

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ
БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ**

**ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ МЕХАНИКИ им. А.Ю. ИШЛИНСКОГО
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК**

А.И. ФЕДЮШКИН, К.А ИВАНОВ

**ГИДРОДИНАМИКА И ТЕПЛОМАССОБМЕН ПРИ
ВИБРАЦИОННЫХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ НА РАСПЛАВ В
ПРОЦЕССАХ ВЫРАЩИВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ**

Препринт № 1085

Москва 2014

УДК 532.252+536.248.2

А.И. Федюшкин, К.А. Иванов. Гидродинамика и теплообмен при вибрационных воздействиях на расплав в процессах выращивания монокристаллов. - Препринт ИПМех РАН, № 1085, Москва, 2014, 107 с.

Аннотация

В данной работе обобщаются результаты математического моделирования конвективного теплопереноса и анализ влияния вибраций на пограничные слои в расплавах при выращивании монокристаллов методами Бриджмена, Чохральского и плавающей зоны. Анализ влияния вибраций проводится на основе сравнения полей скоростей и температуры для случаев с вибрационным воздействием и без вибраций.

Для методов Бриджмена и Чохральского выполнено численное моделирование конвективного теплопереноса, как с вибрациями погруженного в расплав вибратора, так и при вибрации растущего кристалла. Для метода плавающей зоны получены результаты с учетом реальной криволинейной формы жидкой зоны с учетом и без учета следующих факторов: излучения, вращения, вибраций, гравитационной и термокапиллярной конвекции.

В работе показано, что вибрации могут интенсифицировать перемешивание, тепло-массоперенос в расплаве, а также уменьшать толщины пограничных слоев (динамического, температурного и концентрационного), что может приводить к увеличению температурного градиента на фронте кристаллизации и увеличению скорости роста кристаллов. Последний факт очень важен при выращивании кристаллов, так как влияет на производительность и на совершенство кристаллов.

Данная работа была поддержана российским фондом фундаментальных исследований, грант №. 13-02-12199

Abstract

This paper summarizes the results of mathematical modeling of convective heat transfer and analysis of influence of vibration on the boundary layers of melt flow during crystal growth by methods Bridgman, Czochralski and floating zone. Analysis of influence of vibration is based on a comparison of temperature and velocity fields for cases with vibrating effects and without vibration

The numerical simulation of convective heat transfer for a case of creation of vibrations by submerged vibrator (in Bridgman and Czochralski techniques) are executed and at vibrations of a crystal. For a method of a floating zone the results of simulation in view of real shape of a liquid zone with the account and without the account of the following factors: radiations, rotation, vibrations, gravitational and Marangoni convection are simulated.

Is shown that the vibrations can intensify of heat- mass transfer and mixing of the melt, and also to reduce dynamic and temperature boundary layers and to increase a temperature gradient on melt/crystal interface, that can to increase rate of crystal growth. It is very impotent for manufacturing and quality of crystals.

The research was supported by the Russian Foundation of Basic Research. GrantNo. 13-02-12199

ISBN 978-5-91741-125-5

055(02)2 © Федеральное государственное бюджетное учреждение

Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского Российской Академии Наук, 2014

Содержание

Аннотация	2
Abstract	2
1. Введение.....	5
2. Постановка задачи и математическая модель	7
3. Метод Бриджмена	12
3.1. Постановка задачи	12
3.2. Результаты численного моделирования	13
3.2.1. Влияние вибраций на пограничные слои.....	14
3.2.2. Влияние вибраций на распределение примеси в кристалле	15
3.2.3. Влияние вибраций на форму фронта кристаллизации	17
3.3. Выводы по моделированию метода Бриджмена.....	20
4. Метод Чохральского	21
4.1. Естественная конвекция при выращивании монокристаллов методом Чохральского	21
4.1.1. Осесимметричная математическая модель.....	21
4.1.2. Плоская 2D математическая модель.....	22
4.1.3. Метод расчёта	25
4.1.4. Результаты математического моделирования.....	27
4.2. Конвекция Марангони при выращивании монокристаллов методом Чохральского	31
4.2.1. Постановка задачи и математическая модель.....	31
4.2.2. Метод расчёта.....	32
4.2.3. Результаты математического моделирования.....	33
4.3. Метод Чохральского с погруженным вибратором	39
4.3.1. Математическая постановка задачи	39
4.3.2. Особенности метода расчёта	41
4.3.3. Результаты многопараметрических расчётов.....	47
4.3.3.1. Расплав нитрата натрия	47

4.3.3.2.	Расплав металла.....	50
4.3.3.3.	Водно-глицериновая смесь	54
4.3.3.4.	Расплав с большим числом Прандтля при наличии естественной конвекции.....	57
4.3.3.5.	Расплав нитрата натрия	63
4.3.3.6.	Водно-глицериновая смесь	66
4.3.4.	Вибрации кристалла и вибратора совместно с гравитационной конвекцией.....	71
4.3.4.1.	Результаты моделирования:	71
4.3.5.	Вращательно-качательные вибрации	74
4.3.5.1.	Постановка задачи и математическая модель.....	74
4.3.5.2.	Метод расчёта.....	77
4.3.5.3.	Результаты моделирования вращательно-качательных вибраций... ..	77
4.4.	Выводы по результатам моделирования метода Чохральского	82
5.	Метод плавающей зоны.....	83
5.1.	Постановка задачи	83
5.2.	Результаты расчетов	86
5.2.1.	Вертикальные вибрации.	89
5.2.2.	Горизонтальные вибрации.....	90
5.2.3.	Вертикальные и горизонтальные вибрации.....	90
5.3.	Выводы по результатам моделирования зонной плавки.	91
6.	Выводы	92
	Благодарность.....	93
	Литература	94
	Основные обозначения, термины, функции.....	99
	Приложение 1	102
	Приложение 2	104

1. Введение

Вибрации могут быть, как негативным, так и позитивным фактором, влияющим на протекание многих физических, химических, технических и технологических процессов, а также могут являться эффективным управляющим средством в различных процессах. Изучение воздействия вибраций на жидкие среды проводится уже около 200 лет, начиная с работ М. Фарадея (1831г.) [1] и Л. Рэля (1883г.) [2]. Обзоры работ по вибрационному конвективному течению можно найти в монографиях [3, 4]. В частности, в технологических процессах, например, при выращивании монокристаллов, вибрации оказывают влияние на гидродинамику расплава, на распределение температуры (примеси), на скорость кристаллизации и на совершенство кристаллов. В данной работе негативные проявления вибрационного воздействия на рост и качество кристаллов рассматриваться не будут. Следует отметить, что вибрационное управление теплообменом в расплаве может быть энергоэкономичным и более простым, чем при управлении гравитационным или магнитным полями. Поэтому исследование вибровоздействий на гидродинамику расплава является актуальной задачей.

Вибрационное воздействие на жидкий объем может создаваться двумя способами: первый-это вибрации всего жидкого объема, как целого, или при изменении гравитационного поля, например, так называемый g -jitter, в котором находится жидкий объем, и второй способ-это, когда вибрации приложены к части границы этого жидкого объема или к погруженному в расплав вибратору. Первый способ вибрационного воздействия можно рассматривать, как частный случай второго случая, но

при одновременной вибрации всех границ жидкого объема. Исследованию вибраций первого типа посвящено много теоретических работ [3-8] и экспериментальных работ [9-14], в которых указывается на возникновение осредненного вибрационного конвективного течения.

Данная работа посвящена исследованию гидродинамики и теплообмена при вибрационных воздействиях второго типа, когда вибрации приложены к погруженному телу (вибратору) или к части границы жидкого объема и является обобщением и продолжением работ [15-23]. В данной работе рассматриваются только управляемые гармонические поступательные и вращательно-качательные вибрационные воздействия. Случай вращательных вибраций на гидродинамику и однородность распределения примеси в расплаве и кристалле был рассмотрен в работах [16, 21, 22]. В работе [15] приводятся результаты по моделированию конвективного теплопереноса с учетом прикристаллизационной зоны (*mushy zone*) и дан обзор работ по различным моделям и исследованиям теплопереноса при получении материалов из растворов или расплавов с учетом *mushy zone*.

В данной работе приводятся результаты математического моделирования и анализа гидродинамики расплава и теплопереноса в процессах выращивания монокристаллов при вибрационных воздействиях применительно к трем методам выращивания монокристаллов: Бриджмена, Чохральского и плавающей зоны. Для метода Бриджмена решалась задача Стефана и выполнены исследования влияния вибраций на форму фронта кристаллизации. Для плавающей зоны вначале была определена реальная формы свободной поверхности и затем для нее выполнены численные расчеты конвективного

теплопереноса с учетом и без учета следующих факторов: излучения, вращения, вибраций, гравитационной и термокапиллярной конвекции.

Данные расчеты проведены как для расплавов полупроводниковых материалов (с числом Прандтля $Pr \ll 1$), так и для оксидов ($Pr > 1$). Для метода Чохральского рассмотрены модели с вибрациями растущего кристалла и с вибратором, погруженным под растущий кристалл. Рассмотрены две модели: с расположением кромки растущего кристалла на уровне расплава и с расположением ниже уровня расплава. Рассмотрено влияние вибраций на термокапиллярную конвекцию. Анализ результатов производился для квази-установившихся режимов, приводятся как мгновенные, так и осредненные по времени характеристики течения.

Результаты численного моделирования показали, что вибрации могут уменьшать толщину динамических и температурного пограничных слоев и увеличивать температурный градиент на фронте кристаллизации, что может интенсифицировать тепло-массообмен и, в частности, скорость роста кристаллов. Факт увеличения скорости роста кристаллов при вибрационном воздействии на кристалл был обнаружен экспериментально 60 лет назад в [9].

2. Постановка задачи и математическая модель

Математические модели основаны на численном решении уравнений Навье-Стокса и уравнений конвективного переноса тепла и массы:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \alpha \frac{u}{r} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (2.1)$$

$$\frac{du}{dt} - \alpha \frac{v^2}{r} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\alpha v \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(v \frac{\partial u}{\partial z} \right) - \alpha v \frac{u}{r^2} \quad (2.2)$$

$$\frac{dw}{dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\alpha v \frac{\partial w}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(v \frac{\partial w}{\partial z} \right) + g\beta(T - T_m) \quad (2.3)$$

$$\frac{dv}{dt} + \alpha \frac{uv}{r} = \alpha \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r v \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(v \frac{\partial u}{\partial z} \right) - v \frac{u}{r^2} \right] \quad (2.4)$$

$$\frac{d\rho c_p T}{dt} = \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\alpha \lambda \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (2.5)$$

$$\frac{dC}{dt} = \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\alpha D \frac{\partial C}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (2.6)$$

Здесь: r и z радиальная и осевая координаты, t - время, u и w – радиальная и осевая компоненты вектора скорости, v - азимутальная компонента скорости, T - температура, C – концентрация примеси, p - давление, ρ - плотность, g – гравитационное ускорение свободного падения, β_T , ν , λ , c_p , α , D - коэффициенты линейного температурного расширения, кинематической вязкости, теплопроводности, теплоёмкости, температуропроводности и диффузии, α - геометрический фактор, который равен 0 для плоской и 1 для осесимметричной геометрии, A - амплитуда и $\omega = 2\pi f$ частота вибраций, Ω - угловая скорость вращения, W_S - скорость роста кристалла (при решении задачи Стефана она не задается, а определяется из решения задачи), ΔT – масштаб температуры, k_0 - коэффициент распределения примеси, \mathbf{n} – единичный вектор нормали к границе, $d\Phi/dt = \partial\Phi/\partial t + V \cdot \nabla\Phi$ - субстанциональная производная (где Φ – обобщенный вид функции, например, в уравнениях (2.2)-(2.6) - это переменные u , v , T , C). Другие обозначения приведены в списке обозначений в конце работы.

Граничные условия:

на оси симметрии ($r=0$): $u=0, \frac{\partial w}{\partial r}=0, v=0, \frac{\partial T}{\partial r}=0, \frac{\partial C}{\partial r}=0;$ (2.7)

на фронте кристаллизации ($z=0$): $u=0, v=2\pi r\Omega_c, D\frac{\partial C}{\partial z}=W_s C(1-k_0);$ (2.8a)

и для температуры задавалось либо условие Стефана, с определением положения и скорости фронта кристаллизации при условии выполнения баланса тепла на фронте кристаллизации:

$$\frac{1}{Pr} \left(\frac{\partial T}{\partial n} \Big|_l - \lambda_0 \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_s \right) = -St W_s \quad (2.8б)$$

либо задавались положение фронта, скорость и температура кристаллизации (которая в общем случае определяется из диаграммы состояния):

$$w = -W_s, T = T_m \quad (2.8в)$$

на боковой стенке тигля ($r=R$): $u=0, w=0, v=2\pi R\Omega_c,$ (2.9)

$$\frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (0 < z < h), T = T_h \quad (h < z < H), \frac{\partial C}{\partial r} = 0; \quad (2.10)$$

на вибраторе: $u=0, w = A \omega \sin(\omega t), v = 2\pi r\Omega_{vibr}, \frac{\partial C}{\partial n} = 0, \frac{\partial T}{\partial n} = 0$ (2.11)

на горизонтальной свободной границе ($z=H$) задано:

либо условие проскальзывания: $\frac{\partial u}{\partial z} = 0, w=0, v=0, \frac{\partial T}{\partial z} = 0, C = C_0$ (2.12.a)

либо условие Марангони:

$$\rho v \frac{\partial u}{\partial z} = \frac{\partial \sigma_T}{\partial T} \cdot \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial \sigma_C}{\partial C} \cdot \frac{\partial C}{\partial r}, w=0, v=0, \frac{\partial T}{\partial z} = 0, C = C_0 \quad (2.12.6)$$

, где $\sigma = \sigma(T, C)$ - коэффициент поверхностного натяжения на границе раздела сред.

$$\text{Начальные условия при } t=0: u = 0, w = 0, v = 0, T = T_m, C = C_0 \quad (2.13)$$

Все расчёты производились для тепловых режимов соответствующих начальным и граничным условиям указанным выше. Скорость роста кристаллов была одинаковой во всех вариантах расчёта : $W_S = 0.3 \text{ см/час}$. Амплитуда вибраций постоянная и равна 100 мкм. Вибрационное число Рейнольдса менялось посредством изменения периода вибраций. Задача характеризуется следующими числами подобия : вращательное число Рейнольдса $Re_\Omega = \Omega_c R^2 / \nu$, число Рейнольдса связанное со скоростью роста кристалла $Re = W_S R / \nu$, вибрационное число Рейнольдса $Re_{vibr} = A \omega R / \nu$, где $\omega = 2\pi f$ круговая частота поступательных движений вибратора, число Грасгофа $Gr = g \beta \Delta T R^3 / \nu^2$ (или числа Рэлея $Ra = Gr Pr$), число Прандтля $Pr = \nu \rho c_p / \lambda$ и число Шмидта $Sc = \nu / D$.

