вибрационном воздействии на расплав для случая выращивания монокристаллов вертикальным методом Бриджмена. Рассмотрены случаи вибрационного воздействия на расплав, как в земных условиях так и в условиях невесомости. Математическая модель основана на решении двумерных нестационарных уравнениях Навье-Стокса для несжимаемой жидкости в рамках приближения Буссинеска [1,2]. Учтены эффекты термогравитационной и вынужденной конвекции, эффекты диффузии тепла, импульса и концентрации, а также взаимодействие указанных механизмов течения. Численное моделирование проведено по методике конечных элементов [12], реализованной в пакете программ АСТРА [13]. Показано существование и характер квазистационарного осредненного вибрационного течения (ОВТ) при вибрационном воздействии на расплав для широкого диапазона определяющих параметров. Показано влияние теплофизических, динамических и геометрических параметров на ОВТ в условиях невесомости и при нормальной силе тяжести.

1. Введение

Распределение примеси в расплаве, и, как следствие этого, в кристалле зависит от многочисленных условий роста монокристаллов. Исследования зависимостей распределения примеси от геометрических, тепловых и динамических воздействий, таких, как конвекция (вынужденная, гравитационная и негравитационная), вращение, магнитное поле, вибрация и других опубликованы во многих работах, (см., например

[1-11]). Кроме научных целей все эти исследования преследуют одну практическую цель: научиться управлять факторами, влияющими на распределение примеси.

В методе Бриджмена, несмотря на то, что тепловая конфигурация соответствует устойчивому распределению температуры: фронт кристаллизации расположен внизу, в реальных условиях существует интенсивное конвективное перемешивание расплава за счет бокового отвода тепла. Это конвективное перемешивание существенным образом перераспределяет примесь в расплаве. Для уменьшения конвективного перемешивания у фронта кристаллизации применяют погруженные разделители (иногда нагреватели) [4,5]. В этих случаях без вибраций в жидкости существует конвективное течение, разделенное на две части погруженным разделителем и имеющее небольшую интенсивность под разделителем (рис. 4а). Этот случай подробно был изучен в работах [4-6]. Сравнение с изотермическим случаем показало, что в данной конфигурации конвективное течение незначительно изменяет температурное поле (особенно под вибратором). В работах показано, что отсутствие перемешивания в нижней части ампулы (около фронта кристаллизации) может приводить к радиальной неоднородности в растущем кристалле даже в условиях невесомости. Для гомогенизации распределения примеси в нижней части ампулы используют различные управляемые способы создания перемешивания расплава, например, создают горизонтальный градиент температуры на погруженном разделителе (погруженный нагреватель [5]) или вводят вращение этого погруженного разделителя [4]. Другим управляющим воздействием на распределение тепла и примеси около фронта кристаллизации могут быть вибрационные воздействия.

В работах [7-11] теоретически и экспериментально показано влияние вибрационного воздействия на тепломассоперенос. В работах [9,10] показано существование двух типов ОВТ: одновихревого и двухвихревого, переходящих друг в друга в зависимости от радиуса закругления кромки вибратора и частоты.

Настоящая работа посвящена численному исследованию влияния вибрационного воздействия на расплав, изучению осредненного вибрационного течения (ОВТ) и изучению их влияния на тепломассоперенос в расплаве и кристалле при вертикальной направленной кристаллизации. В данной работе рассмотрено влияние на гидродинамику и тепломассообмен расплава управляемых вибраций (специально

создаваемых погруженным в расплав вибратором) при выращивании монокристаллов методом Бриджмена в земных и космических условиях.

Представленные результаты показывают сильное влияние вибраций на толщину пограничных слоев, как в земных условиях, так и при отсутствии силы тяжести. Вибрации могут уменьшать толщину пограничных слоев у фронта кристаллизации, что имеет принципиальное значение при выращивании монокристаллов. Показано, что с помощью вибрационного воздействия на расплав можно менять величину градиента температуры на фронте кристаллизации, т.е. менять кинетику и скорость роста кристаллов. Данный эффект имеет место, как в земных условиях, так и в условиях невесомости, причем, для рассмотренных конфигураций вибрации играют доминирующую роль по сравнению с естественной конвекцией.

В данной работе показана возможность управления направлением движения ОВТ в зависимости от частоты вибраций. Показано влияние вибраций на температурный пограничный слой для жидкостей с разными числами Прандтля.

2. Постановка задачи и метод решения

Моделирование проводилось на основе численного решения нестационарных двумерных уравнений Навье-Стокса для несжимаемой жидкости и уравнений переноса тепла и массы в предположении цилиндрической симметрии. Решение уравнений осуществлялось методом конечных элементов с использованием комплекса программ «ASTRA» [12,13]. Данный пакет программ позволяет решать 2^x и 3^x мерные уравнения Навье-Стокса, записанные в естественных переменных или в переменных вихрь-функция тока в областях сложной геометрии.

Осредненное вибрационное течение (ОВТ) находилось в процессе осреднения по времени численных решений нелинейных уравнений Навье-Стокса, получаемых на каждом временном слое. Это позволило наблюдать эволюцию осредненного вибрационного течения во времени и в пространстве и его зависимость от определяющих параметров.

Одной из трудностей численного моделирования ОВТ является необходимость больших машинных временных затрат, например, это могут быть десятки часов на компьютере Pentium III с тактовой частотой 500 MHz.

Расчеты были проведены для погруженных в расплав вибраторов, имеющих различную форму и расположенных на разном расстоянии от кристалла. Рассмотренные в данной статье схемы вибраторов изображены на рис.1.

2.1. Постановка задачи

Схема расчетной области показана на рис. 2. В модели приняты следующие предположения: расчетная область обладает цилиндрической симметрией, скорость кристаллизации и тепловые условия в течение всего процесса кристаллизации остаются постоянными, фронт кристаллизации предполагается плоским. Поскольку в данной работе исследуются вибрации с малыми амплитудами, то перемещениями вибратора пренебрегается, а на вибраторе задается только скорость его перемещения в виде гармонической функции $v = A\omega\sin(\omega t)$, где A и ω - амплитуда и частота вибраций, соответственно.

Математическая модель основана на решении системы двумерных нестационарных уравнений Навье-Стокса для несжимаемой жидкости в приближении Буссинеска, которые имеют следующий вид:

$$\frac{\partial u}{\partial r} + \alpha \frac{u}{r} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{du}{dt} - \alpha \frac{v^2}{r} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\alpha v \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(v \frac{\partial u}{\partial z} \right) - \alpha v \frac{u}{r^2} \quad (2)$$

$$\frac{dw}{dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\alpha v \frac{\partial w}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(v \frac{\partial w}{\partial z} \right) + g\beta(T - T_0) \quad (3)$$

$$\frac{dv}{dt} + \alpha \frac{uv}{r} = \alpha \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r v \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(v \frac{\partial u}{\partial z} \right) - v \frac{u}{r^2} \right] \quad (4)$$

$$\frac{d\rho c_p T}{dt} = \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\alpha \lambda \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (5)$$

$$\frac{dC}{dt} = \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\alpha D \frac{\partial C}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (6)$$

Здесь и далее приняты следующие обозначения:

r и z - радиальная и азимутальная координаты, t - время, U и W - компоненты вектора скорости в направлении r и z , соответственно, V - азимутальная компонента скорости, T - температура, C - концентрация примеси, p - давление, ρ - плотность, g - ускорение

силы тяжести, коэффициенты β_T , ν , λ , c_p , D - коэффициент теплового расширения, вязкости, теплопроводности, теплоемкости и диффузии, соответственно, α - геометрический фактор, который равен 0 для плоской геометрии и 1 для осесимметричной геометрии, A и ω - амплитуда и частота колебаний вибратора, Ω_C - угловая скорость вращения тигля, ν - коэффициент кинематической вязкости, a - коэффициент температуропроводности, W_s - скорость кристаллизации, ΔT - масштаб температуры, k_0 - коэффициент распределения примеси, \mathbf{n} - нормаль.

2.1.1. Граничные условия имеют следующий вид: на оси симметрии ($r = 0$):

$$u = 0, \frac{\partial w}{\partial r} = 0, v = 0, \frac{\partial T}{\partial r} = 0, \frac{\partial C}{\partial r} = 0; \quad (7)$$

на фронте кристаллизации ($z = 0$):

$$u = 0, w = -W_s, v = 2\pi r \Omega_C, T = T_m, D \frac{\partial C}{\partial z} = W_s C (1 - k_0); \quad (8)$$

на боковой стенке тигля ($r = R$):

$$u = 0, w = 0, v = 2\pi R \Omega_C, \quad (9)$$

$$\frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (0 < z < h), T = T_h \quad (h < z < H), \frac{\partial C}{\partial r} = 0; \quad (10)$$

на вибраторе:

$$u = 0, w = A \omega \sin(\omega t), v = 2\pi r \Omega_{\text{vibr}}, \frac{\partial C}{\partial n} = 0, \frac{\partial T}{\partial n} = 0 \quad (11)$$

на верхней границе ($z = H$):

$$u = 0, \frac{\partial w}{\partial z} = 0, v = 0, T = T_h, C = C_0 \quad (12)$$

2.1.2. Начальные условия: $u = 0, w = 0, v = 0, T = T_m, C = C_0$ (13)

Все расчеты проводились для начального температурного поля, соответствующего теплопроводностным режимам с одними и теми же граничными условиями по температуре, указанным выше. Скорость кристаллизации во всех расчетах была одинаковой и соответствовала $W_s = 0.3$ см/час.

Задача характеризуется следующими безразмерными параметрами подобия:

числами Рейнольдса $Re_\Omega = \Omega_C R^2 / \nu$, $Re = W_s R / \nu$, $Re_{\text{vibr}} = A \omega R / \nu$,

числом Грасгофа $Gr = g\beta\Delta TR^3 / \nu^2$, (или числом Релея $Ra = GrPr$),

числом Прандтля $Pr = \nu c_p / \lambda$ и числом Шмидта $Sc = \nu / D$.

В большинстве случаев данные параметры находились в следующих диапазонах:

Re_{vibr} , Re_{Ω} и $Re < 10$, $Gr = 0 \div 2.1 \cdot 10^6$, $Pr = 0.01 \div 54$, $Sc = 500$.

Для определения распределения примеси в кристалле C_{cr} , запоминалась история распределения примеси на фронте кристаллизации (в расплаве) C , которая затем пересчитывалась в концентрацию в кристалле по следующей формуле: $C_{cr} = k_0 C$, где k_0 - равновесный коэффициент распределения примеси.