Вибрации задавались в виде гармонической функции времени для перемещения или скорости на заданной границе или на погруженном вибраторе (2.12). В данной работе были рассмотрены две модели: первая - без учета перемещения вибратора (для малых амплитуд) и вторая - с учетом перемещения вибратора или части границы расчетной области (для больших амплитуд) с перестройкой расчетной сетки.

В данной работе приведены результаты исследования задач для различных методов выращивания монокристаллов Бриджмена,

Чохральского и плавающей зоны. При моделировании использовались пять различных комплексов программ: конечно-разностный пакет с отдельным решением уравнений Навье-Стокса [24, 25] и программный комплекс МАРЕНА с полностью неявным методом (с внутренними итерациями по Ньютону) и совместным матричным решением уравнений [26] (написанные А.И. Федюшкиным), конечно-элементный пакет программ ASTRA [27] (разработанный проф. Н.Г. Бураго), контрольно-объемный пакет ANSYS-Fluent 14 и 15 версий [28] и 2D система гидродинамических алгоритмов основанных на методе контрольного объема и расщепления по физическим процессам [29], [30], реализованная К.А. Ивановым.

3. Метод Бриджмена

Было подготовлены расчетные модели и проведено математическое моделирование теплообмена при выращивании кристаллов методом Бриджмена (фронт кристаллизации находится внизу – устойчивая температурная конфигурация) с различными формами и расположениями погруженного вибратора, схемы которых представлены на рис. 3.1. Для расплава NaNO_3 ($Pr=5.43$) были проведены численные расчеты с и без вибраций. Исследование влияния расположения и формы вибраторов на теплоперенос моделировалось на основе двумерной осесимметричной модели. На фронте кристаллизации ставилось условие Стефана. Моделирование было проведено, как с учетом изменения формы фронта кристаллизации, так и для фиксированного плоского фронта кристаллизации.

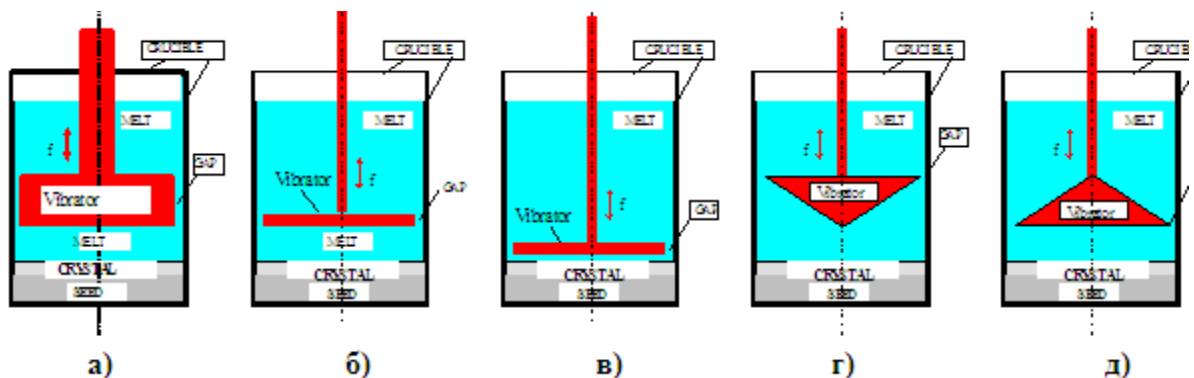


Рис. 3.1. Расположение и форма погруженного вибратора в модели вертикального метода Бриджмена

3.1. Постановка задачи

Для схемы расположения вибратора, изображенной на рис.3.1а, с помощью конечноэлементного программного комплекса АСТРА [27] были выполнены расчеты с целью определения времени формирования установившегося осредненного течения [18-20]. Также было исследовано

влияние формы и расположения вибратора (рис.3б-д) на тепло массоперенос [23]. В п. 3 представлены результаты численных расчетов, выполненных для расплава NaNO_3 ($Pr=5.43$) при гармонических колебаниях вибратора со следующими параметрами: амплитуда $A=100 \mu\text{m}$ либо $A=400 \mu\text{m}$, частота $f=50 \text{ Hz}$, радиус ампулы $R=1 \text{ cm}$ и ее высота $H=3.2 \text{ cm}$, для случая отсутствия силы тяжести ($g/g_0=0$). Результаты показали, что в процессе гармонических колебаний формируется осредненное течение, которое к 15-20 секунде принимает квази-стационарный характер. Проводился расчет полных уравнений Навье-Стокса (2.1)-(2.13) и затем полученные значения в каждый момент времени осреднялись на большом промежутке времени, исключая влияние переходного начального участка развития течения. Зависимость функции тока осредненного по времени течения от времени и ее изолинии функции тока показаны на рис. 3.2.

3.2. Результаты численного моделирования

Исследование влияния вибраций на гидродинамику и теплоперенос на основе решения не осредненных уравнений Навье-Стокса осложнено большими временными затратами, так как, с одной стороны, необходимо хорошо разрешить решение на каждом периоде колебаний, что накладывает ограничения на шаг по времени и, с другой стороны, осреднение и анализ решения необходимо проводить на установившемся участке решения. Следует отметить, что значения скорости, температуры и концентрации в общем случае, т.е. при не равенстве коэффициентов диффузии тепла и массы ($Pr \neq Sc \neq 1$) достигают квазиустановившихся режимов при разных временах.

3.2.1. Влияние вибраций на пограничные слои

На рис. 3.2а показано установление осредненного течения при мгновенном включении вибратора с нулевых начальных скоростей.

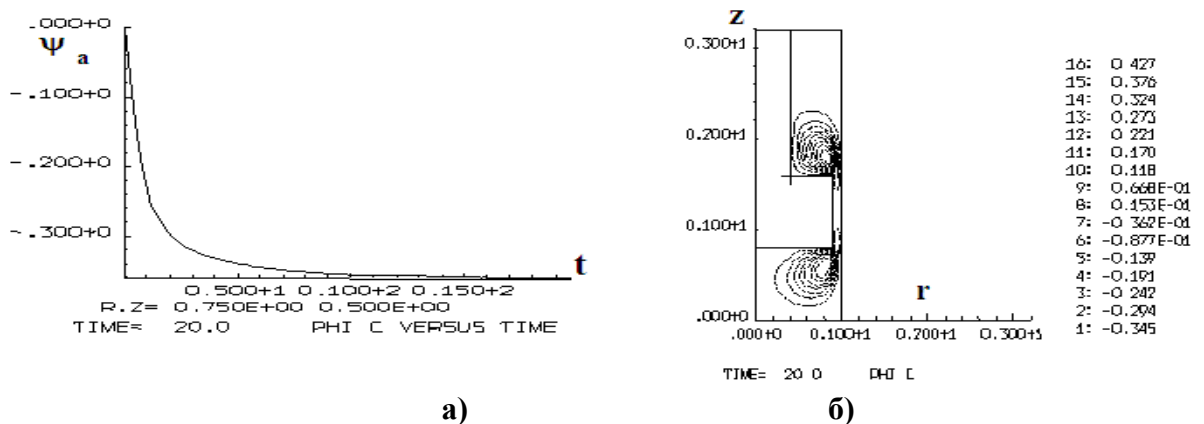


Рис. 3.2 Осредненное вибрационное течение:

- а) изменение функции тока в точке ($r=0.75\text{см}$, $z=2.5\text{см}$) от времени,
 б) изолинии функции тока в момент времени $t=20$ сек.

Для метода Бриджмена, для указанных выше параметров, также были проведены численные расчеты с учетом конвекции, которые показали, что вклад вибраций при вибрационном числе Рейнольдса $Re_{vibr} = A\omega R/\nu > 10$, (где $\omega = 2\pi f$, а ν - кинематическая вязкость) в гидродинамику и распределение температуры является преобладающим по сравнению с конвекцией ($Ra = 2 \cdot 10^5$, $Pr = 5.43$). Таким образом, с помощью вибрационного воздействия можно существенно изменять температурное поле в расплаве.

Численные расчеты показали, что с помощью вибрационного воздействия можно уменьшить температурный пограничный слой (увеличить градиент) около фронта кристаллизации, а это открывает

возможности управлять кинетикой роста кристаллов, в частности, скоростью роста, как это впервые было установлено в экспериментах [9]. На рис. 3.3 показаны изотермы в расплаве NaNO_3 ($Pr=5.43$) (в правой части тигля – без вибраций, в левой - с вибрациями $Re_{vibr}=200$). Результаты на рис. 3.3 показаны для вибратора, изображенного на рис. 3.1б, но подобные расчеты были также проведены и для всех других конфигураций вибраторов и их расположения, изображенных на рис.3а, и рис.3в-д.

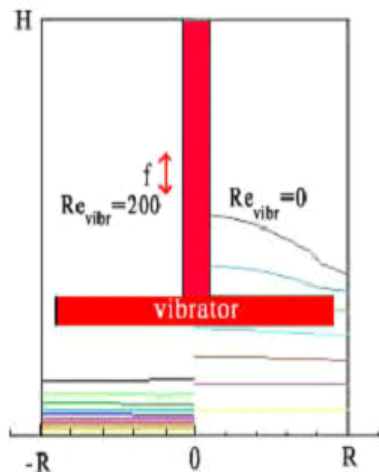


Рис 3.3. Изотермы в расплаве NaNO_3 ($Pr=5.43$) (справа – без вибраций, слева - с вибрациями $Re_{vibr}=200$)

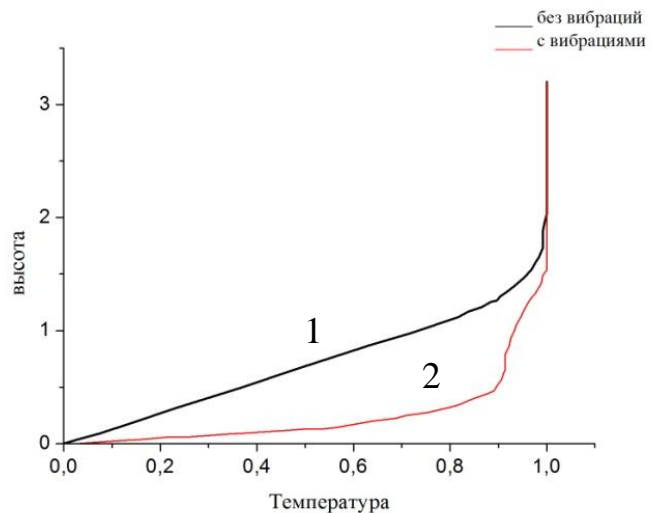


Рис. 3.4. Вертикальные профили температуры ($r=0.75$) в расплаве NaNO_3 ($Pr=5.43$) (линия 1 – без вибраций, 2 - с вибрациями $Re_{vibr}=200$)

3.2.2. Влияние вибраций на распределение примеси в кристалле

Были проведены численные расчеты для метода Бриджмена с вибраторами, изображенными на рис. 3.1в-д, с целью выявления влияния формы и расположения вибратора на распределение примеси в кристалле.

Распределение примеси в кристалле рассчитывалось из величины примеси на фронте кристаллизации со стороны расплава и условия вхождения примеси в кристалл (2.8а). Решалась нестационарная задача и, таким образом, имея историю концентрации в расплаве в каждый момент времени мы получали по прошествии некоторого времени распределение (историю) примеси в кристалле.

На рис. 3.5 для условий невесомости ($g=0$) представлены функция тока осредненного по времени течения (слева) и распределение примеси в кристалле (справа) для двух случаев: на рис. 3.5а) - без вибраций $Re_{vibr}=0$, на рис. 3.5б) с вибрациями клиновидного вибратора с $Re_{vibr}=200$ ($Gr = 0$, $Pr = 5.43$, $Sc = 50$). (где $Gr=g\beta\Delta TR^3/\nu^2$ - число Грасгофа, $Sc=\nu/D$ – число Шмидта, D – коэффициент диффузии),

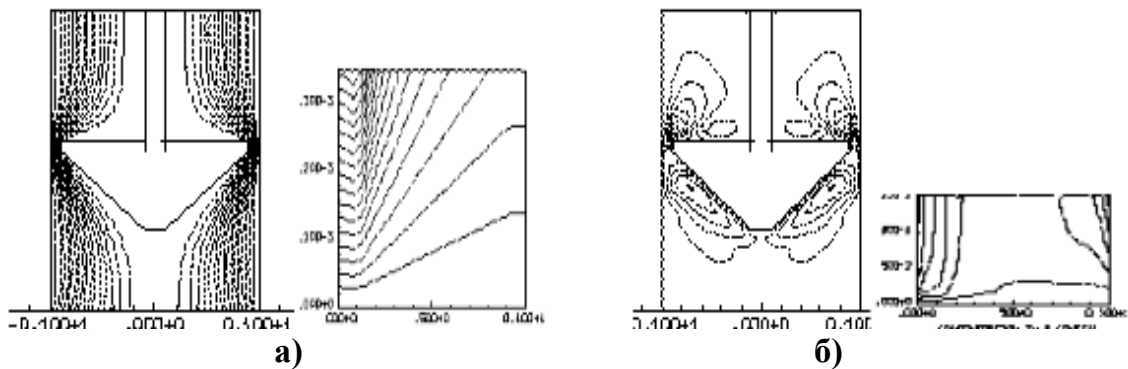


Рис.3.5 Функция тока осредненного по времени течения (слева) и распределение примеси в кристалле (справа), а)-без вибраций $Re_{vibr}=0$, б) с вибрациями $Re_{vibr}=200$ ($Gr = 0$, $Pr = 5.43$, $Sc = 50$)

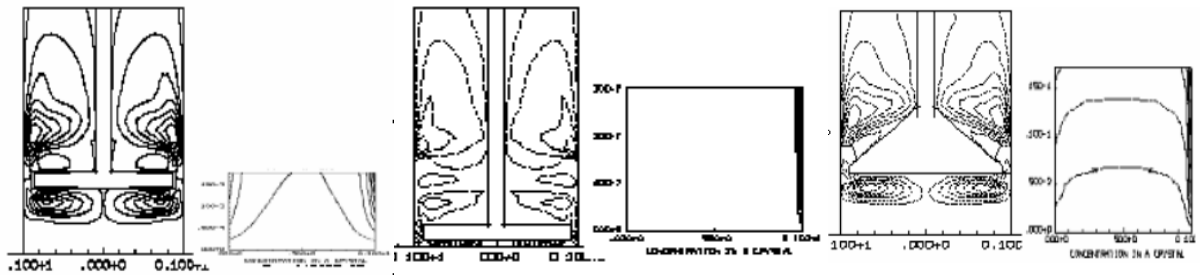


Рис. 3.6 Функция тока осредненного по времени течения (слева) и распределение примеси в кристалле (справа), с вибрациями $Re_{vibr}=200$ и естественной конвекцией ($Gr = 2 \cdot 10^6$, $Pr = 5.43$, $Sc = 50$) для разных положений и форм вибратора.

Для $Gr = 0$, $Pr = 5.43$, $Sc = 50$ (где $Gr = g\beta\Delta TR^3/\nu^2$ - число Грасгофа, $Sc = \nu/D$ - число Шмидта, D - коэффициент диффузии), на рис. 3.5 (для вибратора, как на рис. 3.1г) показано влияние вибраций на осредненное течение расплава и распределение примеси в кристалле, а на рис. 3.6 показано (для вибраторов, изображенных на рис. 3.1б, 3.1в и 3.1д) показано влияние формы вибратора на течение расплава и распределение примеси в кристалле. Результаты наглядно показывают значительное влияние расположения и формы вибратора на распределение примеси в кристалле.

3.2.3. Влияние вибраций на форму фронта кристаллизации

При исследовании влияния вибраций на форму фронта кристаллизации используется энтальпийная модель для решения задачи Стефана. Наличие в расплаве МЗ (около фронта кристаллизации) моделируется введением в этой области пористой среды. Для этого в МЗ учитывается сила сопротивления движению расплава со стороны пористой среды, которая на основе закона Дарси- Буссинеска:

$$\text{grad } P = -\frac{\mu}{K} \mathbf{u}, \quad (3.1)$$

можно записать в виде

$$\mathbf{F} = A_0 \mathbf{u}, \quad (3.2)$$

(где K – проницаемость пористой среды). Для учета *mushy zone* в виде пористой среды в уравнения переноса импульса (2.2)-(2.4) в правую часть добавляется сопротивление в виде источникового члена \mathbf{F} (3.2). Величина A_0 обратно пропорционально зависит от проницаемости среды, вязкости и морфологии пористого тела. A_0 определяется размером *mushy* зоны, пористостью и структурой (дисперсной, псевдожидкой, дендритной, с подвижными или неподвижными твердыми включениями). Чем больше значение A_0 , тем сильнее становится демпфирование расплава в MZ, и тем быстрее скорость падает до нуля, когда материал затвердеет, а при A_0 скорости расплава максимальны вследствие отсутствия сопротивления конвективному движению со стороны твердого скелета.

Используя закон Дарси (3.1) и для проницаемости закон Козени-Кармана, силу сопротивления (3.2) в уравнениях (2.2)-(2.4) можно записать через объемную долю жидкой фракции:

$$\mathbf{F} = \frac{(1-\alpha)^2}{\alpha^3} A_{mushy} \mathbf{u}, \quad (3.3)$$

где величина A_{mushy} обратно пропорционально проницаемости среды и зависит от вязкости и в общем случае от структуры пористого тела. Более подробную информацию о методике учета *mushy zone* можно найти в работе [15]. При решении задачи Стефана с выделением фронта кристаллизации и заданием на нем условия Стефана (2.8b) *mushy zone* не учитывалась (код ASTRA), а с учетом *mushy zone* коэффициент A_{mushy} задавался равным 10^5 . (код ANSYS-Fluent 14).

При решении задачи о затвердевании льда плотность воды зависела от температуры и учитывалась инверсия плотности воды при 4°C .

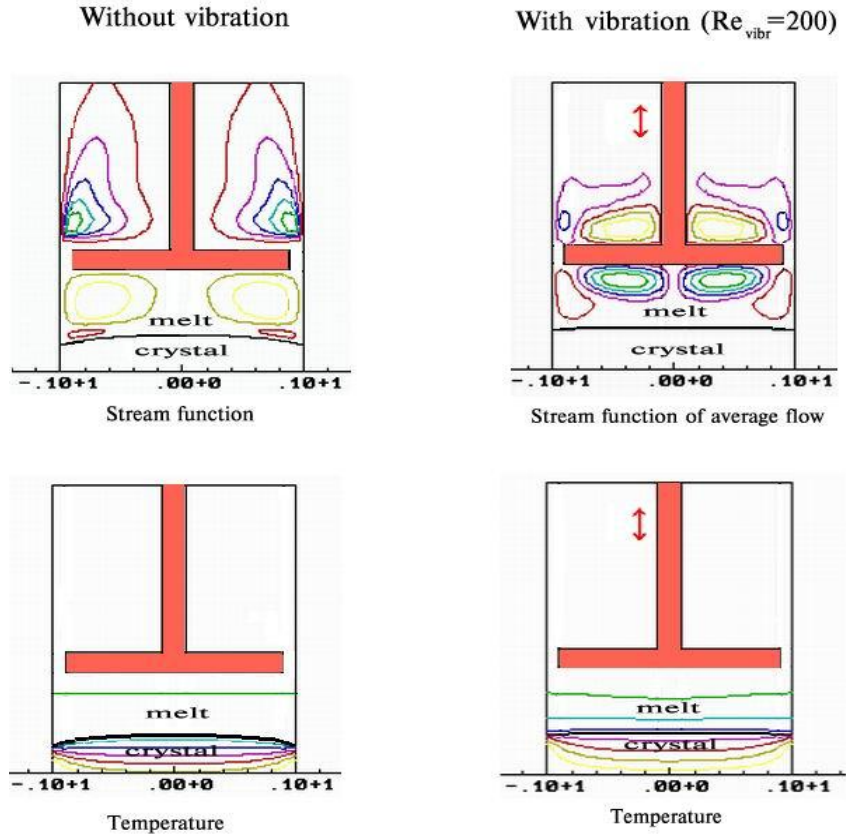


Рис. 3.7 Влияние вибраций на форму фронта кристаллизации при моделировании в программе АСТРА.

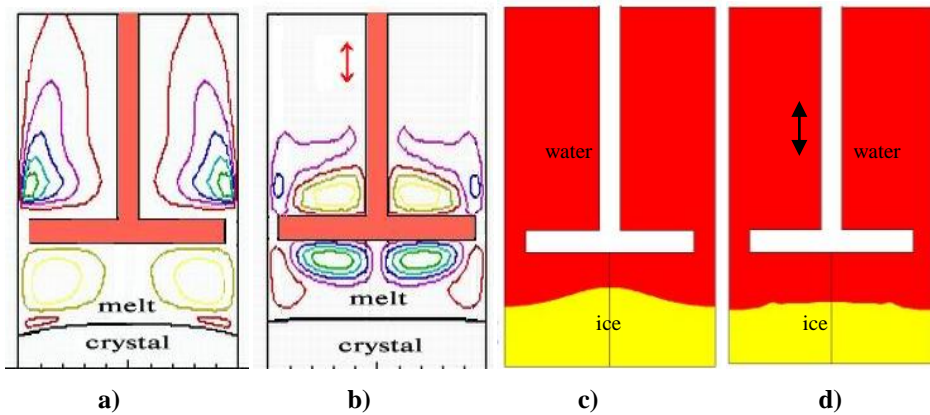


Рис 3.8: а), б) – функция тока (NaNO_3), (а) - $f=0$, б) - $A=0.1\text{mm}$, $f=50\text{Hz}$), в), г) – граница раздела фаз вода-лёд в) – без вибраций $f=0$, г) – с вибрациями, $A=0.1\text{mm}$, $f=30\text{Hz}$)

3.3. Выводы по моделированию метода Бриджмена

Показана структура и время установления осредненного вибрационного течения.

Показано уменьшение пограничных слоев при вибрационном воздействии в методе Бриджмена, что может быть следствием увеличения скорости роста кристаллов.

Результаты математического моделирования показали влияние вибраций на форму фронта кристаллов. Вибрационным воздействием возможно получить более плоский фронт кристаллизации.

Показано существенное влияние расположения и формы вибратора на распределение примеси не только в расплаве, но и в кристалле, которые необходимо учитывать при определении оптимальных вибрационных режимов для получения совершенных кристаллов.

4. Метод Чохральского

В методе Чохральского тепловая конфигурация соответствует неустойчивому распределению температуры: холодный фронт кристаллизации расположен над расплавом. В данной работе предполагается, что кристалл совершает колебательные движения с малой амплитудой $A=100 \mu\text{m}$ либо $A=400 \mu\text{m}$ и частотой f по закону $y = A \cdot \cos(2\pi ft)$. В реальных условиях кроме вибрационной конвекции существует вращение, интенсивное конвективное перемешивание расплава за счет бокового и донного подогрева расплава и за счет термокапиллярной конвекции. Исследованию этих типов течений в методе Чохральского посвящено много работ, однако вибрационным воздействиям начали уделять активное внимание только в последнее десяти-пятнадцать лет [3-24].

4.1. Естественная конвекция при выращивании монокристаллов методом Чохральского

4.1.1. Осесимметричная математическая модель.

На рис. 4.1 показана схема двумерной осесимметричной математической модели метода Чохральского. Система уравнений, граничные и начальные условия описаны в п.2 (2.1-2.13). На рис.4.1 представлены изотермы при термокапиллярной конвекции (число Марангони $Ma=500$, $Pr=5.43$, $H/R=1$, $R_c/R=0.3$, $A=100 \mu\text{m}$) при условии теплоизоляции на свободной поверхности). Слева на рис.4.1 показан случай с вибрациями ($Re_{vibr}=200$), справа – без вибраций ($Re_{vibr}=0$), В данной работе приводятся результаты численного моделирования

конвективного теплообмена в методе Чохральского включая тепловую (п.4.1), термокапиллярную (п.4.2) и вынужденную конвекцию при вибрационном воздействии на расплав как со стороны кристалла (рис. 4.1), так и со стороны погруженного в расплав вибратора (п. 4.3). Данные результаты показывают преобладание вибрационной конвекции над термокапиллярной и естественной, а также хороший эффект гомогенизации температурного поля во всем расплаве за счет вибраций.

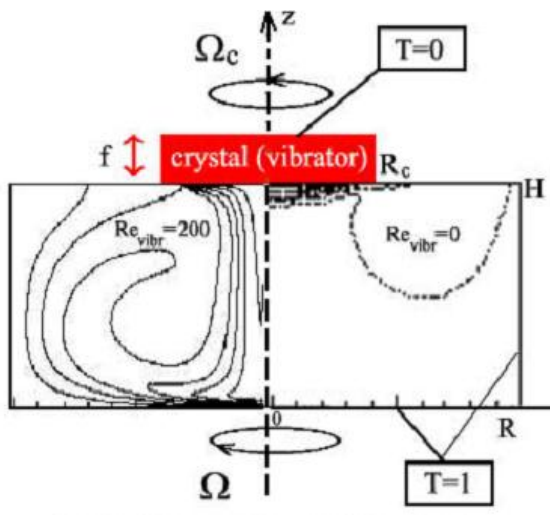


Рис. 4.1. Изотермы в двумерной осесимметричной модели метода Чохральского ($Ma=500$, $Pr=5.43$, $H/R=1$, $R_c/R=0.3$) (слева – с вибрациями ($Re_{vibr}=200$), справа – без вибраций ($Re_{vibr}=0$))

4.1.2. Плоская 2D математическая модель.

Рассматривается двумерная модель выращивания кристаллов методом Чохральского в условиях присутствия естественной конвекции. На рис. 4.2 показана исследуемая область. Размер области: 3×3 см. Диаметр кристалла (отмечен цифрой 1) составляет 1 см. Область заполнена водой $Pr = 7$.

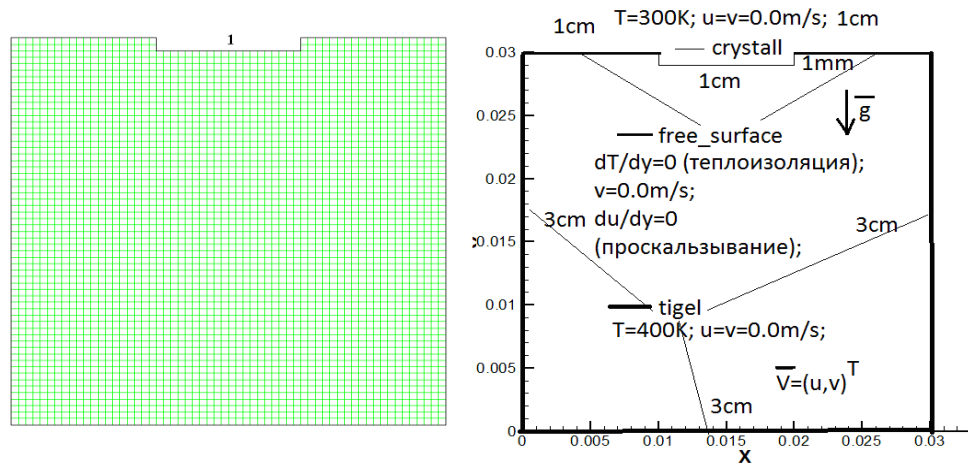


Рис. 4.2 Расчётная сетка и система граничных условий.

При решении задачи используется система уравнений Навье-Стокса в приближении Буссинеска:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + (\mathbf{V} \nabla) \mathbf{V} &= -\frac{\nabla P}{\rho} + \nu \Delta \mathbf{V} + \beta T \mathbf{g} \\ \operatorname{div} \mathbf{V} &= 0 \\ \frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{V} \nabla) T &= a \Delta T \end{aligned} \quad (4.1)$$

где \mathbf{V} – вектор скорости; P – давление; ρ – плотность; T – температура; \mathbf{g} – ускорение свободного падения; a , ν – коэффициенты температуропроводности и кинематической вязкости; β – коэффициент линейного температурного расширения. Для скорости на всех границах ставится условие прилипания: $\mathbf{V} = 0$, т.к. стенки неподвижны.

Для температуры ставятся такие условия: тигель (расположенный снизу) горячий и имеет постоянную температуру в 400К, кристалл (расположенный сверху) холодный и имеет температуру в 300К. На

стенке соединяющей кристалл с тиглем справедливы условия теплоизоляции $\frac{\partial T}{\partial y} = \frac{\partial T}{\partial n} = 0$, где n внешняя нормаль.

В качестве начальных условий задаётся неподвижная жидкость с температурой в 300К.

Данная задача определяется следующими безразмерными числами Прандтля (Pr), Грасгофа (Gr) или Рэлея (Ra). Данные параметры определяются следующими безразмерными комплексами: $Gr = g\beta\Delta T H^3 / \nu^2$, $Pr = \nu / a$, $Ra = Gr \cdot Pr$ – числа Грасгофа, Прандтля, Рэлея.

В данной работе задача решалась в размерных естественных переменных скорость-давление-температура (4.1), но для моделирования конвективных задач часто используют безразмерную запись данных уравнений, в которую и входят данные безразмерные параметры (числа Прандтля и Грасгофа). Иногда удобно использовать систему уравнений Навье-Стокса, записанную в переменных вихрь-функция тока-температура, так как из нее исключается давление. Но в данном случае сложности от вычисления давления переходят в сложности задания граничных условий для завихренности на твердой стенке [24, 33]. Ниже приведена данная запись уравнений:

$$\begin{aligned}
 \omega_t + \psi_y \omega_x - \psi_x \omega_y &= \omega_{xx} + \omega_{yy} + F, \\
 \psi_{xx} + \psi_{yy} &= -\omega, \\
 \theta_t + \psi_y \theta_x - \psi_x \theta_y &= Pr^{-1}(\theta_{xx} + \theta_{yy}), \\
 F &= Gr \theta_x,
 \end{aligned}
 \tag{4.2}$$

где ω - вихрь; ψ - функция тока; θ - безразмерная температура; $u = \psi_y$,
 $v = -\psi_x$ - проекции вектора скорости на оси координат x , y соответственно.