2.2 Метод решения

Численное решение выполнено методом конечных элементов. При аппроксимации уравнений были использованы треугольные линейные конечные элементы для пространственных переменных и неявная конечно-разностная схема интегрирования уравнений по времени. Вспомогательные краевые задачи для функции тока, завихренности, температуры, концентрации и давления решались методом сопряженных градиентов с преобуславливанием без применения матричных операций [10]. Конвективные и диффузионные члены аппроксимировались по симметричному шаблону, для устойчивости расчета конвекции вводился дополнительный диссипативный член, вид которого определяется из условия положительной определенности оператора краевой задачи с учетом дифференциального приближения конечно-элементной схемы. Для вычисления завихренности на твердой границе использовался итерационный метод верхней релаксации.

Сравнение результатов расчетов с результатами других авторов [4,5] и результаты расчетов тестовой задачи о тепловой конвекции в квадратной полости [14] показали хорошую точность данной методики [6].

Характеристики течения осредненного по времени течения (ОВТ) определялись по формуле:

$$F_{\text{среднее}} = \frac{1}{T} \int_0^T F dt \quad (14)$$

Следует отметить два момента: во-первых, то, что расчеты проводились с таким шагом по времени, что на один период колебаний приходилось от 10 до 100 шагов (в зависимости от частоты колебаний вибратора). Во-вторых, то, что все представленные в данной работе результаты относятся к моментам времени, когда осредненное течение имеет стационарный или квазистационарный характер, если специально не оговорено.

3. Результаты параметрических расчетов

В данной работе приводятся результаты параметрических расчетов задач для различных геометрий вибраторов и их расположения. Схемы расположения вибраторов изображены на рис. 1 и 2 и имели следующие геометрические параметры:

а) схема "А": $R=1.6, 1; H=3, 3.2; r_{\text{vibr}}=0.4; h_1=0.8; h_2=0.8; \delta = 0.1$ (см);

б) схема "В": $R=1; H=3; r_{\text{vibr}}=0.1; h_1=0.8; h_2=0.2; \delta = 0.1 \delta = 0.1$ (см);

в) схема "С": $R=1; H=3; r_{\text{vibr}}=0.1; h_1=0.08; h_2=0.2; \delta = 0.1$ (см);

г) схема "D": $R=1; H=3; r_{\text{vibr}}=0.1; h_1=1.6; h_2=0-0.8, \nabla$ - вид вибратора; $\delta = 0.1$ (см);

д) схема "Е": $R=1; H=3; r_{\text{vibr}}=0.1; h_1=0.8; h_2=0-0.8, \Delta$ - вид вибратора; $\delta = 0.1$ (см),

где R – радиус ампулы, H – высота ампулы, h_1 – расстояние от растущего кристалла до вибратора, h_2 - толщина вибратора (расстояние от нижней поверхности вибрирующего диска до его верхней поверхности), δ - расстояние от вибратора до стенки ампулы.

Были рассмотрены варианты с размерными параметрами, указанными в таблице 1.

Таблица 1

R (см)	H (см)	h_1 (см)	h_2 (см)	δ (см)	A ($\mu\text{м}$)	$f = \omega/2\pi$ (Гц)
1; 1.6	3; 3.2	0.8;0.2; 0.08	0.8; 0.2	0.1	50; 100	0; 10; 30; 50; 100

3.1 Осредненное вибрационное течение (ОВТ)

Вследствие колебаний вибратора в расплаве возникает течение расплава, которое при определенных вибрационных числах Рейнольдса (Re_{vibr}) является суперпозицией двух составляющих, имеющих различные временные масштабы и характер течения. Первое - это колебательное конвективное течение расплава, отслеживающее частоту колебаний вибратора. Визуально в экспериментах (при частотах вибратора $f=10-100$ Гц) эту составляющую течения невооруженным глазом выделить нельзя. Второе - это осредненное вибрационное течение, которое имеет

существенно меньшие скорости и со временем принимает квазистационарный характер. Это течение в виде треков тех или иных частиц можно наблюдать в экспериментах с прозрачными жидкостями. Данное течение не является гравитационно-чувствительным, т.е. оно существует в изотермических случаях и в условиях невесомости. В неизотермическом случае, при наличии вибраций и тепловой конвекции можно наблюдать стационарное течение, которое будет являться суперпозицией ОВТ и тепловой конвекции.

Влияние вибрационного воздействия ($A=100$ мкм и $f=50$ Гц, схема "А") для условий невесомости (в отсутствии влияния тепловой конвекции) показано на рис.3 для расплава NaNO_3 ($\nu=0.015$ [см²/сек], $\alpha=0.0158$ [см²/сек], $\text{Pr}=9.49$). На этом рисунке представлены изолинии функции тока для мгновенного течения (рис.3б) и осредненного по времени (рис.3г) для момента времени $t=20$ сек. ОВТ присутствует над и под вибратором, оно как бы разделено вибратором на две части, которые имеют одно-вихревые структуры течения над и под вибратором. ОВТ имеет следующее направление: по часовой стрелке под вибратором и против часовой стрелки над вибратором. Кроме этого на рис.3 показаны зависимости функции тока (рис.3а) и осредненной функции тока (рис.3в) от времени. Результаты численных расчетов показывают, что стационарный режим ОВТ (при указанных выше параметрах) устанавливается к 15-20 секунде (рис.3в).

3.2 Влияние вибраций на температурный пограничный слой у фронта кристаллизации.

Влияние вибрационного воздействия на распределение температуры показано на рис.4-6. На рис.4 и рис. 6 - для земных условий для числа $\text{Pr}=5.43$ и $\text{Pr}=0.01$; а на рис.5 - для условий невесомости.

На рис. 4 представлены результаты расчета без вибрации ($f=0$) (рис.4а, в, д, ж) и с вибрацией ($A=100$ мкм и $f=50$ Гц) (рис.4б, г, е, з, и) для чисел $\text{Gr} = 2.1 \cdot 10^6$, $\text{Pr} = 5.43$, $H/R = 3.2$. На рис.4а, 4б и 4и представлены изолинии функции тока.

Под воздействием вибраций в жидкости в течение некоторого времени формируется крупномасштабное осредненное по времени течение. Структура течения ОВТ в данном случае имеет простую структуру: один вихрь над вибратором и два под вибратором (рис. 4б). Над вибратором течение имеет вращение против часовой

стрелки. Под вибратором имеется небольшой основной вихрь с вращением по часовой стрелке и согласующийся с основным вторичный вихрь большего размера с вращением против часовой стрелки. Отрицательные значения функции тока соответствуют течению по часовой стрелке, а положительные против часовой стрелки.

Данные вибрационные воздействия существенным образом увеличивают градиент температуры у фронта кристаллизации, что видно из сравнения результатов расчетов, изображенных на рис. 4в,д,ж и рис.4г,е,з.

Следует отметить, что данный факт уменьшения температурного пограничного слоя является результатом воздействия на жидкость вибраций, а не только ОВТ. Способ вибрационного воздействия, в частности, например направление вибраций, играет принципиальную роль. Изолинии функции тока мгновенного течения представлено на рис.4и. откуда видно, что интенсивность этого течения на порядок больше интенсивности ОВТ.

Влияние тепловой конвекции на изменение вертикального градиента температуры у фронта кристаллизации практически нет. Это можно видеть, если сравнить результаты для земных условий, изображенные на рис.4 с результатами расчетов для условий невесомости, представленными на рис.5. Таким образом, в данном случае вибрационное воздействие является основным в формировании поля температуры и температурного пограничного слоя на фронте кристаллизации.

Степень влияние вибраций на пограничный слой зависит от амплитуды и частоты вибраций, а также от числа Прандтля жидкости. На рис. 6 представлены результаты расчетов для числа Прандтля $Pr=0.01$, соответствующего расплавам полупроводников. На рис. 6 представлены результаты расчета без вибрации ($f=0$) (рис.6а, в, д, ж) и с вибрацией ($A=100 \mu\text{м}$ и $f=50 \text{ Гц}$) (рис.6б, г, е, з, и) для чисел $Gr = 2.1 \cdot 10^6$, $Pr = 0.01$, $H/R = 3.2$. На рис.6а, бб и би представлены изолинии функции тока. Из-за малого числа Прандтля (малой вязкости и большой теплопроводности) влияние вибраций на толщину температурного пограничного слоя несущественно. Это видно из сравнения результатов расчетов, изображенных на рис. 6в,д,ж и рис.6г,е,з. Влияние вибраций на температурный пограничный слой расплавов полупроводников с малыми числами Прандтля может сказываться при увеличении амплитуды и частоты вибраций (вибрационного числа Рейнольдса Re_{vibr}).

3.3 Структура ОВТ при разных значениях чисел Грасгофа и Прандтля

Изолинии функции тока осредненного вибрационного течения при различных числах Грасгофа и Прандтля для схемы "А" ($f=50$ Гц, $A=100$ мкм) представлены на рис.7 а) $Gr=0$, $Pr=5.43$; б) $Gr=2.1 \cdot 10^5$, $Pr=0.18$; в) $Gr=2.1 \cdot 10^5$, $Pr=5.43$; г) $Gr=2.1 \cdot 10^5$, $Pr=54.3$; д) $Gr=2.1 \cdot 10^6$, $Pr=5.43$; е) $Gr=2.1 \cdot 10^6$, $Pr=0.01$.

Структуры течения ОВТ для $Pr=5.43$ и $Pr=54.3$ (схема "В") также представлены и на рис.9г,д,е и рис.9ж,з,и, соответственно. На рис. 9ж видно, что под вибратором структура течения ОВТ состоит из трех вихрей, расположенных друг над другом. Эта структура напоминает слоистую структуру течения. Слоистая структура течения наблюдается в жидкостях с плотностью стратифицированной по вертикали (а при больших числах Прандтля для существования такой структуры достаточно только наличие вертикальной стратификации по температуре в однородной по составу жидкости).

3.4 Влияние частоты вибраций на структуру течения ОВТ

На рис. 8. представлены изолинии функции тока ОВТ при четырех частотах вибраций: а) - $f=10$ Гц, б) - $f=30$ Гц, в) - $f=50$ Гц, г) - $f=100$ Гц, (схема "В", $A=100$ мкм, $Gr=2 \cdot 10^6$, $Pr=5.43$). В варианте с частотой $f=50$ Гц (рис.8в) представлены изолинии функции тока ОВТ не на стационаре (для малого времени расчета).

При увеличении частоты вибраций (вибрационного числа Рейнольдса Re_{vibr}) от $f=10$ Гц до $f=100$ Гц (рис.8а-г) интенсивность ОВТ увеличивается, а направление осредненного течения под вибратором меняет направление движения. Направление меняется от движения по часовой стрелке при $f=10$ Гц (рис.8а) до противоположного при $f=100$ Гц (рис.8г) (отрицательные значения функции тока соответствуют течению по часовой стрелке, а положительные против часовой стрелки). Наблюдается противоборство между конвективным вихрем и вибрационным. Под вибратором конвективное течение имеет течение против часовой стрелки, а ОВТ - по часовой.