4.1.3. Метод расчёта

Расчёты проводились с помощью двух программ. Во первых с помощью гидродинамической программы FLUENT 14 на равномерной сетке с шириной ячейки 0.5 мм. А во вторых с помощью двумерного варианта программы автора [29, 30]. Модель течения жидкости ламинарная. Модель вычисления стационарная. Ускорение свободного падения направлено вниз навстречу оси ординат.

Немного про алгоритм, реализованный в 2D программе [29, 30]. Интерфейс программы [29, 30] написан на Delphi 7, а ядро солвера на языке C с добавлением OpenMP директив. Соединение ядра и интерфейса организованоследующими способами: 1 - либо через взаимодействие exe файлов, то есть вычисление запускается в отдельном потоке и сообщает интерфейсу о ходе расчёта через файловый обмен данными; 2 -: либо через механизм dll библиотек.

В 2D [29, 30] используются метод контрольного объёма и шахматные сетки (С. Патанкар [32]) :

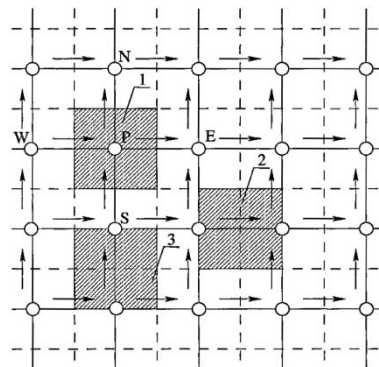


Рис 4.3 – Контрольные объемы (1 – контрольный объем переменных $P, T, C, \delta P$; 2 – контрольный объем для горизонтальной скорости; 3 – контрольный объем для вертикальной скорости v)

Шахматные сетки позволяют решать систему уравнений Навье-Стокса в естественных переменных избегая шахматных осцилляций поля давления и скорости не используя введение поправки Рхи-Чоу (1983). Ограничение шахматных сеток состоит в невозможности применить их для криволинейных и треугольных сеток. Т.е. в условиях реалистичной инженерной геометрии.

Система уравнений Навье-Стокса записывается иначе, нежели чем в (4.1) или (4.2). А именно на основе уравнения неразрывности $div V = 0$ и уравнений сохранения импульса получается уравнение для так называемой поправки давления δP . В итоге система уравнений принимает вид (4.3)

$$\begin{aligned} \frac{\partial V}{\partial t} + (V \nabla) \cdot V &= -\frac{\nabla P}{\rho} + \nu \Delta V + \beta T g \\ \nabla(\tau \nabla \delta P) &= div(\rho V) \\ \frac{\partial T}{\partial t} + V \nabla T &= a \Delta T \end{aligned} \tag{4.3}$$

Здесь τ - псевдо-временной схемный параметр, который зависит от течения в данном контрольном объёме и имеет пространственное распределение.

Вычисления проводятся с помощью методики расщепления по физическим процессам с помощью следующего алгоритма SIMPLE, описанного в Приложении 1:

Сборка матрицы для уравнения конвективно-диффузионного переноса описана в статье И. Сезая [31]. В работе [31] также описан алгоритм, используемый в ANSYS Fluent.

Программа решает системы алгебраических уравнений с помощью метода Якоби, а во Fluent для этих целей используется алгебраический многосеточный метод (AMG) [34-35].

Конечно-разностные и конечно-элементные методы решения уравнений Навье-Стокса и примеры решения задач конвекции описаны в монографиях [24,33].

4.1.4. Результаты математического моделирования.

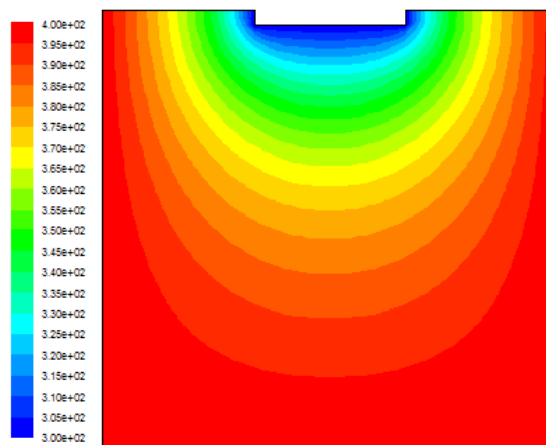


Рис. 4.4. Поле температур без конвекции ($Ra=0$).

Теплопроводностный режим, движение жидкости отсутствует.

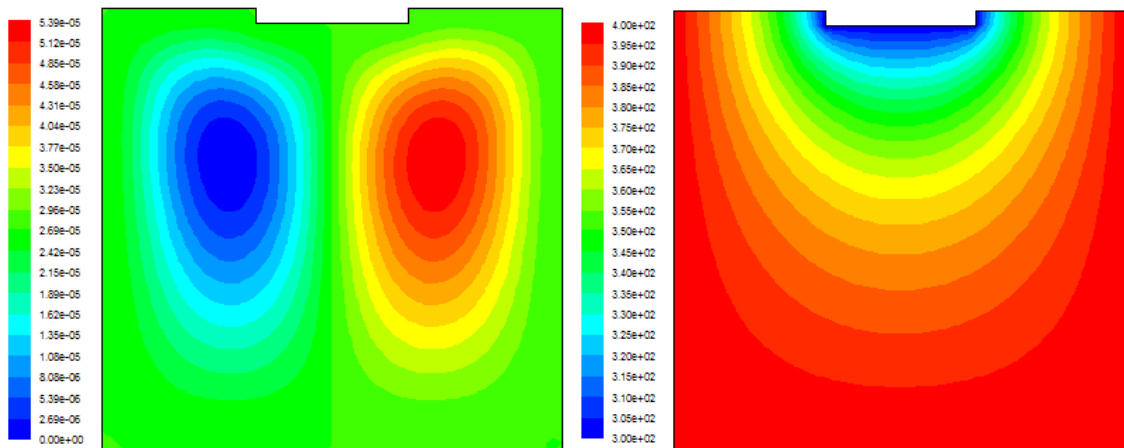


Рис. 4.5. Функция тока слева и поле температур справа при $Ra = 10^3$.

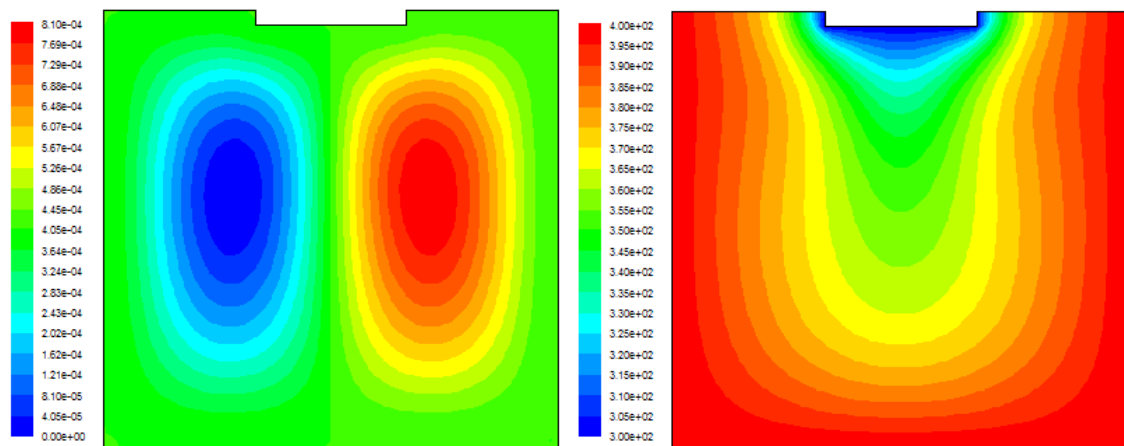


Рис. 4.6. Функция тока слева и поле температур справа при $Ra = 10^4$.

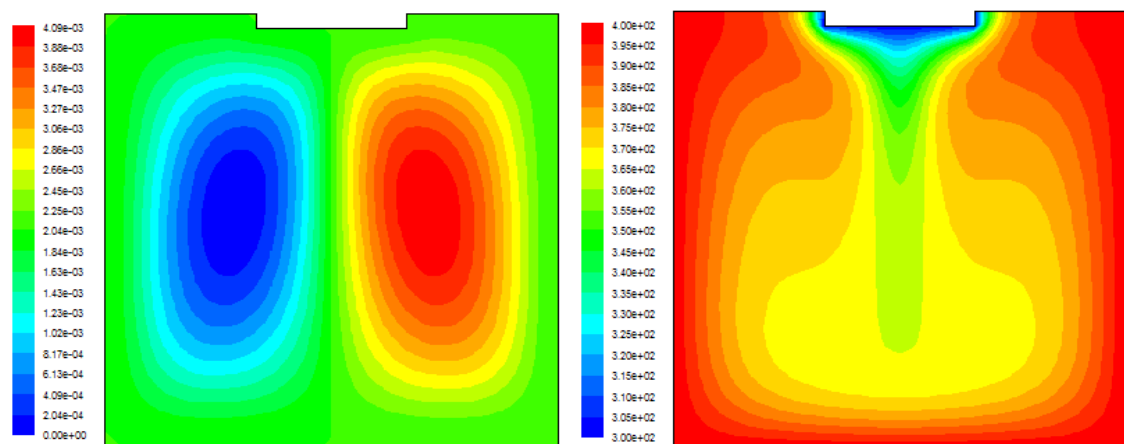


Рис. 4.7. Функция тока слева и поле температур справа при $Ra = 10^5$.

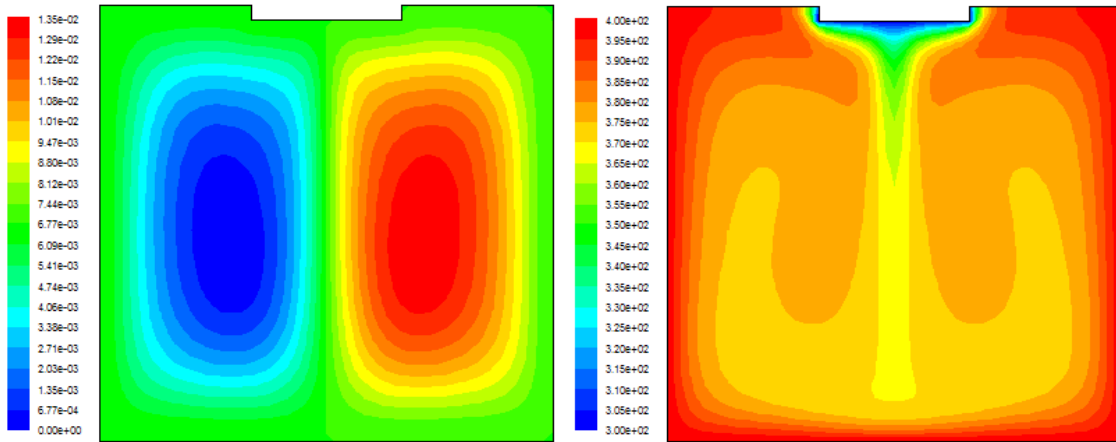


Рис. 4.8. Функция тока слева и поле температур справа при $Ra = 10^6$.

Изменение производной от температуры (К) по вертикальной оси y (м) в зависимости от числа Ra

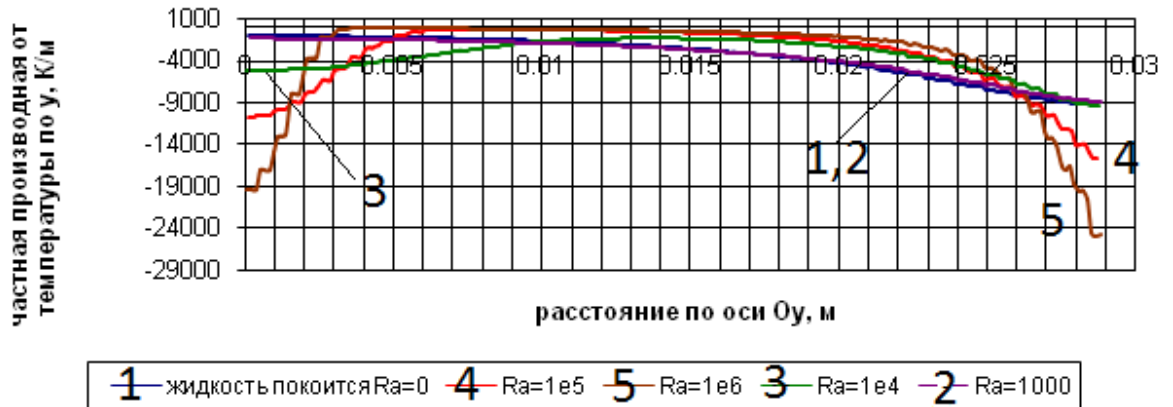


Рис. 4.9. Качественное изменение теплового потока на фронте кристаллизации в зависимости от числа Ra . Фронт кристаллизации находится при $y=2.9$ см. Тепловой поток есть $\lambda \cdot (\partial T / \partial y)$, где λ теплопроводность Вт/(м*К), а $\partial T / \partial y$ – частная производная от Температуры по нормали к фронту кристаллизации (ось y направлена вглубь затравки).

В таблице 4.1 представлена зависимость числа Рейнольдса, вычисленного по максимальной скорости от числа Рэлея.

Таблица 4.1

Ra	10^3	10^4	10^5	10^6
Re	0.184	3.016	17.436	66.58

Число Рейнольдса, определённое по максимальной скорости, невелико и течение ламинарное. Результаты расчёта иллюстрируются на рис. 4.4-4.9. Они показывают, что с увеличением числа Релея (преобладание сил тяжести вызванных градиентом температуры к силам вязкого трения) холодный около затравочный фронт всё глубже погружается внутрь тигля. Из рис. 4.9 видно, что с увеличением числа Релея увеличивается по модулю тепловой поток на фронте кристаллизации, изменения температуры становятся более резкими, а значит толщина около затравочного температурного пограничного слоя уменьшается. Расплав движется в двух взаимно согласованных водоворотах (по часовой стрелке слева от затравки и против часовой стрелки справа от затравки, под кристаллом холодный расплав течет вниз под действием силы тяжести), при этом в центральной части под кристаллом оба вихря имеют согласованные направления и поэтому в этой области наблюдается максимум скорости. Модуль скорости с увеличением числа Рэлея возрастает и подъемно-опускное течение расплава становится более интенсивным, и при дальнейшем увеличении числа Рэлея течение может стать несимметричным и нестационарным.

4.2. Конвекция Марангони при выращивании монокристаллов методом Чохральского

4.2.1. Постановка задачи и математическая модель.

Рассматривается двумерная модель выращивания кристаллов методом Чохральского в условиях невесомости ($\mathbf{g}=0$) при наличии термокапиллярной конвекции, Термокапиллярную конвекцию часто называют конвекцией Марангони в честь Карло Марангони (1865год), подробно исследовавшим в своей диссертации явление движения жидкости за счет поверхностных сил, открытое в 1855 году Джеймсом Томсоном. Конвекция Марангони или термокапиллярная конвекция – это движение жидкости вдоль границы раздела сред под действием силы поверхностного натяжения, результирующее направление которой определяется градиентом температуры на свободной поверхности, а именно неодинаковостью поверхностного натяжения при разных температурах. На рис. 4.2 слева показана исследуемая область размерами $3 \times 3 \text{ см}^2$. Диаметр выращиваемого кристалла (отмечен цифрой 1) составляет 1см. Область заполнена жидкостью с числом Прандтля $Pr = \frac{\mu \cdot c_p}{\lambda}$ равным 7.

При решении задачи используется система уравнений Навье-Стокса 4.1, в которой отсутствует сила тяжести ($\mathbf{g}=0$).

Пусть компоненты вектора скорости \vec{V} имеют компоненты : u – горизонтальная скорость, v – вертикальная компонента скорости в декартовой прямоугольной системе координат на плоскости. Тогда, для скорости на поверхности тигля и на границе кристалла ставится условие прилипания к покоящейся стенке : $u=0, v=0$ – обе компоненты скорости

нулевые. Сверху, между боковой стенкой тигля и затравкой кристалла, на горизонтальной свободной поверхности задано условие Марангони (зависимость касательного напряжения сдвига τ от градиента поверхностного натяжения σ):

$$\tau = \frac{d\sigma}{dT} \nabla_{\tau} T \quad \text{или} \quad \mu \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{d\sigma}{dT} \cdot \frac{\partial T}{\partial x}, \quad v=0.$$

где $\nabla_{\tau} T$ - проекция градиента температуры на касательную к свободной поверхности, u – горизонтальная компонента скорости на горизонтальной свободной поверхности раздела сред.

Для температуры ставятся такие условия: тигель горячий и имеет постоянную температуру в 400К, кристалл холодный и имеет температуру в 300К. Горизонтальная стенка соединяющая кристалл с тиглем теплоизолирована $\frac{\partial T}{\partial y} = 0$.

В качестве начальных условий задаётся неподвижная жидкость с постоянной температурой в 300К.

Данная задача характеризуется безразмерными числами Прандтля (Pr) и Марангони $Ma = (-d\sigma/dT) \cdot ((\rho c_p \Delta T H) / (\mu \lambda))$.

4.2.2. .Метод расчёта.

Модель течения жидкости ламинарная. Модель вычисления стационарная. Коэффициент поверхностного натяжения взят постоянным и отрицательным так, чтобы направление течения жидкости было таким-же, как и при векторе силы тяжести \mathbf{g} , направленном вниз. Расчеты производились в программах Fluent и 2D программе [29, 30].

4.2.3. Результаты математического моделирования.

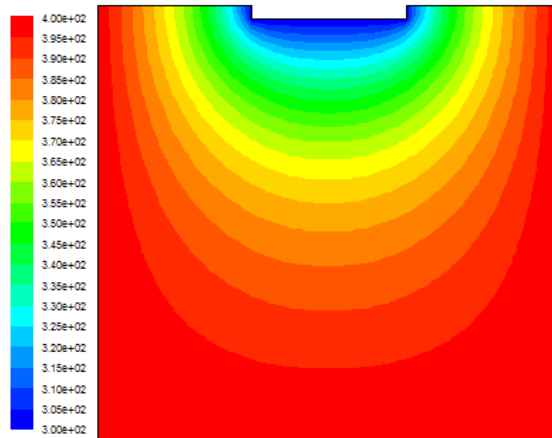


Рис. 4.10. Поле температур при отсутствии конвекции Марангони.
(Теплопроводностный режим - движение жидкости отсутствует).

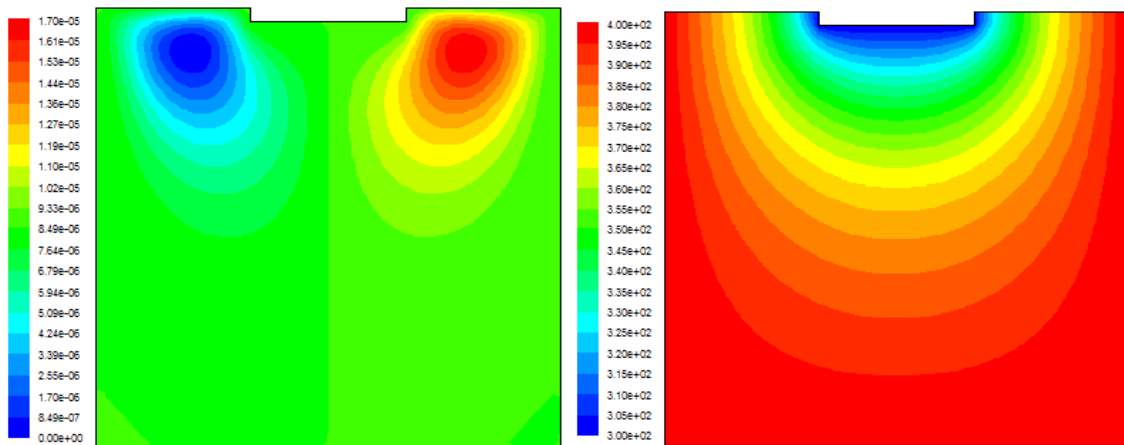


Рис. 4.11. Функция тока слева и поле температур справа при $Ma = 10$.

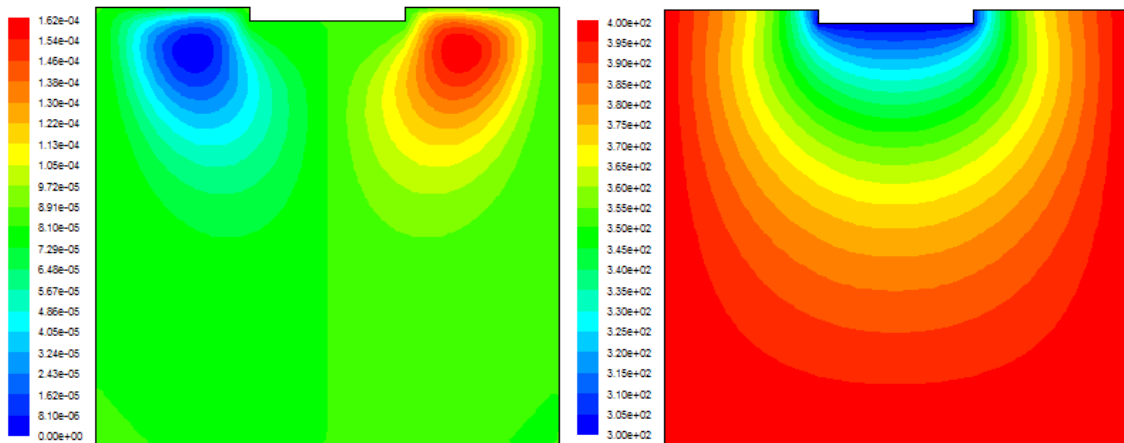


Рис. 4.12. Функция тока слева и поле температур справа при $Ma = 100$.

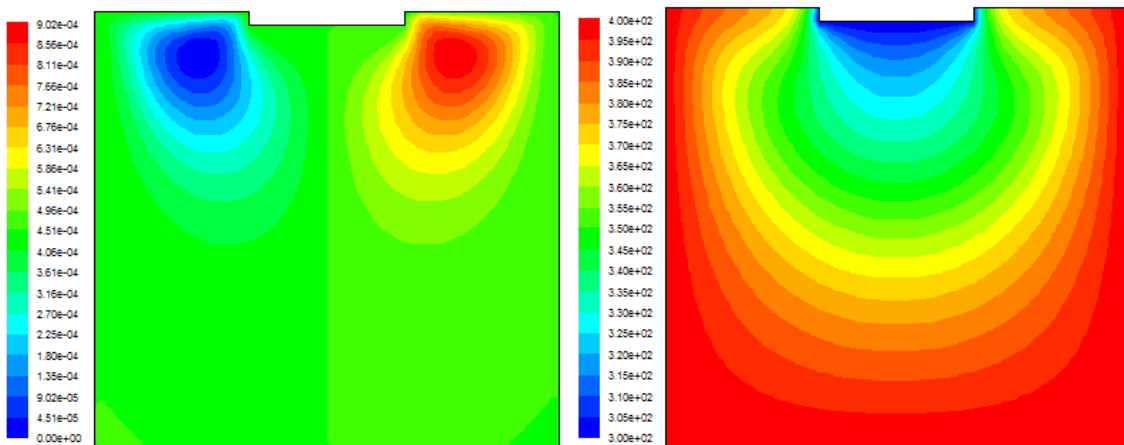


Рис. 4.13. Функция тока слева и поле температур справа при $Ma = 10^3$.

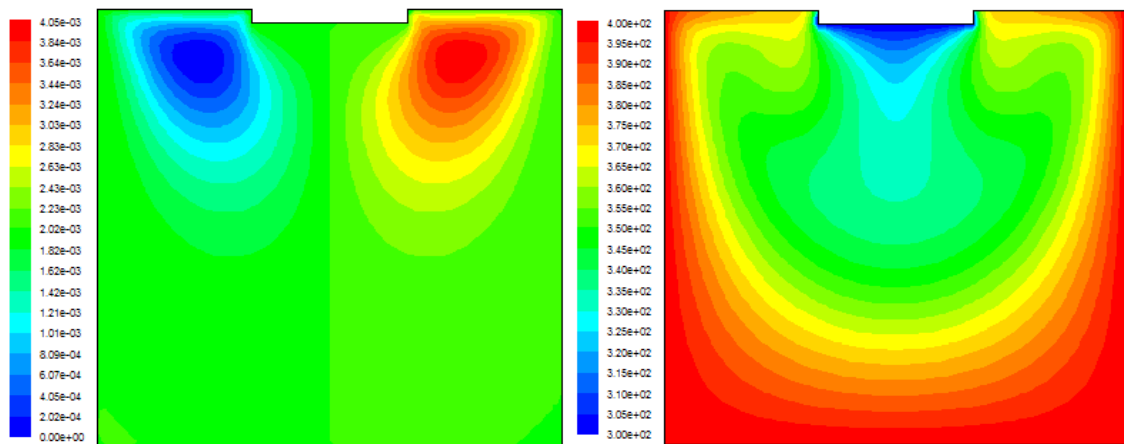


Рис 4.14. Функция тока слева и поле температур справа при $Ma = 10^4$.

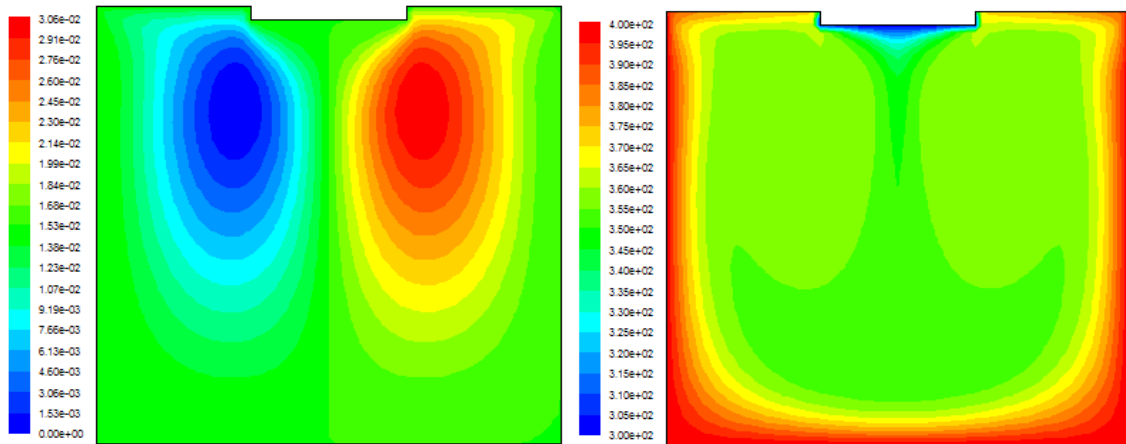


Рис. 4.15. Функция тока слева и поле температур справа при $Ma = 10^5$.