3.5 Влияние расположения и геометрии вибраторов на ОВТ и распределение примеси

На рис.3-7 представлены результаты для схемы "А". Для схемы "В" результаты представлены на рис. 8-9, для схемы "С" - на рис.10, для схемы "D" - на рис.11 и для схемы "Е" - на рис.12.

Из результатов расчетов можно увидеть, что при малых скоростях роста наиболее благоприятными условиями для однородного радиального распределения примеси является отсутствие конвекции и вибраций. При больших скоростях роста радиальное распределение примеси может быть неоднородным и при отсутствии конвекции и вибраций [5,6].

На рис.10д показана структура течения ОВТ в узком зазоре между вибратором и фронтом кристаллизации (схема "С"). Видно, что в этом случае ОВТ состоит из двух вихрей, расположенных по горизонтали. Поэтому распространение примеси по радиусу затруднено, что и видно на рис.10е.

На рис.11 а) и б) представлены изолинии функции тока ОВТ и линии равной концентрации в кристалле для схемы "С", когда конвекция и вибрации отсутствуют ($Gr=0$, $f=0$ Гц). Видно, что даже при отсутствии вибраций и конвекции распределение примеси в кристалле неоднородно по радиусу. Морфология распределения примеси по радиусу повторяет геометрию нижней части вибратора.

Воздействие на жидкость только вибрации, только конвекции и их суперпозиции представлено соответственно на рис.11в, г; рис.11д, е и рис.11ж,г. Рис.11г состоит из двух частей: нижней (соответствующей случаю только с вибрацией) и верхней (распределение примеси в кристалле при вибрации и конвекции). Можно сделать вывод, что в данном случае конвекция слаба и ее влияние на распределение примеси несущественно. Определяющим фактором в распределении примеси является вибрация.

Структура течения ОВТ и распределение примеси в кристалле для схемы "Е" представлены на рис.12. В этом случае ОВТ у фронта кристалла аналогично ОВТ для случаев схема А и схема В, хотя над вибратором ОВТ отслеживает форму вибратора.

3.6 Вращение и вибрации.

Для схемы «В» – метод Бриджмена с погруженным вибратором проведены расчеты с учетом вращения вибратора и тигля. Были рассмотрены скорости вращения вибратора 6, 9 и 18 грт и частоты вибраций $f=10$ и 50 Гц. Расчеты показали, что данные вращения слабо влияют на ОВТ так как временные масштабы разные (разные частоты вращения и вибраций). Однако следует отметить, что вращение выравнивает распределение температуры в радиальном направлении.

4. Выводы

Для разных значений определяющих параметров (Re_{vibr} , Pr , Gr) с помощью решения полных уравнений Навье-Стокса показано существование ОВТ, вызванного вибрационным воздействием на жидкость. Показаны зависимости ОВТ от формы, расположения вибратора и частоты.

Показано влияние вибраций на температурный пограничный слой для жидкостей с разными числами Прандтля. Вибрации могут уменьшать толщину пограничных слоев у фронта кристаллизации, что имеет принципиальное значение при выращивании монокристаллов. Показано, что с помощью вибрационного воздействия на расплав можно менять величину градиента температуры на фронте кристаллизации, т.е. кинетику и скорость роста кристаллов. Данный эффект имеет место, как в земных условиях, так и в условиях невесомости, причем, для рассмотренных конфигураций вибрации играют доминирующую роль по сравнению с естественной конвекцией.

Результаты параметрических расчетов показали, что вибрации могут быть простым и эффективным управляющим фактором (по сравнению, например с невесомостью, вращением или магнитным полем), влияющим на гидродинамику, теплообмен, распределение примеси и кинетику роста кристалла.

5. Литература

1. V.I.Polezhaev Modeling 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. Eng.* 115, 1994, 79-92
2. Полежаев В.И. и др. Математическое моделирование конвективного тепло и массообмена на основе уравнений Навье-Стокса, М., Наука, 1991.
3. S.A.Nikitin, V.I.Poleshaev and A.I.Fedyushkin. Mathematical simulation in crystals prepared under microgravity conditions. *J.Crystal Growth*,52,(1981), pp.471-477.
4. S.Meyer, A.G.Ostrogorsky. Forced convection in vertical Bridgman configuration with the submerged heater. *J.Crystal Growth* 171(1997) 566-576.
5. Golyshev V.D., M.A.Gonik. Terrestrial experimental research of new method features of large single crystal growth. In: *Proc. Microgravity sci. and applications session, Int. Aerospace Congr., Moscow, August 16-17,1994*,Moscow, 1995, pp.167-171.
6. N.G.Bourago, A.I.Fedyushkin, V.I.Polezhaev. Modelling of unsteady submerged heating crystal growth in ground-based and microgravity environment. Physical sciences in microgravity. Proceedings of joint Xth European and VIth Russian Symposium on Physical sciences in microgravity. St. Peterburg, Russia, 15-21 June 1997 , vol. II, pp.170-173, 1997.

7. A.I.Fedyushkin, N.G. Bourago. Impurity distribution in submerged heater method with and without rotation. Proceedings of the Int.Conf. on Computational Heat and Mass Transfer. April 26-29, 1999, N.Cyprus, Turkey, pp. 207-215.
8. I.H.Avetisov, N.G. Bourago, A.I.Fedyushkin, V.I. Polezhev, A.V. Skorenko, E.V. Zharikov. The heat and mass transfer during direct crystallization under the vibrational influence. Abstracts of Third Int. Conference "Single crystal growth, strength problem, and heat mass transfer". Obninsk, 1999 pp.214-215.
9. E.V.Zharikov, L.V.Prihod'ko, N.R.Storozhev. Fluid flow formation resulting from forced vibration of a growing crystal. J.Crystal Growth, 99, (1990), pp.910-914.
- 10.D.V. Lyubimov, T.P.Lybimova, S. Meradji, B.Roux. Vibrational control of crystal growth from liquid phase. Journal Crystal Growth 180(1997) 648-659.
- 11.А.А.Иванова, В.Г.Козлов, Д.В.Любимов, Т.П.Любимова, С.Мераджи, Б.РУ.
Структура осредненного течения, возбуждаемого вибрирующим телом с кромкой большой кривизны. Изв.РАН, МЖГ, № 5, 1998, стр. 30-38.
- 12.G.Z.Gershuni and D.V.Lubimov. Thermal vibrational convection. John Willey&Sons Ltd., 1998, 357p.
- 13.N. G. Bourago and V. N. Kukudzhanov, Numerical Simulation of Elastic Plastic Media by Finite Element Method, Pre-print IPMech AS USSR, N.326, 1988, pp. 1-63. Second edition in "Computer Mechanics", issue 2, 1991, pp. 78-122.
- 14.N.G.Bourago. Numerical methods for non-linear processes in elastic plastic media. in "Lechers of FEM-94 Seminar", Gothenberg, 1994, pp. 1-15.

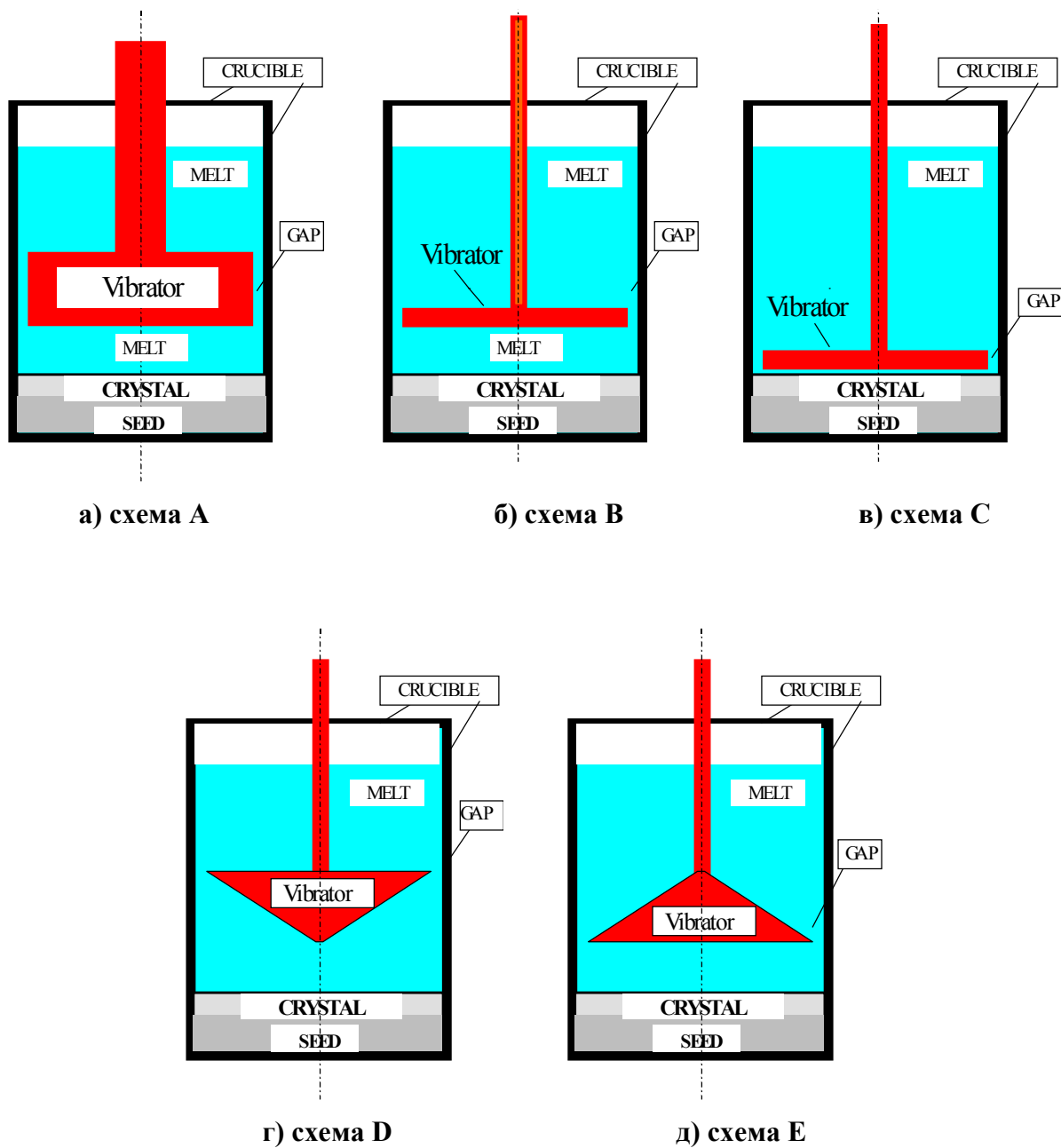


Рис.1. Схемы расчетных областей и расположение погруженных в расплав вибраторов

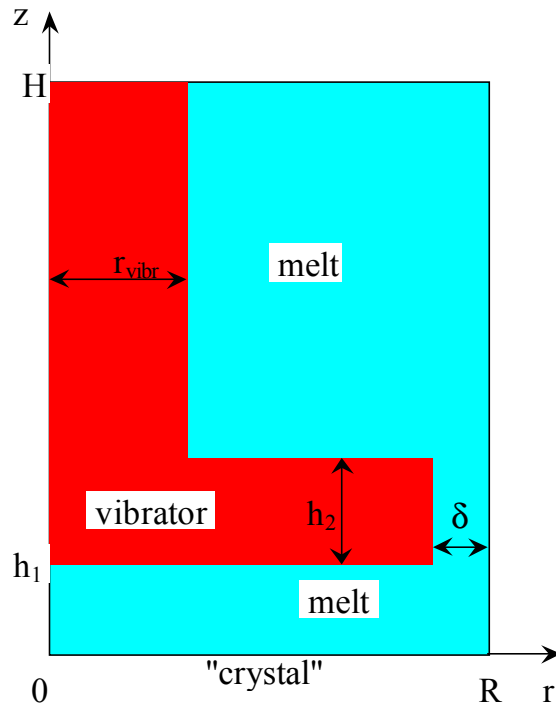
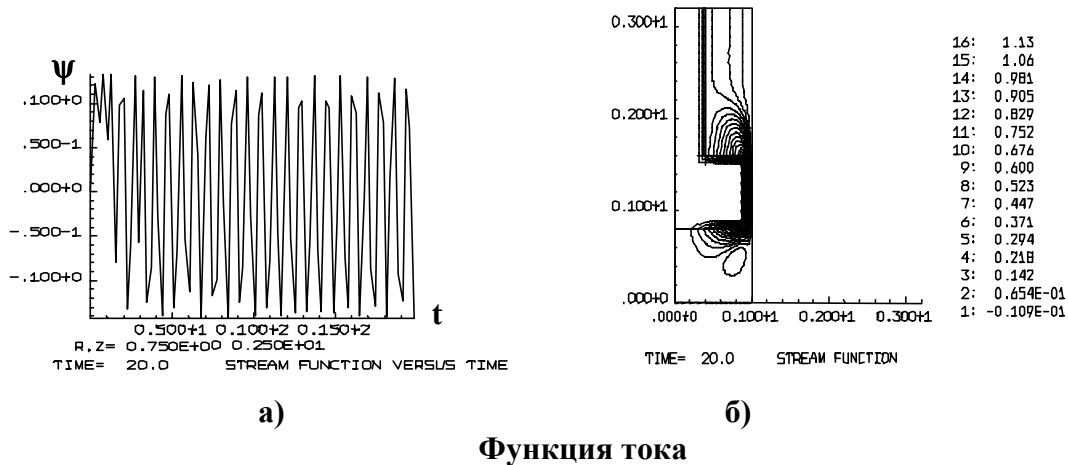
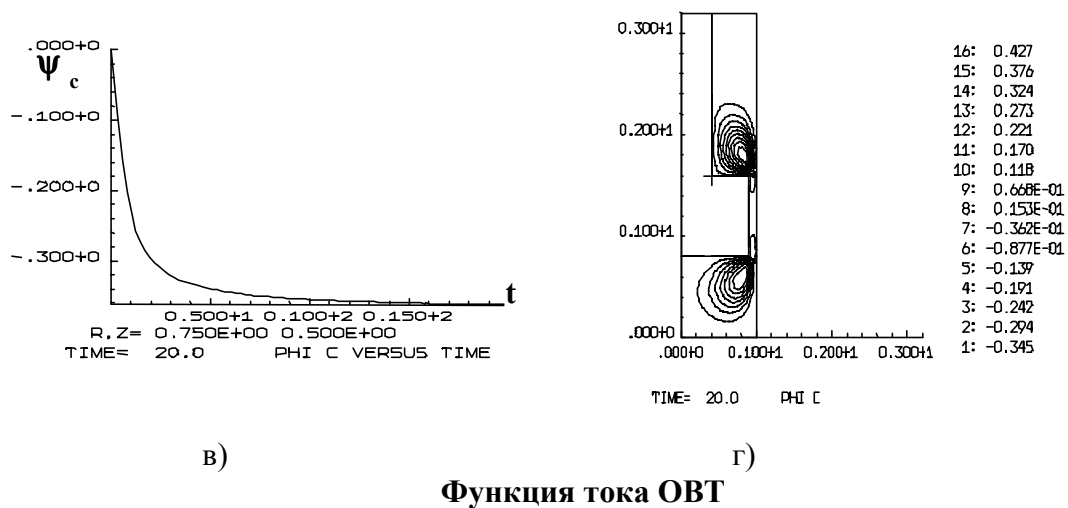


Рис. 2 Схема цилиндрической расчетной области математической модели с погруженным вибратором: R - радиус тигля, H - высота расчетной области, Oz - ось симметрии, δ - величина зазора между вибратором и стенками тигля, r_{vibr} - радиус штока вибратора, "crystal" - поверхность кристалла ($z=0$).



а) б)
Функция тока



в) г)
Функция тока ОБТ

Рис.3. Вибрационные течения в расплаве NaNO_3 в изотермическом случае (или при $g/g_0=0$). Схема "А": $A=100 \mu\text{м}$, $f=50 \text{ Гц}$, $R=1 \text{ см}$, $H=3.2 \text{ см}$.
а) характер изменения функции тока по времени в точке с координатами $r=0.75 \text{ см}$, $z=2.5 \text{ см}$;
б) изолинии функции тока в момент времени $t=20 \text{ сек}$;
в) изменение осредненной функции тока по времени;
г) изолинии осредненной функции тока значение в момент времени $t=20 \text{ сек}$.

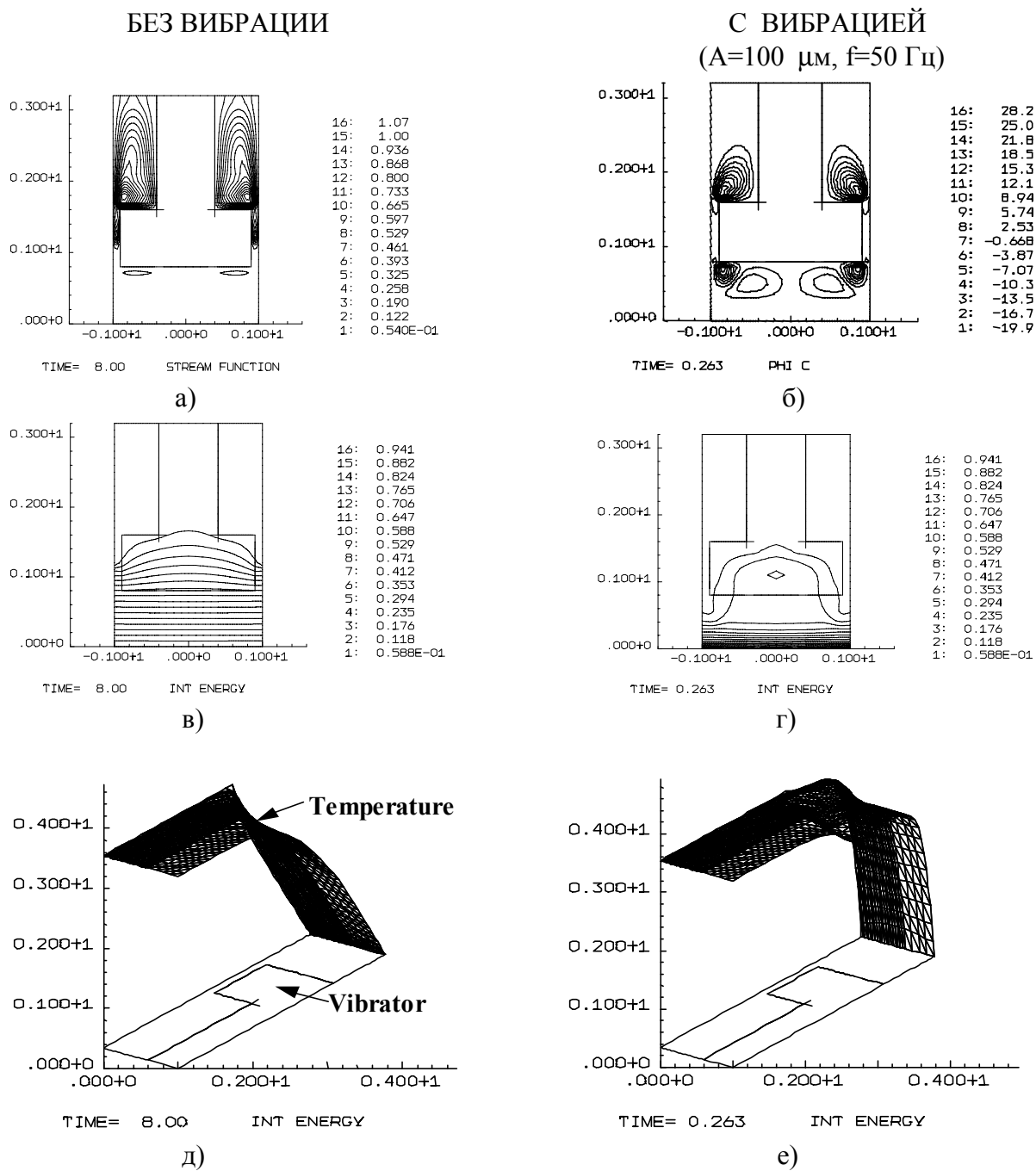
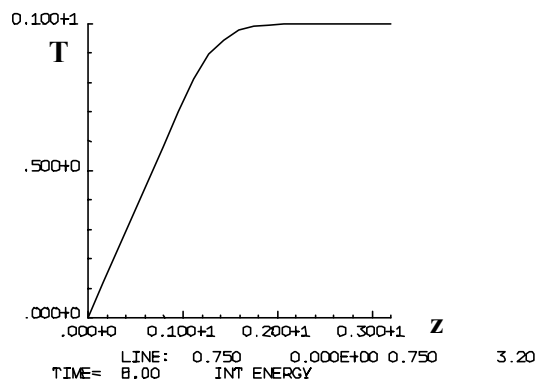


Рис. 4. Влияние вибраций на градиент температуры у фронта кристаллизации в методе погруженного вибратора. Схема "А". ($Gr=2.1 \cdot 10^6$, $Pr=5.43$, $H/R=3.2$). а) функция тока; б) функция тока ОВТ; в) и г) изотермы; д) и е) аксонометрические проекции поля температуры

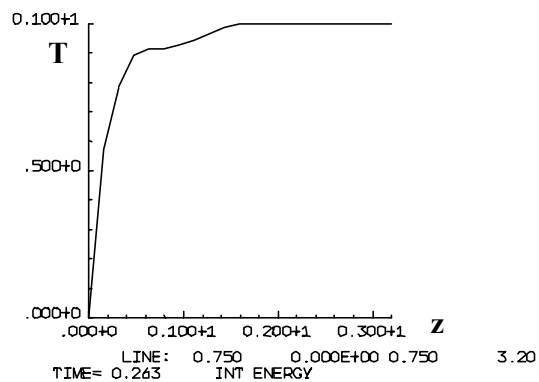
(см. продолжение)

БЕЗ ВИБРАЦИИ

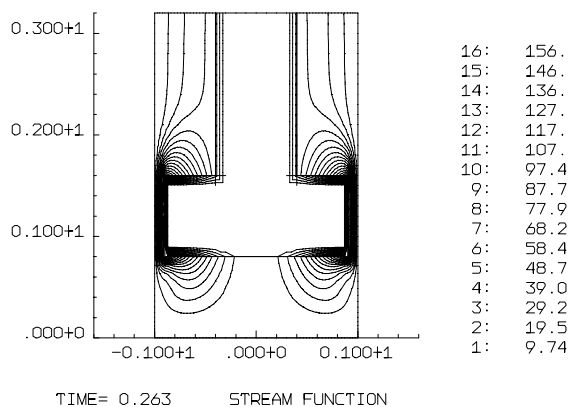


ж)

С ВИБРАЦИЕЙ
($A=100 \mu\text{м}$, $f=50 \text{ Гц}$)



з)



и)

Рис. 4. (Продолжение).