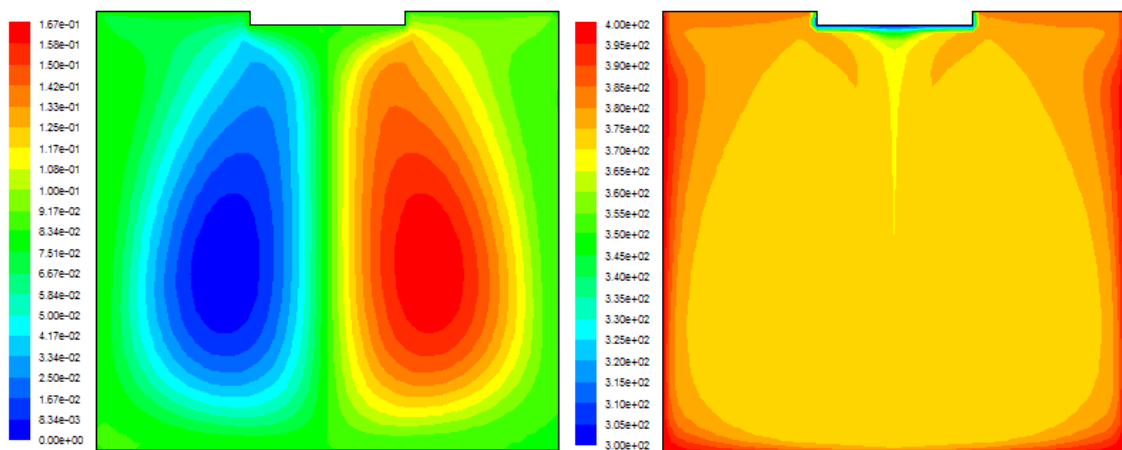
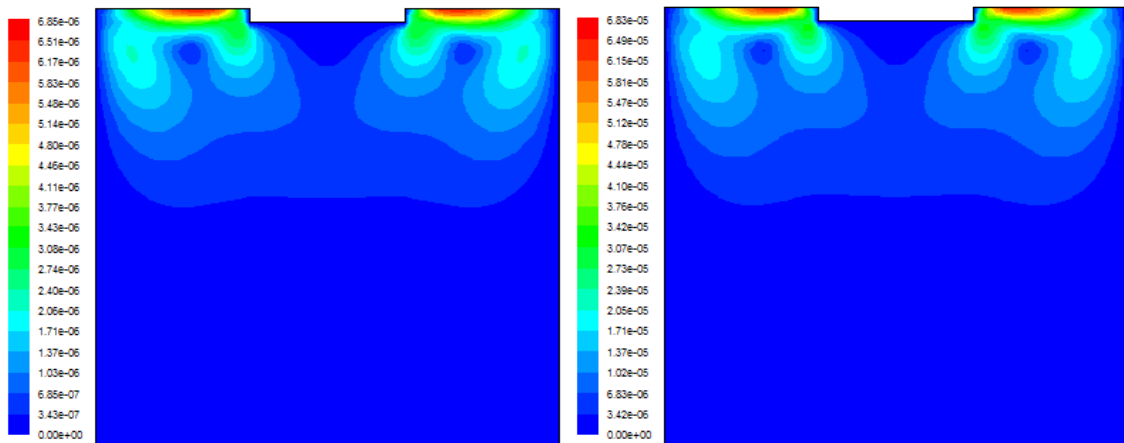
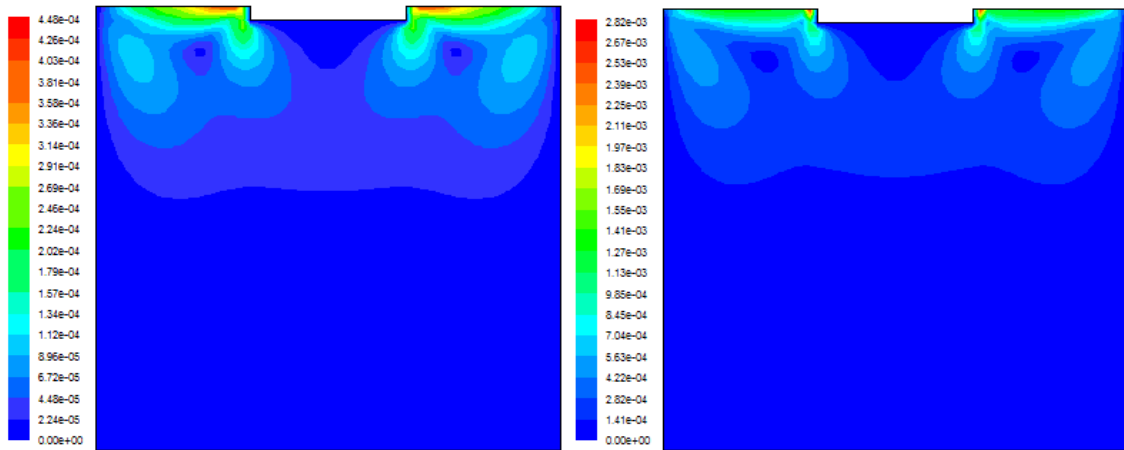


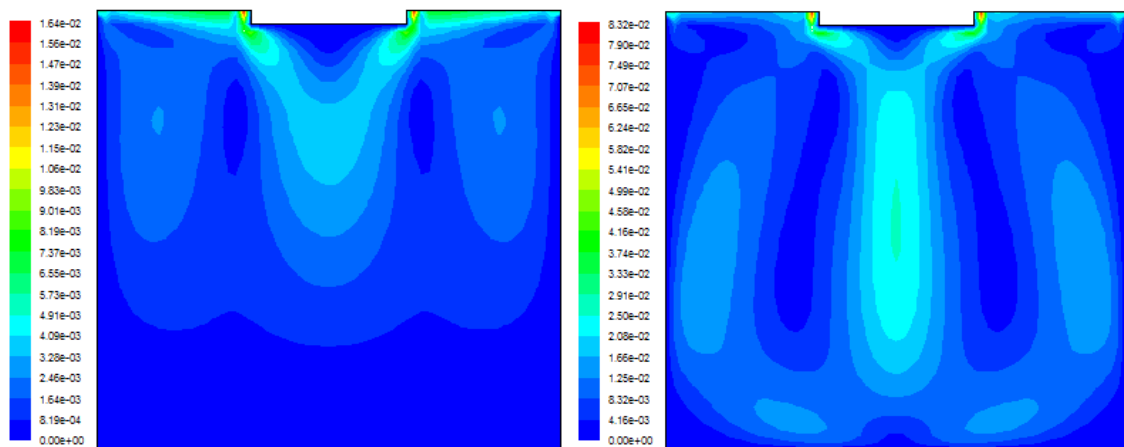
Рис. 4.16. Функция тока слева и поле температур справа при $Ma = 10^6$.



$Ma = 10 \quad Ma = 100$



$Ma = 10^3 \quad Ma = 10^4$



$Ma = 10^5 \quad Ma = 10^6$

Рис 4.17. Магнитуда скорости при различных числах Марангони.

Рис. 4.18. Изменение числа Нуссельта $\lambda \cdot \partial T / \partial y$ на вертикальной линии симметрии в зависимости от числа Марангони. Кристалл расположен при $y=2.9$ см.

Таблица 4.2 позволяет сравнить ANSYS Fluent и 2D программу [29, 30].

Таблица 4.2

Ma	Максимальное значение модуля скорости Fluent 6	Максимальное значение функции тока во Fluent 6	Максимальное значение модуля скорости, м/с [29, 30]	Максимальное значение функции тока, м²/с [29, 30]	Максимальное значение модуля градиента температуры, К/м [29, 30]	Перепад давления, Па [29, 30]
10	$6.86 \cdot 10^{-6}$	$1.7 \cdot 10^{-6}$	$7.96 \cdot 10^{-6}$	$15.7 \cdot 10^{-9}$	6908.0	$2.5 \cdot 10^{-5}$
10^2	$6.55 \cdot 10^{-5}$	$1.62 \cdot 10^{-4}$	$8.272 \cdot 10^{-5}$	$15.1 \cdot 10^{-8}$	7579.0	$2.5 \cdot 10^{-4}$
10^3	$4.45 \cdot 10^{-4}$	$9.02 \cdot 10^{-4}$	$1.04 \cdot 10^{-3}$	$8.74 \cdot 10^{-7}$	13212.0	$2.1 \cdot 10^{-3}$
10^4	$2.82 \cdot 10^{-3}$	$4. \cdot 10^{-3}$	$6.34 \cdot 10^{-3}$	$3.14 \cdot 10^{-6}$	23792.9	0.015
10^5	$1.54 \cdot 10^{-2}$	$3.06 \cdot 10^{-2}$	0.0229	$13.33 \cdot 10^{-6}$	35084.0	0.07
10^6	$8.32 \cdot 10^{-2}$	$1.67 \cdot 10^{-1}$	0.0875	$3.6 \cdot 10^{-5}$	42107.0	31.3

Числам Марангони соответствуют следующие числа Рейнольдса, определённые по максимальной скорости представлены в таблице 4.3. :

Таблица 4.3

Ma	10	10^2	10^3	10^4	10^5	10^6
Re	0.24	2.47	31.05	189.29	683.71	2612.43

Результаты расчёта иллюстрируются на вышеприведённых рисунках 4.10-4.18. Они показывают эволюцию поля температур, при заданных граничных условиях при увеличении числа Марангони. Число Марангони – это мера отношения сил поверхностного натяжения, связанных с градиентом температуры на поверхности раздела сред, к силам вязкости. При этом наблюдается два вихря – один слева в нём вещество вращается по часовой стрелке, другой справа – в нём вещество вращается против часовой стрелки, так что направления согласованы. При увеличении числа Марангони скорость течения возрастает.

Сравнивая естественную конвекцию с конвекцией Марангони можно заключить, что термокапиллярная конвекция при Ma на два порядка меньшем числа Релея Ra производит такое же по интенсивности течение. При естественной конвекции максимум модуля скорости достигается в центре расчётной области под кристаллом, в то время как при термокапиллярной конвекции максимум модуля скорости наблюдается вблизи свободной поверхности.

Рис. 4.18 показывает, что число Нуссельта в подкристалльной области сначала уменьшается до чисел $Ma < 10^3$, а затем увеличивается. Для всех значений числа Марангони тангенс числа Нуссельта в подкристалльной области возрастает по модулю с увеличением числа Ma.

Температурный пограничный слой под кристаллом утоняется с увеличением числа Марангони. Изменение толщины температурного пограничного слоя оказывает влияние на скорость роста кристалла.

4.3. Метод Чохральского с погруженным вибратором

4.3.1. Математическая постановка задачи

При решении задачи используется система нестационарных двумерных уравнений Навье-Стокса для несжимаемой жидкости и уравнений переноса тепла и массы:

$$\begin{aligned} \frac{\partial V}{\partial t} + (V \nabla) V &= -\frac{\nabla P}{\rho} + \nu \Delta V + \beta T g \\ \operatorname{div} V &= 0 \\ \frac{\partial T}{\partial t} + (V \nabla) T &= a \Delta T \end{aligned} \quad (4.1)$$

где V – вектор скорости; P – давление; ρ – плотность; T – температура; g – ускорение свободного падения; a , ν – коэффициенты температуропроводности и кинематической вязкости; β – коэффициент температурного расширения.

Для расчетов необходимо задавать начальные, граничные условия и следующие теплофизические коэффициенты: c_p – удельная теплоёмкость, κ – коэффициент теплопроводности, μ – динамическая вязкость жидкости или $a = \frac{\kappa}{c_p \rho}$ температуропроводность и кинематическую вязкость $\nu = \frac{\mu}{\rho}$.

Вибратор совершает вертикальные колебания с амплитудой $A = 0.4$ мм и частотой $f = 20$ Гц в соответствии с законом:

$$y = A \sin(2\pi f t).$$

Для скорости на всех границах ставится условие прилипания (на неподвижных стенках скорости равны нулю, на подвижной стенке скорость равна скорости стенки).

Для температуры ставятся такие условия: тигель горячий и имеет постоянную температуру в 400К, кристалл холодный и имеет температуру в 300К. На стенке соединяющей кристалл с тиглем $\frac{\partial T}{\partial y} = \frac{\partial T}{\partial n} = 0$, где n внешняя нормаль.

В качестве начальных условий задаётся неподвижная жидкость с постоянной температурой в 300К. Далее отключается нестационарный решатель и уже стационарным решателем, обычно за 15 итераций, достигается начальное распределение температуры используемое в дальнейшем нестационарным решателем как начальное для оценки вибрационного воздействия. В случае же присутствия естественной конвекции, стационарным решателем изначально делается около 4000 итераций для достижения начальных условий к нестационарному решателю. Нестационарный решатель используется при моделировании вибрационного воздействия.

Данная задача определяется следующими безразмерными числами Прандтля (Pr), вибрационным числом Рейнольдса (Re_{vibr}), Грасгофа (Gr) или Рэлея (Ra), отношением расстояния от кристалла до вибратора к

диаметру кристалла (h/d). Данные параметры определяются следующими безразмерными комплексами: $Pr = \nu/a$, $Re_{vibr} = \frac{2\pi fAH}{\nu}$, $Gr = g\beta\Delta TH^3/\nu^2$, $Ra = Gr \cdot Pr$ – числа Прандтля, вибрационное число Рейнольдса, Грасгофа, Рэлея.

В данной работе задача решалась в размерных естественных переменных скорость-давление-температура (4.1), но для моделирования конвективных задач часто используют безразмерную запись данных уравнений, в которую и входят данные безразмерные параметры (числа Прандтля и Грасгофа). Кроме этого иногда используют систему уравнений Навье-Стокса, записанную в переменных вихрь-функция тока-температура (в которую не входит давление). Ниже приведена данная запись уравнений:

$$\begin{aligned} \omega_t + \psi_y \omega_x - \psi_x \omega_y &= \omega_{xx} + \omega_{yy} + F, \\ \psi_{xx} + \psi_{yy} &= -\omega, \\ \theta_t + \psi_y \theta_x - \psi_x \theta_y &= Pr^{-1}(\theta_{xx} + \theta_{yy}), \\ F &= Gr \theta_x, \end{aligned} \tag{4.2}$$

где ω - вихрь; ψ - функция тока; θ - безразмерная температура; $u = \psi_y$, $v = -\psi_x$ - проекции вектора скорости на оси координат x , y соответственно

4.3.2. Особенности метода расчёта

Расчёты в п. 4.3. были произведены в программе ANSYS Fluent. Расчётная область представляет собой квадратик стороны 3см. Кристалл имеет диаметр 1см и заглублён в расплав на глубину 1мм. Вибратор имеет диаметр 0.8см и толщину 1мм. В данной исследовательской работе

рассматриваются случаи удаления поверхности вибратора от поверхности кристалла на 5мм, 8мм и 13.5мм. В расчетах использовалась неравномерная сетка со сгущением вблизи твёрдых стенок (рис. 4.19) На острых кромках вибратора и кристалла выделялись специальные поверхности которые разбивались сеткой отдельно по алгоритму QuadPave (в среднем 90 контрольных объёмов, на каждый угол). Для задания вибраций использовался профиль вибраций (профайл, см. Приложение 2) и динамическая сетка. Для создания профайла использовалась программа написанная на Паскале. Полный текст этой программы приведён в Приложении 2.

Профайл созданный с помощью данной программы может быть использован и в параллельной версии FLUENT.

При перестроении сетки использовался метод послойного наращивания – Layering. Появление и уничтожение слоёв квадратных ячеек происходило на расстоянии 0.25см от поверхности вибратора с внешней стороны центральной зоны FLUID-CENTER. В нижней, центральной и верхней зоне было создано 11178, 3748 и 4586 контрольных объёмов соответственно.

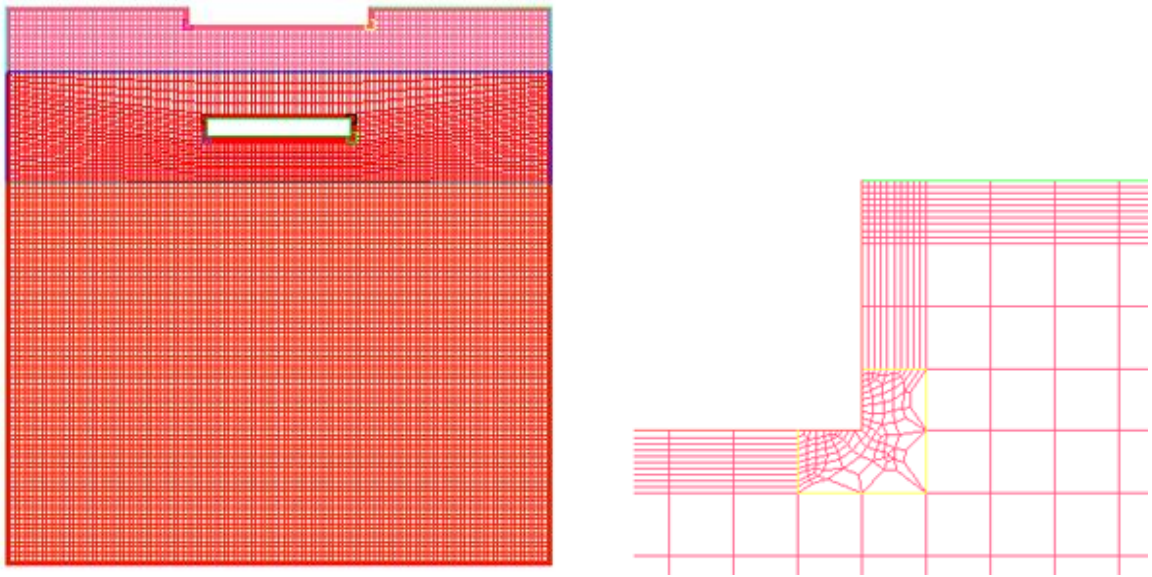


Рис. 4.19 Зоны расчётной сетки (слева) и структура расчётной сетки вблизи углов кристалла (справа).