Влияние вибраций на градиент температуры у фронта кристаллизации в методе погруженного вибратора.

Схема "А". ($Gr=2.1 \cdot 10^6$, $Pr=5.43$, $H/R=3.2$).

ж) и з) вертикальные профили температуры ($r=0.75$);
и) мгновенная функция тока в момент времени $t=0.263$.

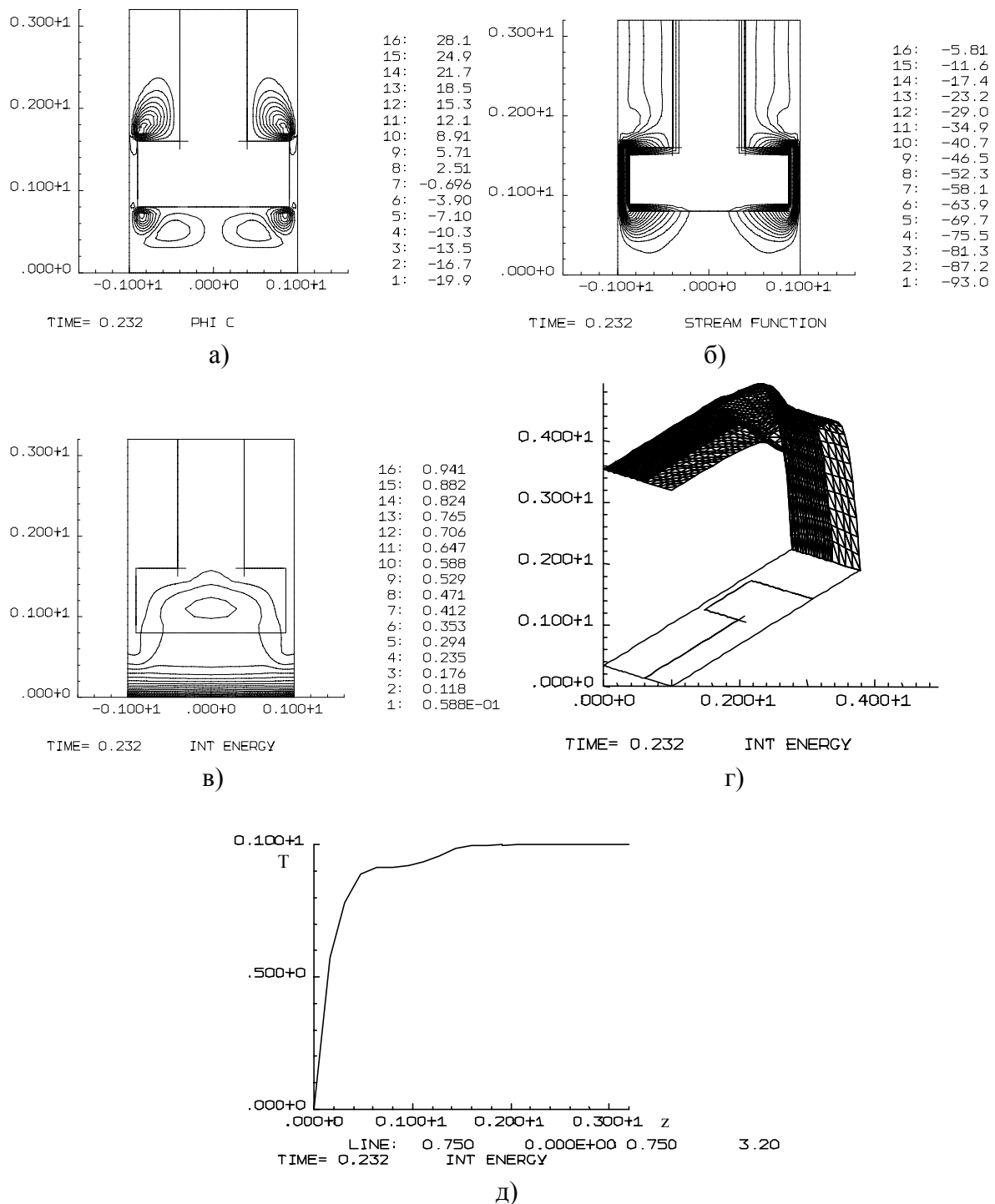
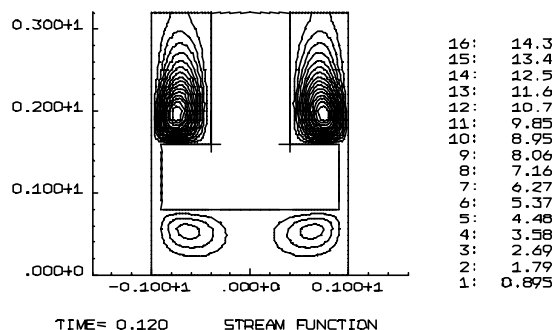


Рис. 5. Влияние вибраций на температурный пограничный слой у фронта кристаллизации в условиях невесомости.

(Схема "А". $Gr=0$, $Pr=5.43$, $f=50$ Гц, $A=100$ $\mu\text{м}$).

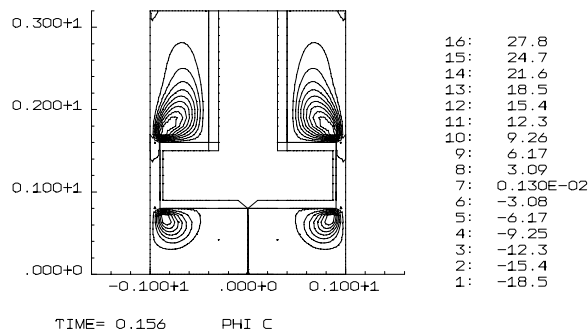
а) функция тока ОВТ, б) функция тока, в) изотермы, г) распределение температуры в виде аксонометрической проекции температуры, д) вертикальный профиль температуры ($r=0.75$).

БЕЗ ВИБРАЦИИ

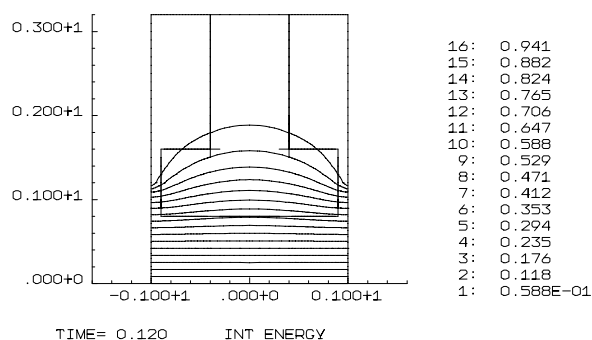


а)

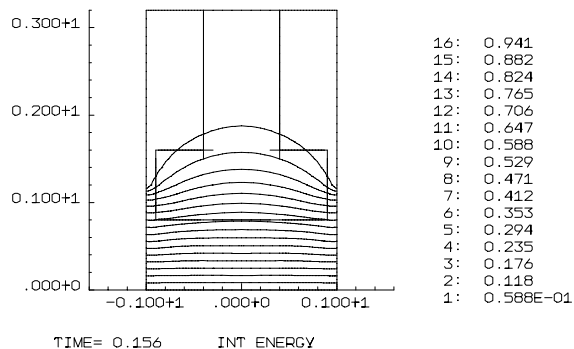
С ВИБРАЦИЕЙ (A=100 мкм, f=50 Гц)



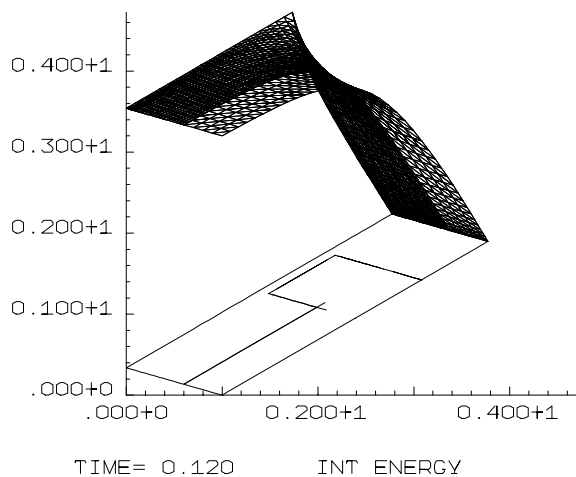
б)



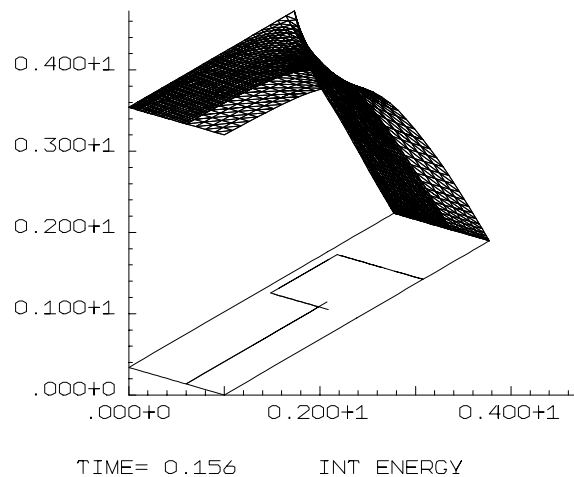
в)



г)



д)

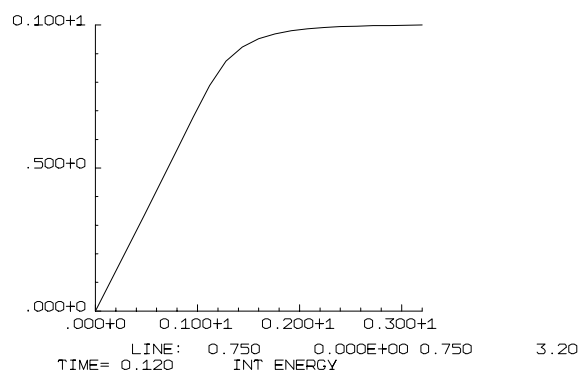


е)

Рис. 6. Влияние вибраций на температурный пограничный слой у фронта кристаллизации для расплавов полупроводников. Схема "А". ($Gr=2146100$, $Pr=0.01$, $f=50$ Гц, $A=100$ мкм). а) функция тока; б) функция тока ОВТ; в) и г) изотермы; д) и е) аксонометрические проекции температуры.

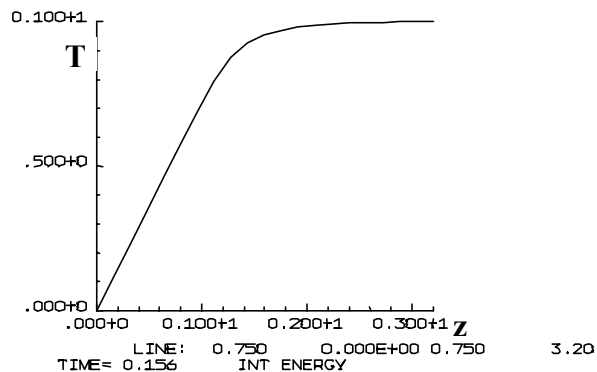
(см. продолжение)

БЕЗ ВИБРАЦИИ

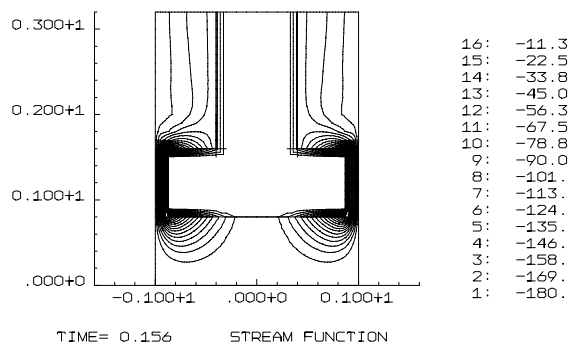


ж)

С ВИБРАЦИЕЙ
($A=100 \mu\text{м}$, $f=50 \text{ Гц}$)



з)



и)

Рис. 6. (Продолжение).

Влияние вибраций на температурный пограничный слой у фронта кристаллизации для расплавов полупроводников.

Схема "А". ($Gr=2146100$, $Pr=0.01$, $f=50 \text{ Гц}$, $A=100 \mu\text{м}$)

ж) и з) вертикальные профили температуры ($r=0.75$);

и) мгновенная функция тока в момент времени $t=0.156$.

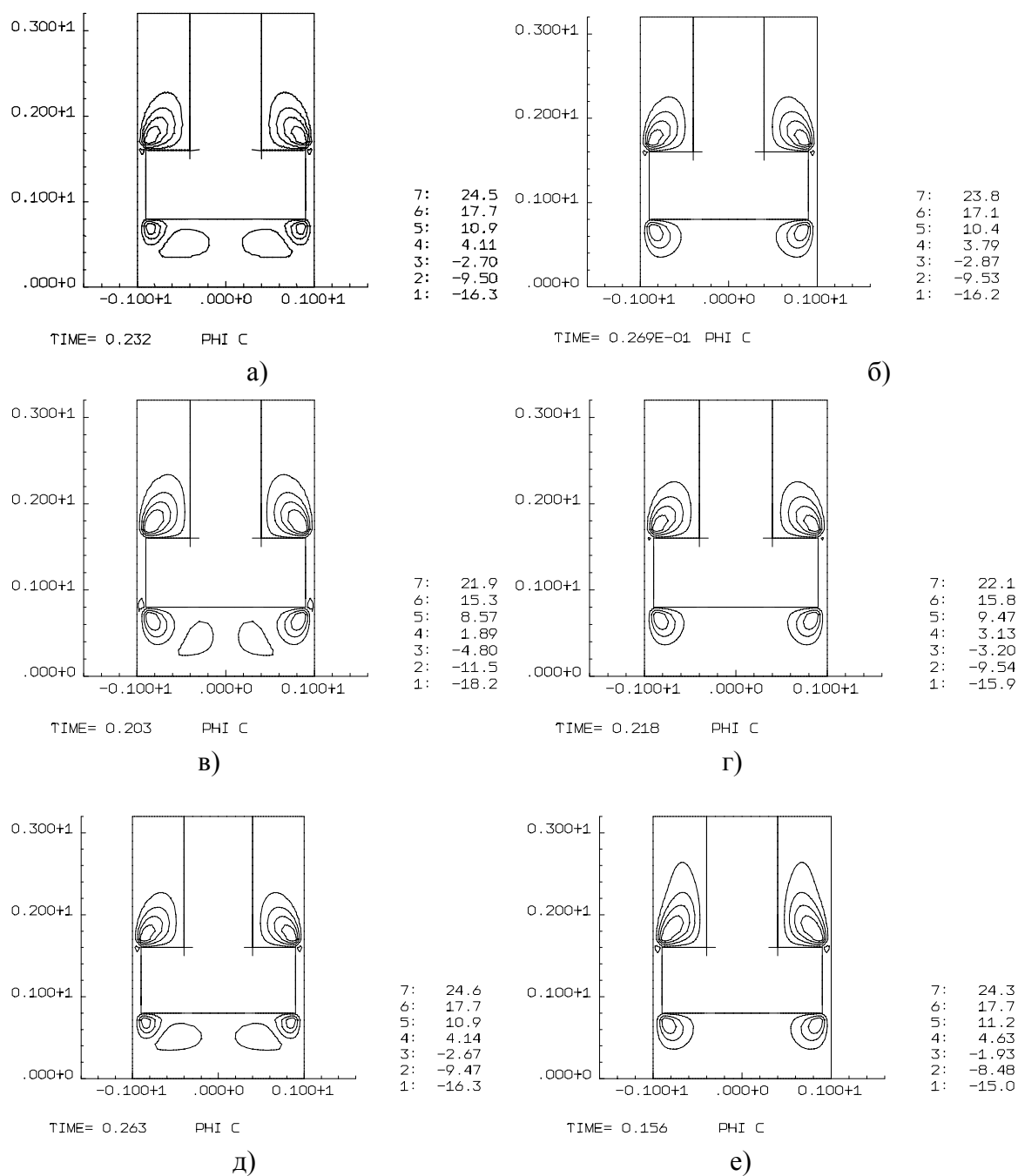


Рис.7. Изолинии функции тока осредненного вибрационного течения при различных числах Грасгофа и Прандтля. Схема "А". ($f=50$ Гц, $A=100$ μ м).
а) $Gr=0, Pr=5.43$; б) $Gr=2.1 \cdot 10^5, Pr=0.18$; в) $Gr=2.1 \cdot 10^5, Pr=5.43$; г) $Gr=2.1 \cdot 10^5, Pr=54.3$;
д) $Gr=2.1 \cdot 10^6, Pr=5.43$; е) $Gr=2.1 \cdot 10^6, Pr=0.01$.