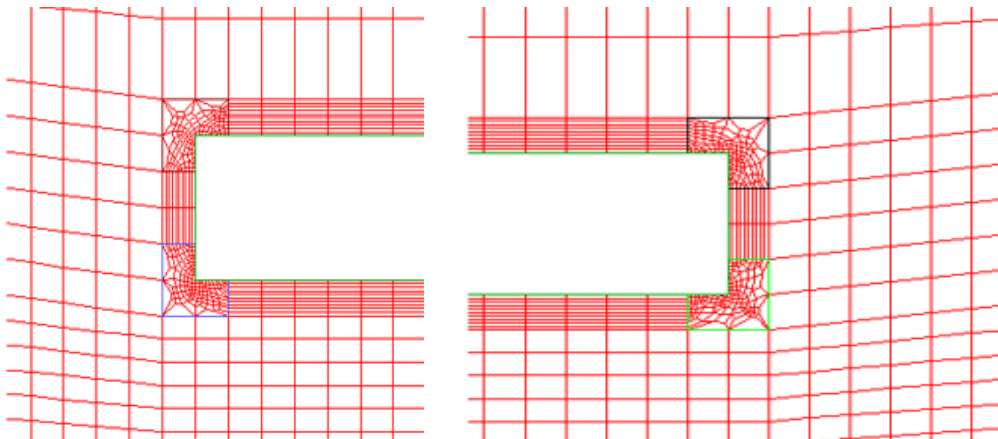


Рис. 4.20 Сетка вблизи острых кромок вибратора.

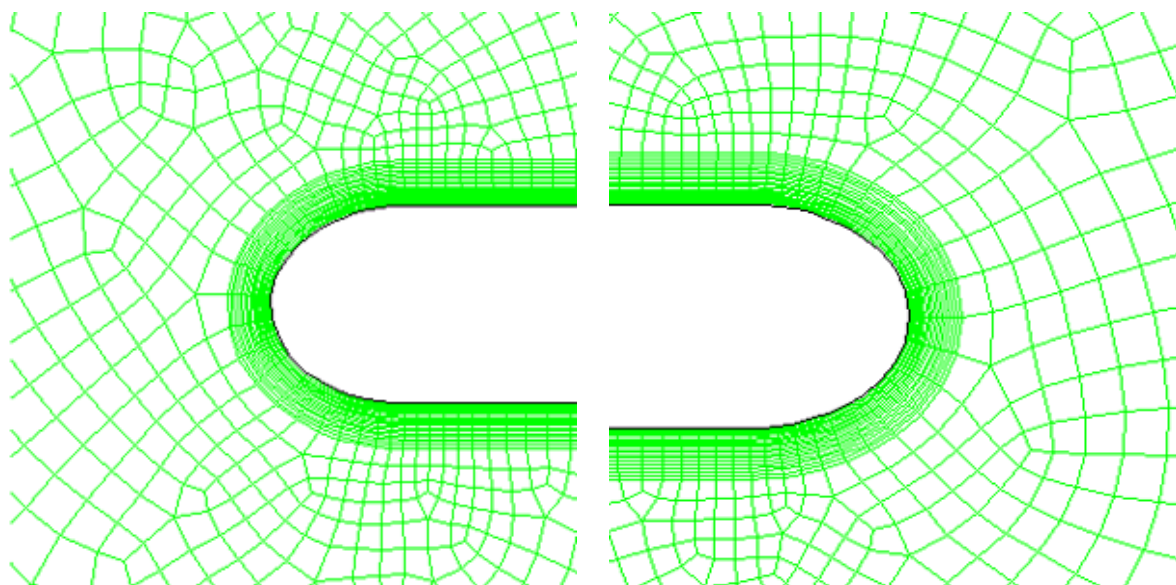


Рис. 4.21 Сетка вблизи краёв вибратора

Скругление краёв вибратора позволяет создать хорошее сгущение сетки для точного воспроизведения течения (без срывов) и пограничных слоев по всей поверхности вибратора. Сетка была построена в сеточном генераторе Gambit. В данном случае параметры Boundary Layer: высота первой ячейки 0.0007мм, знаменатель геометрической прогрессии 1.05, всего 20 слоёв ячеек. В центральной зоне использовался алгоритм Quad Pave совместно с Size Function с параметрами: величина первой ячейки 0.005мм, знаменатель прогрессии 1.1, конечное значение $h_{ideal}=0.25$ мм. Сгущение производилось к вершинам вибратора: там где стык прямоугольника и половинок эллипса. Эллипсы созданы с параметрами $a=0.5$ мм, $b=0.7$ мм. Данная сетка использовалась в расчёте: Водно-глицериновая смесь : $Pr=100$, $Re_{vibr}=1500$, $Gr=0$, $h/d=1.35$ и содержала: 7314, 7578 , 7346 контрольных объёмов соответственно, в нижней, средней и верхней областях расчётной области.

Осреднённое вибрационное течение (ОВТ) находилось в процессе осреднения по времени численных решений нелинейных уравнений Навье-Стокса, получаемых на каждом временном слое. В соответствии с формулой $\Phi_{AVERAGE} = \frac{1}{\Delta T} \int_0^{\Delta T} \Phi dt$, в которой интеграл заменялся интегральной суммой, а верхний предел интегрирования принимал значение: один последний период расчёта. Шаг по времени был постоянный на протяжении всего расчёта и равнялся 0.002с. При частоте 20Гц этот шаг соответствует 25 шагам за период вибрации $\Delta T=0.05$ с. Это позволило наблюдать эволюцию осреднённого вибрационного течения на примере поля температур во времени и в пространстве и его зависимость от определяющих параметров.

Одной из трудностей численного моделирования ОВТ является необходимость больших машинных временных затрат. Например, при использовании расчётной сетки содержащей примерно 20000 прямоугольных контрольных объёмов, на 4-ядерном процессоре Core 2 Quad Q6600 с тактовой частотой 2.4ГГц при расчёте в специальной параллельной версии FLUENT (запускалась с консоли командой `fluent 2ddp -t4`) использующей все ядра процессора время расчета 100Т составило 1 час 23 мин. Для сравнения при использовании 2-ядерного IntelPentiumD с более высокой тактовой частотой 3.0ГГц полное время расчёта той же задачи на двух ядрах составило 3 часа 34 мин. Из этого можно заключить, что использование многоядерности гораздо более эффективно для ускорения времени расчета, чем простое увеличение тактовой частоты процессора. Хотя такой большой разрыв во времени

счёта можно также объяснить и другими причинами, например, отчасти тем, что Pentium имеет более старую архитектуру чем Core 2 QUAD.

При расчётах число Куранта $C = \frac{2\pi f A \Delta t}{h_1}$ и сеточное число Рейнольдса $Re_c = \frac{2\pi f A h_1}{\nu}$ принимали следующие значения: $C \approx 4$, $Re_c = 1.2564$, что говорит о достаточном качестве расчетной сетки.

В таблице 4.4 представлены характерные параметры численного расчета.

Таблица 4.4

π	3.141	Δt	0.002
f	20	ν	10^{-6}
A	0.0004	h_1	0.000025

где: π -число ПИ, f -частота вибраций, A - амплитуда вибраций, $2\pi f A$ - амплитуда скорости при вибрациях, Δt - фиксированный шаг по времени, ν - кинематическая вязкость расплава (во всех расчётах одно и тоже значение), h_1 - шаг расчетной сетки у твёрдой стенки.

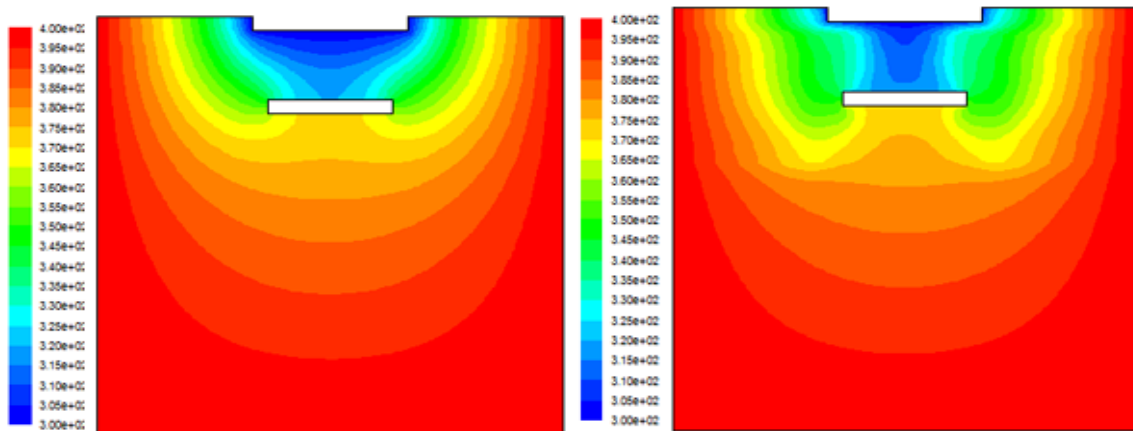
Рекомендуемые значения параметров для устойчивого счета следующие: $C < 1$, $Re_c < 2$. Для полного соответствия рекомендациям, необходимо уменьшить шаг по времени в 4 раза, т.е. считать с шагом не более 0.01 период колебаний.

4.3.3. Результаты многопараметрических расчётов

4.3.3.1. Расплав нитрата натрия

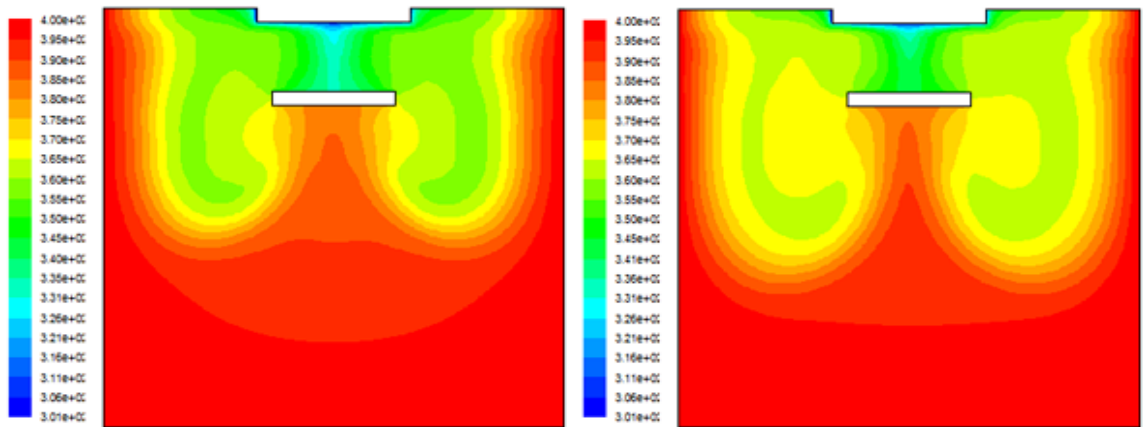
Здесь иллюстрируется результат многопараметрического расчёта для нитрата натрия со следующими безразмерными параметрами: $Pr=7$, $Re_{vibr}=1500$, $Gr=0$, $h/d=0.5$. Продолжительность расчетов была 20 секунд (400 периодов) при частоте 20Гц и амплитуде 0.4мм. Количество шагов за период равно 25. Размер шага постоянный. Максимальное число итераций на каждом временном шаге равно 120. Данный расчёт выполнен для $Pr=7$ (расплав нитрата натрия). При вибрационном числе Рейнольдса равном 1500. Вибратор расположен на расстоянии радиуса кристалла ($h=0.5$ см).

На следующей серии рисунков 4.22 изображены результаты расчётов, в которых осреднение производилось по 1Т (одному периоду вибрации) для времён 0Т, 10Т, 100Т, 200Т, 300Т, 400Т, где $T=1/f$ - период вибрации. Данные результаты показывают влияние начального временного участка осреднения на величину среднего значения температуры. Видно, что участок осреднения поля температуры должен быть не менее 300Т.



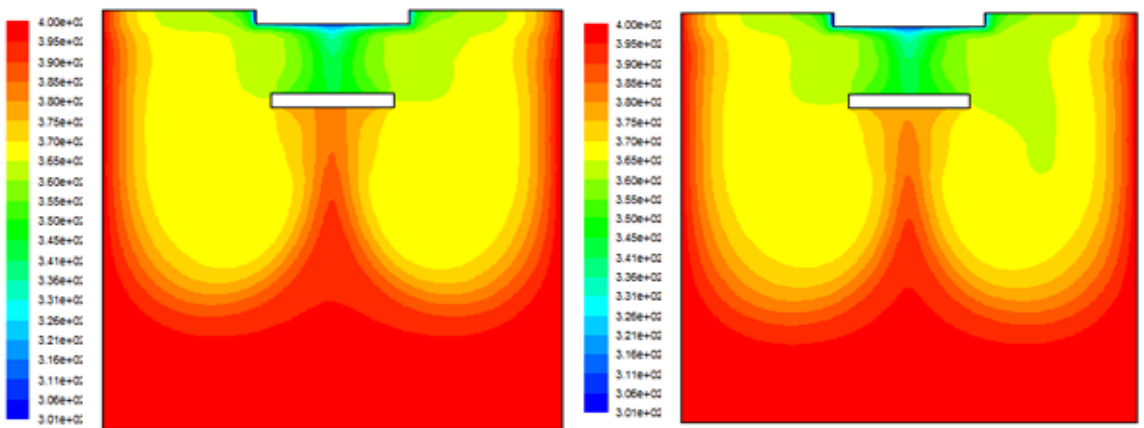
а) 0Т

б) 10Т



в) 100Т

г) 200Т



д) 300Т

е) 400Т

Рис. 4.22 (а-е) Осреднённое поле температур. Осреднение производилось по одному периоду вибрации спустя соответственно а) - 0Т, б) - 10Т, в) - 100Т, г) - 200Т, д) - 300Т, е) - 400Т после начала вычисления.