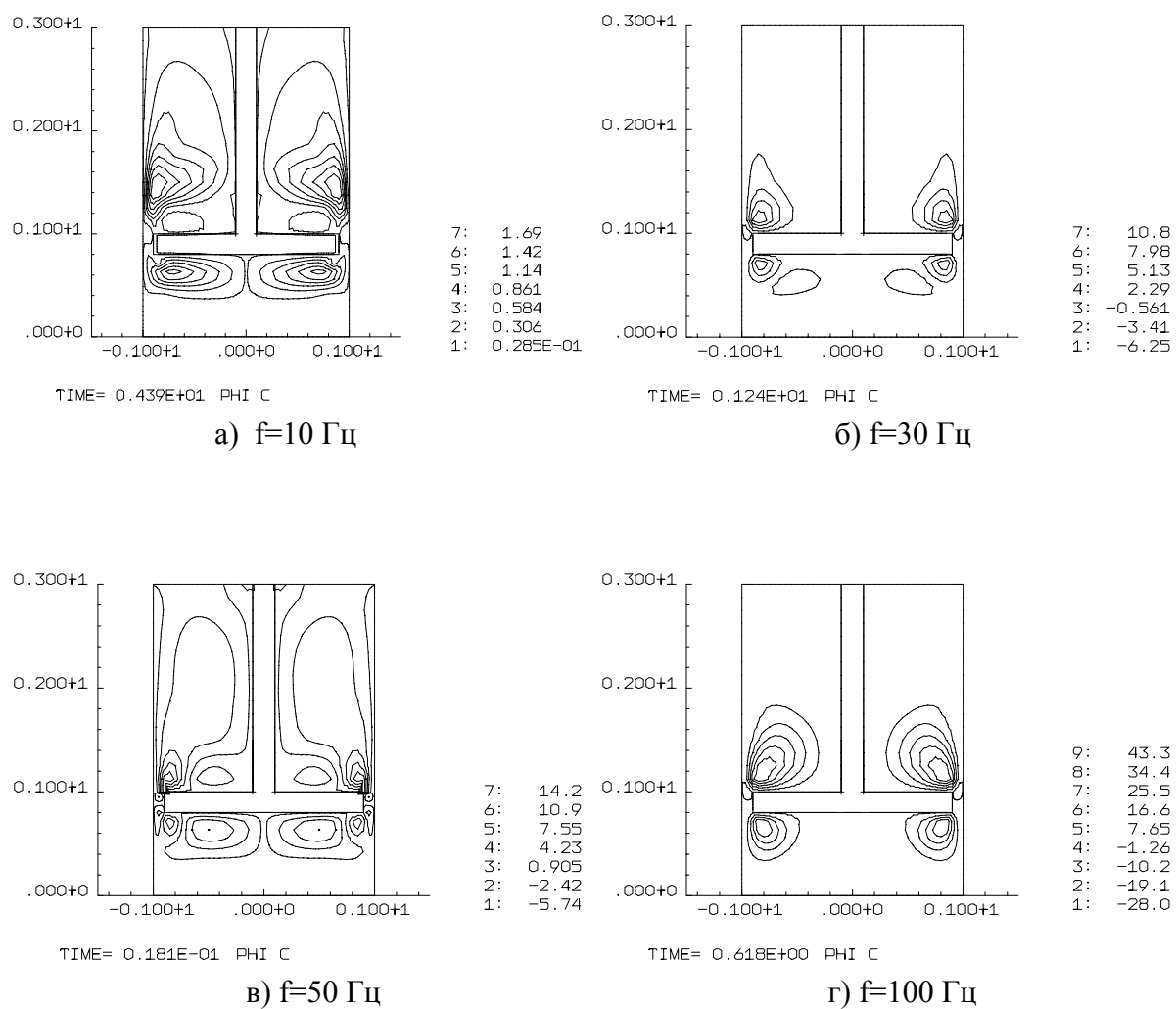
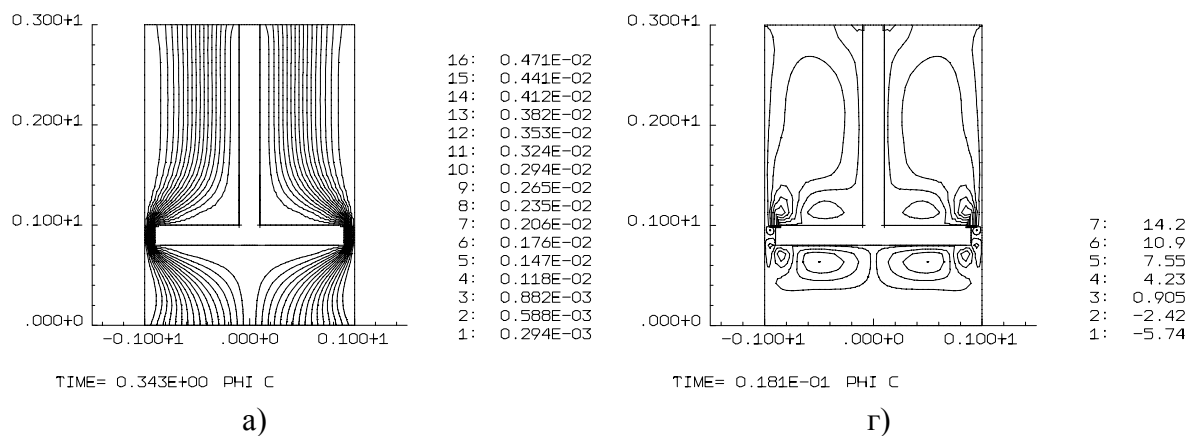
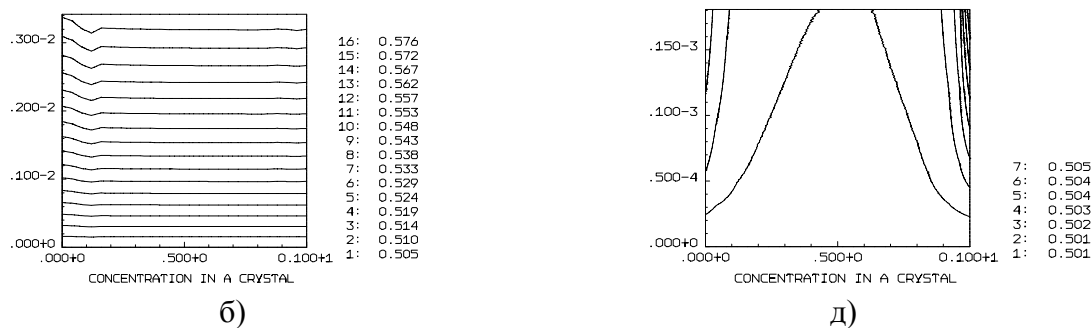


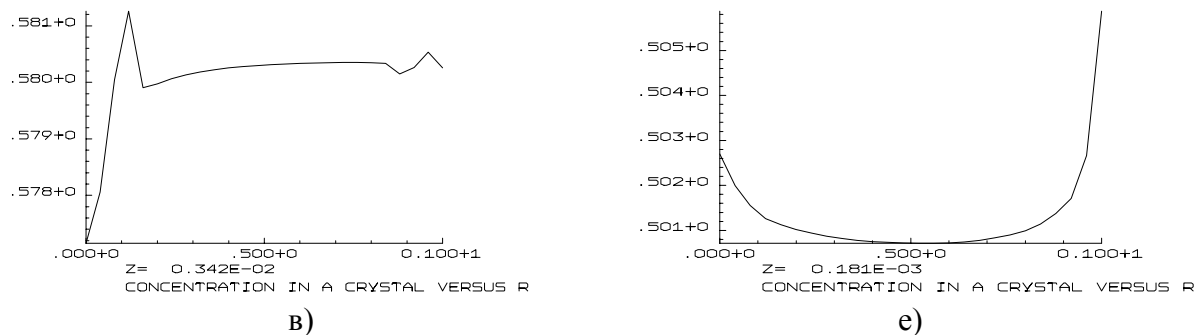
Рис. 8. Изолинии функции тока ОВТ при четырех частотах вибраций:
 а) - $f=10$ Гц, б) - $f=30$ Гц, в) - $f=50$ Гц, г) - $f=100$ Гц,
 (схема "В", $A=100$ $\mu\text{м}$, $Gr=2 \cdot 10^6$, $Pr=5.43$).



функция тока ОБТ



линии равной концентрации в кристалле



радиальное распределение примеси на фронте кристаллизации

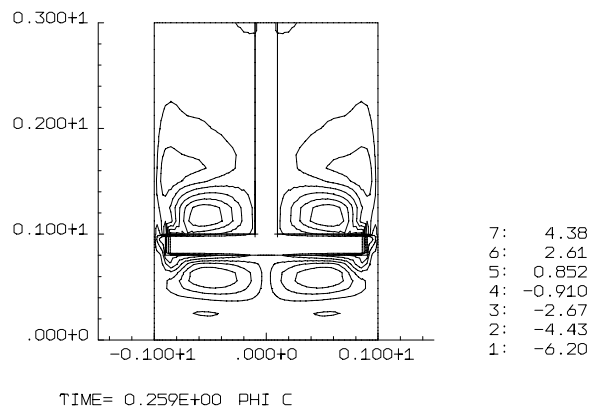
Рис. 9. Влияние вибраций на распределение примеси в кристалле для трех наборов параметров (Схема "В"):

1- (а,б,в) - без вибрации и без конвекции $Sc=500$;

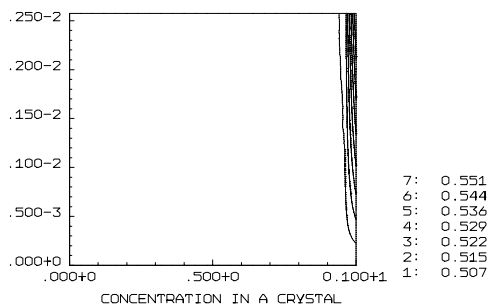
2- (г,д,е) - вибрация и естественная конвекция ($A=100$ $\mu\text{м}$, $f=50$ Гц, $Gr=2 \cdot 10^6$, $Pr=5.43$, $Sc=500$);

3- (ж,з,и) - вибрация и естественная конвекция ($A=100$ $\mu\text{м}$, $f=50$ Гц, $Gr=2 \cdot 10^6$, $Pr=54.3$, $Sc=500$).

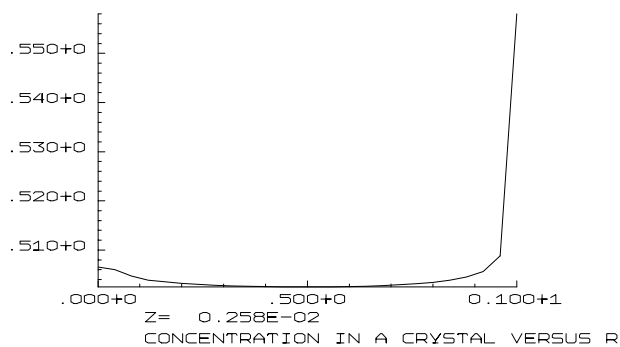
(См. продолжение)



ж)
функция тока ОБТ



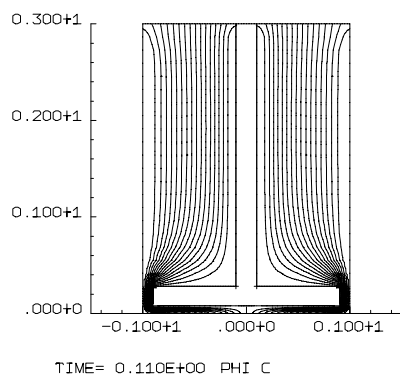
з) линии равной концентрации в кристалле



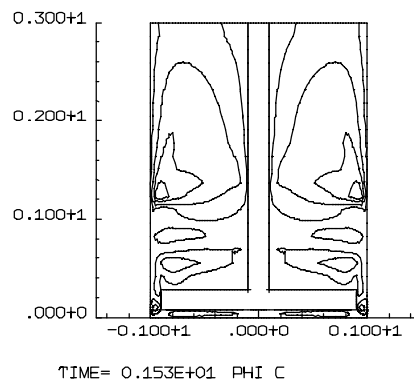
и) радиальное распределение примеси на фронте кристаллизации

Рис.9. (Продолжение).

Влияние вибраций на распределение примеси в кристалле для трех наборов параметров (Схема "В"): 1- (а,б,в)- без вибрации и без конвекции $Sc=500$; 2- (г,д,е)- вибрация и естественная конвекция ($A=100 \mu\text{м}$, $f=50 \text{ Гц}$, $Gr=2 \cdot 10^6$, $Pr=5.43$, $Sc=500$); 3- (ж,з,и)- вибрация и естественная конвекция ($A=100 \mu\text{м}$, $f=50 \text{ Гц}$, $Gr=2 \cdot 10^6$, $Pr=54.3$, $Sc=500$).



16: 0.471E-02
 15: 0.441E-02
 14: 0.412E-02
 13: 0.382E-02
 12: 0.353E-02
 11: 0.324E-02
 10: 0.294E-02
 9: 0.265E-02
 8: 0.235E-02
 7: 0.206E-02
 6: 0.176E-02
 5: 0.147E-02
 4: 0.118E-02
 3: 0.882E-03
 2: 0.588E-03
 1: 0.294E-03

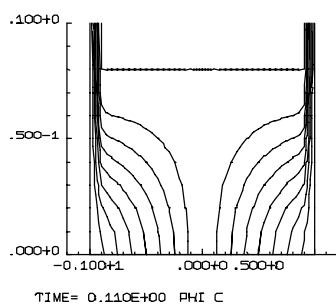


6: 1.25
 5: 0.856
 4: 0.463
 3: 0.695E-01
 2: -0.324
 1: -0.717

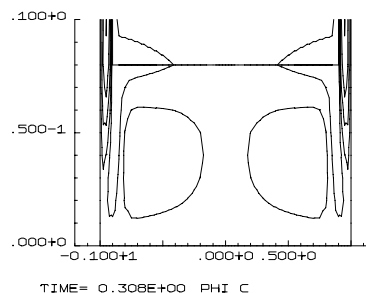
а)

г)

Функция тока ОБТ



7: 0.437E-02
 6: 0.375E-02
 5: 0.312E-02
 4: 0.250E-02
 3: 0.187E-02
 2: 0.125E-02
 1: 0.625E-03

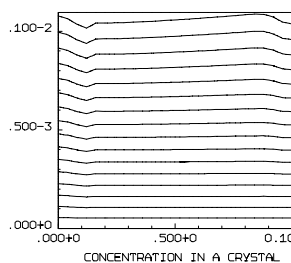


7: 1.45
 6: 1.04
 5: 0.634
 4: 0.224
 3: -0.186
 2: -0.596
 1: -1.01

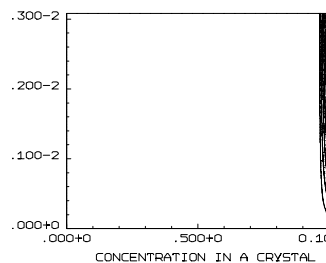
б)

д)

Функция тока ОБТ (в нижней части области, под вибратором)



16: 0.541
 15: 0.538
 14: 0.536
 13: 0.533
 12: 0.531
 11: 0.528
 10: 0.526
 9: 0.523
 8: 0.521
 7: 0.518
 6: 0.515
 5: 0.513
 4: 0.510
 3: 0.508
 2: 0.505
 1: 0.503



7: 0.559
 6: 0.550
 5: 0.542
 4: 0.534
 3: 0.525
 2: 0.517
 1: 0.508

в)

е)

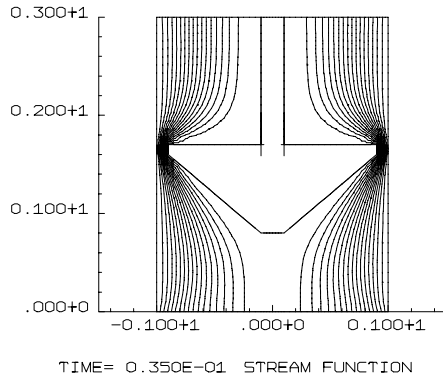
Линии равной концентрации в кристалле

Рис. 10 Схема "С". Влияние вибратора близко расположенного к фронту кристаллизации на распределение примеси для двух случаев:

1- (а,б,в) - без вибрации и без конвекции;

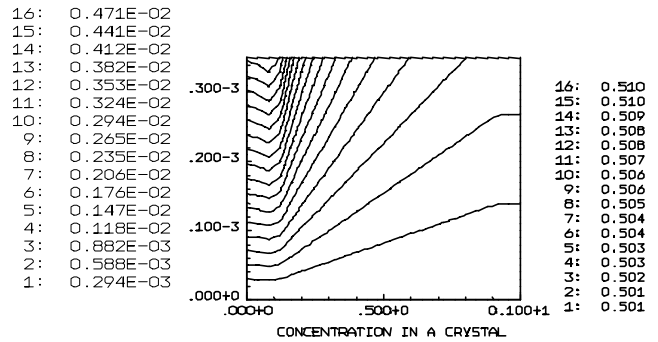
2- (г,д,е) - с тепловой конвекцией и вибрацией ($A=100 \mu\text{м}$, $f=10 \text{ Гц}$, $Gr=2 \cdot 10^6$, $Pr=5.43$, $Sc=500$).

ФУНКЦИЯ ТОКА

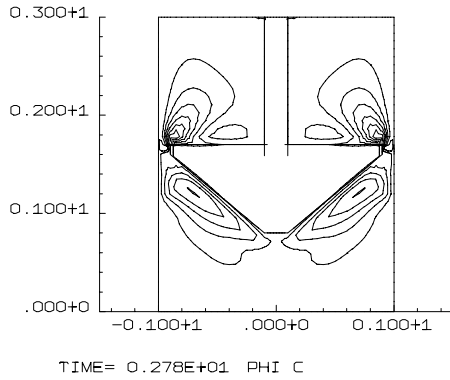


а)

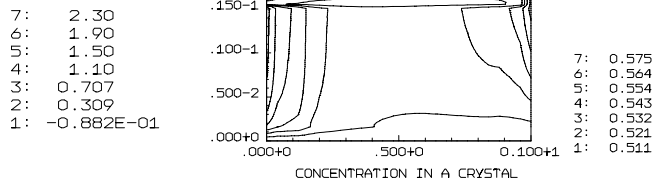
КОНЦЕНТРАЦИЯ В КРИСТАЛЛЕ



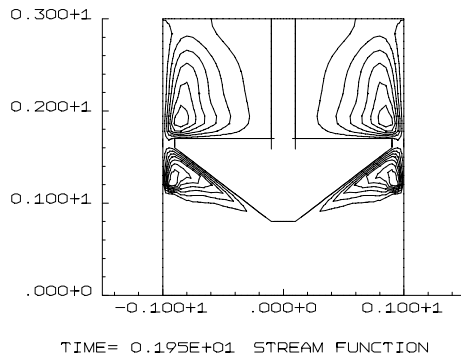
б)



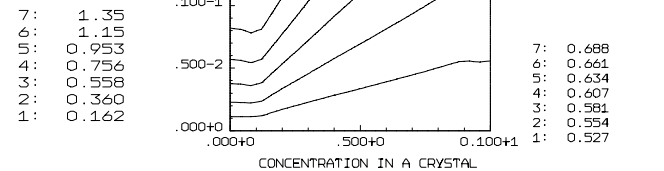
в)



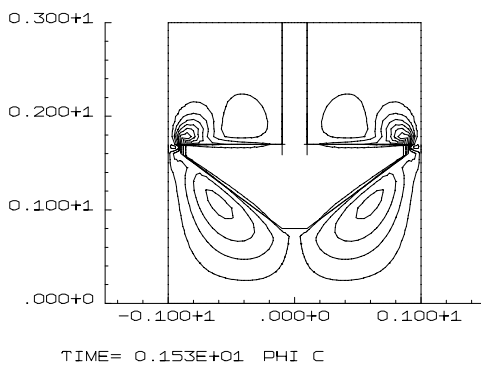
г)



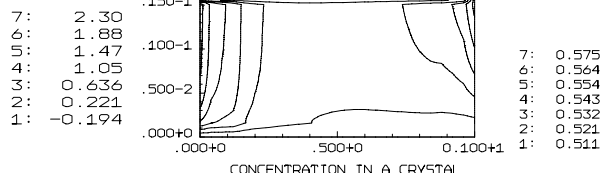
д)



е)

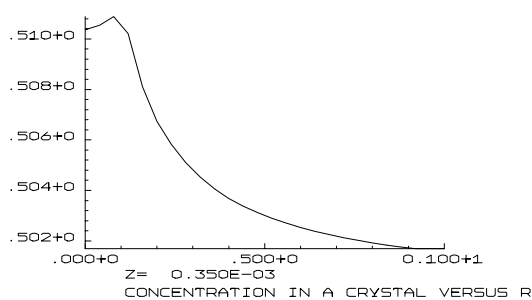


ж)

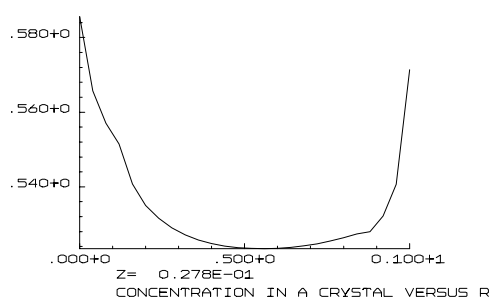


з)

Рис. 11. Влияние числа Грасгофа и частоты колебаний вибратора на ОВТ и распределение примеси. Схема "D". A=100 мкм, Pr=5.43, Sc=500. а) и б) - Gr=0, f=0 Гц; в) и г) (нижняя часть "кристалла") - Gr=0, f=10 Гц; д) и е) - Gr=2.1 10⁶, f=0 Гц; ж) и з) (верхняя часть "кристалла") - Gr=2.1 10⁶, f=10 Гц; (См. продолжение)



з)



и)

Рис. 11. (Продолжение)

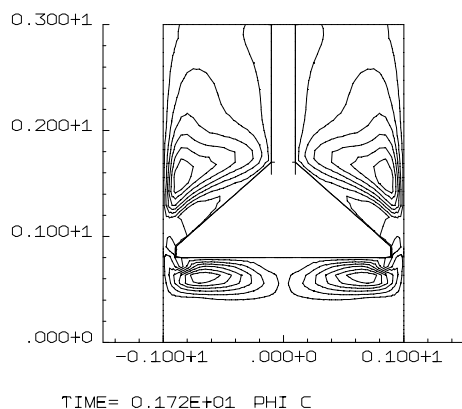
Влияние числа Грасгофа и частоты колебаний вибратора на ОВТ и распределение примеси. Схема "D": $A=100$ $\mu\text{м}$, $Pr=5.43$, $Sc=500$.

а) и б) - $Gr=0$, $f=0$ Гц; в) и г) (нижняя часть "кристалла") - $Gr=0$, $f=10$ Гц; д) и е) - $Gr=2.1 \cdot 10^6$, $f=0$ Гц;

ж) и з) (верхняя часть "кристалла") - $Gr=2.1 \cdot 10^6$, $f=10$ Гц;

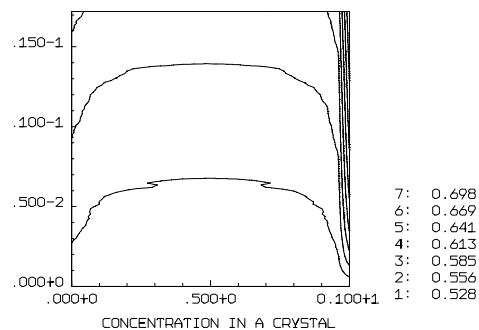
з) - поперечный профиль концентрации в кристалле при $Gr=0$, $f=0$ Гц;

и) - поперечный профиль концентрации в кристалле при $Gr=2.1 \cdot 10^6$, $f=10$ Гц.



а)

7:	1.83
6:	1.49
5:	1.15
4:	0.806
3:	0.467
2:	0.127
1:	-0.213



б)

7:	0.698
6:	0.669
5:	0.641
4:	0.613
3:	0.585
2:	0.556
1:	0.528

Рис.12. Схема "E".

а) - Функция тока ОВТ и б) - распределение примеси в кристалле ($Gr=1.2 \cdot 10^6$, $Pr=5.43$, $Sc=500$, $f=10$ Гц, $A=100$ $\mu\text{м}$)