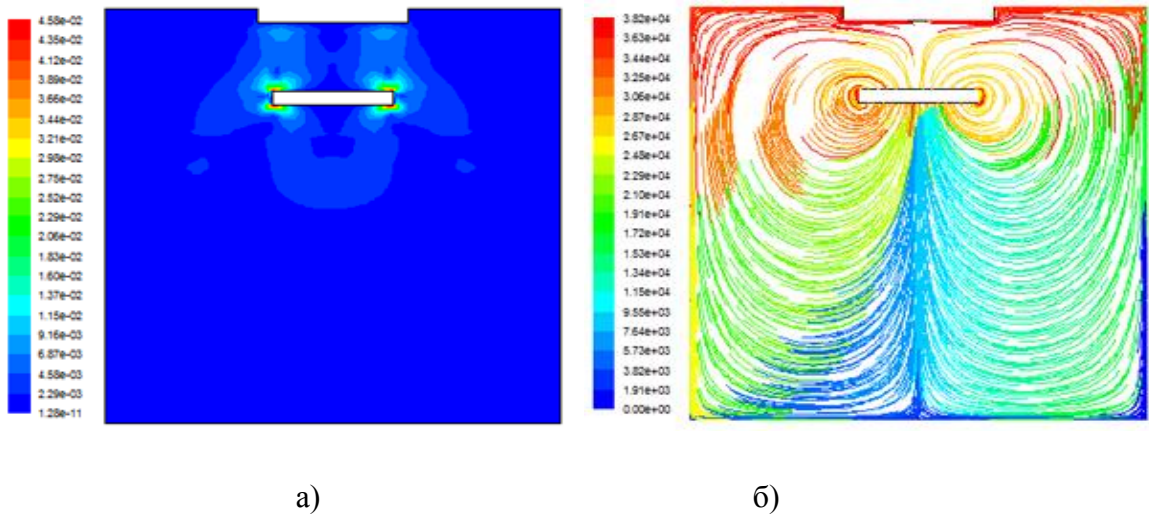


Рис. 4.23а Структура осредненного течения

а)-Осреднённый модуль скорости на момент $400T=20c$.

б)- треки частичек жидкости на момент $400T=20c$.

Структуру осредненного течения можно увидеть из результатов расчётов на рис. 4.23а (осреднение по одному периоду). Видно, как вибрирующий погруженный активатор приводит к перемешиванию всего объёма расплава.

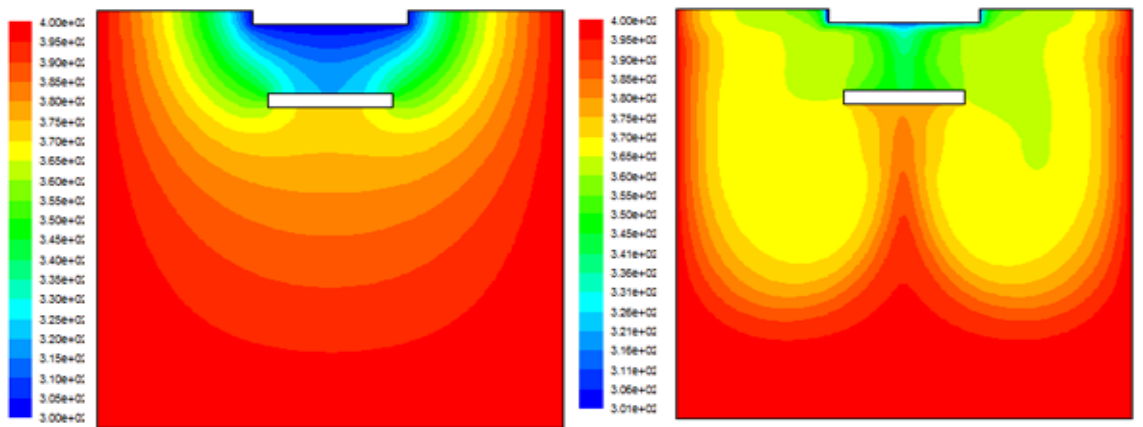


Рис. 4.23б Поле температур: слева - без воздействия вибраций (полученное решением соответствующей стационарной задачи), а справа - осреднённое поле температур при вибрационном воздействии (спустя 20с после начала вибраций с частотой 20Гц).

На рис 4.24 представлены профили температуры, которые показывают влияние вибрации на температурный пограничный слой и градиент температуры вблизи фронта кристаллизации на примере расплава нитрата натрия ($Pr=7$; $Re_{vibr}=1500$; $h/d=0.5$):

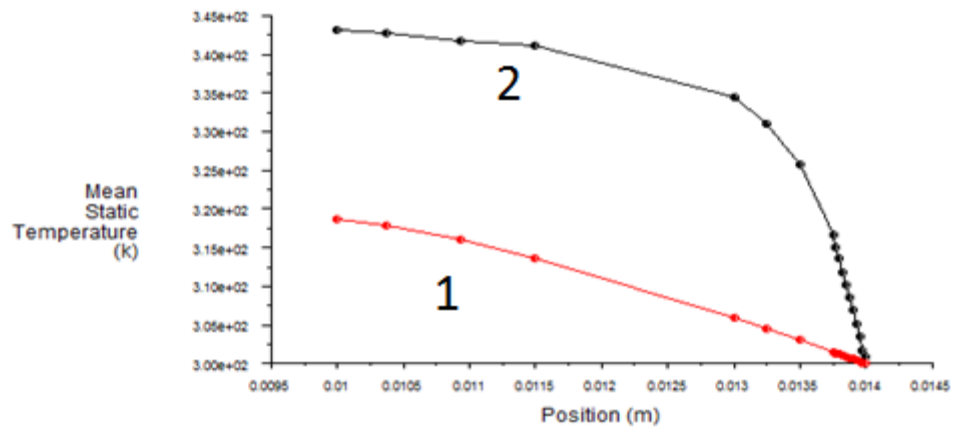


Рис. 4.24 Вертикальный профиль температуры. Зависимость температуры в центральном вертикальном сечении расчётной области от значения координаты y ($y=0.014$ м – соответствует поверхности кристалла; $y=0.009$ м – соответствует ближайшей к кристаллу поверхности вибратора).

Линия 1 - без вибраций, а линия 2 - с вибрациями ($A=0.4$ мм, $f=20$ Гц).

На рис. 4.24 показано, что при вибрационном воздействии градиент температуры вблизи кристалла возрастает, а температурный пограничный слой уменьшается.

4.3.3.2. Расплав металла

Рассмотрим расплав металла со следующими безразмерными параметрами: $Pr=0.1$, $Re_{vibr}=1500$, $Gr=0$, $h/d=0.5$. Варианты с конвекцией были рассчитаны, но из-за малого влияния конвекции по сравнению с

Из результатов, представленных на рис. 4.25 видно, что из-за малого числа Прандтля (малой вязкости и большой теплопроводности) влияние вибраций на температурный пограничный слой несущественно. Влияние вибраций на температурный пограничный слой расплавов металлов (полупроводников) с малыми числами Прандтля может сказываться при увеличении амплитуды и частоты вибраций (вибрационного числа Рейнольдса Re_{vibr}).

На рисунках 4.26-4.28, представлены осреднённые скорости, давление и температуры.

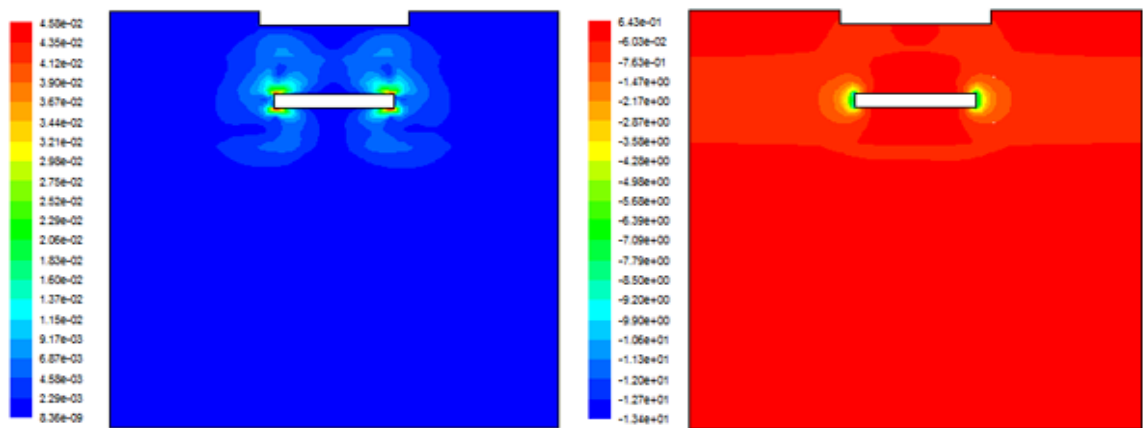


Рис. 4.26 Осреднённый по одному последнему периоду на момент 500T модуль скорости - слева и давление - справа.

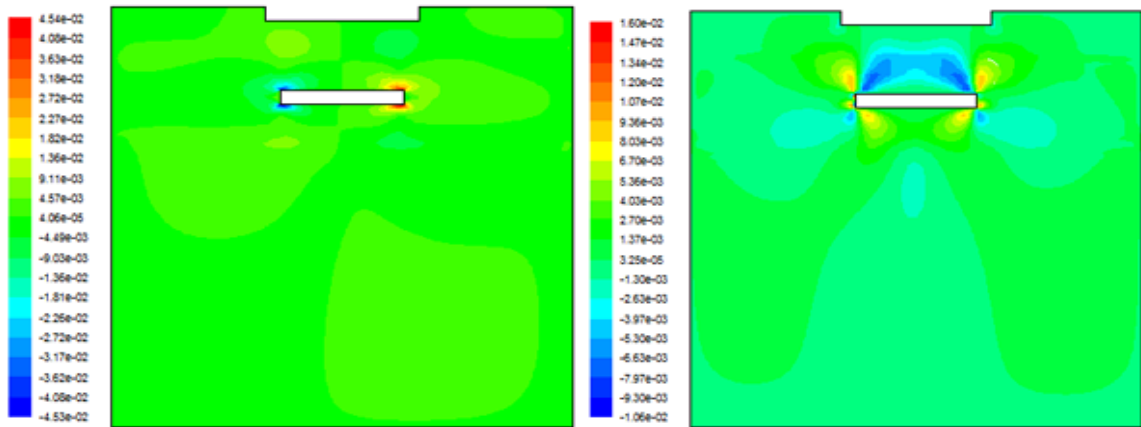


Рис. 4.27 Осреднённая по одному последнему периоду на момент 500T горизонтальная скорость - слева и вертикальная скорость - справа.

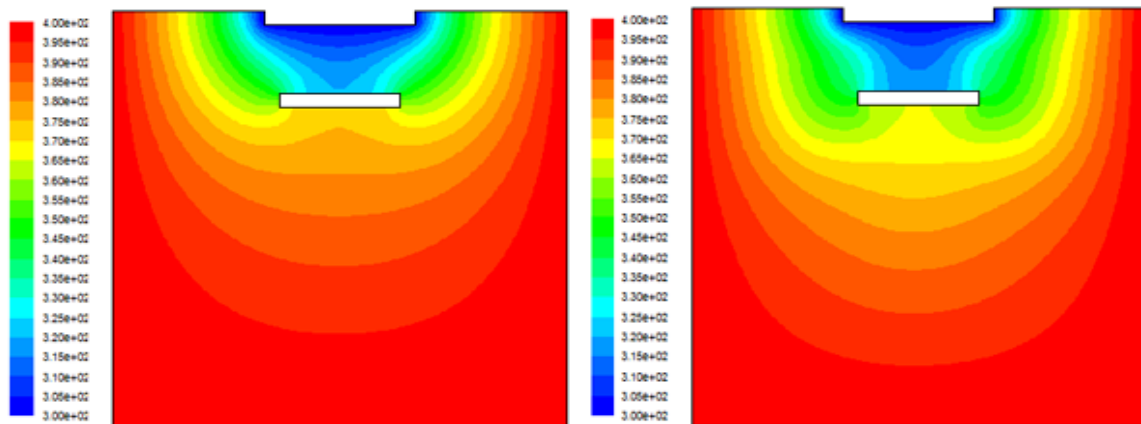


Рис. 4.28 Поле температур: слева без воздействия вибраций (полученное решением соответствующей стационарной задачи), а справа осреднённое поле температур при вибрационном воздействии (спустя 25с после начала вибраций с частотой 20Гц).

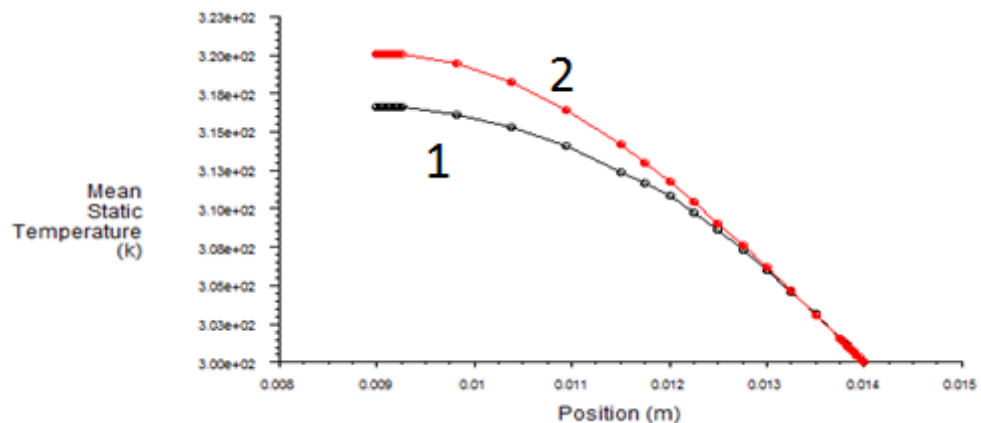


Рис. 4.29 Вертикальный профиль температуры. Зависимость температуры в центральном вертикальном сечении расчётной области от значения координаты y ($y=0.014$ м – соответствует поверхности кристалла; $y=0.009$ м – соответствует ближайшей к кристаллу поверхности вибратора).

Линия 1 - без вибрации, а линия 2 - с вибрацией ($A=0.4$ мм, $F=20$ Гц).

Из профилей температуры, изображенных на рис. 4.29 следует, что в непосредственной близости от фронта кристаллизации влияние вибрации на поле температур совсем незначительно. Это объясняется малым числом Прандтля у расплава металла $Pr=0.1$, а также невысоким значением вибрационного числа Рейнольдса $Re_{vibr}=1500$.

4.3.3.3. Водно-глицериновая смесь

Рассмотрим водно-глицериновую смесь со следующими безразмерными параметрами: $Pr=100$, $Re_{vibr}=1500$, $Gr=0$, $h/d=0.5$

На рис. 4.30 показано осреднённое поле температур полученное в результате численного расчёта. Осреднение производилось по $1T$ (одному периоду вибрации) для времён $10T$, $100T$, $200T$, $300T$, $400T$, $500T$, $600T$, $700T$.

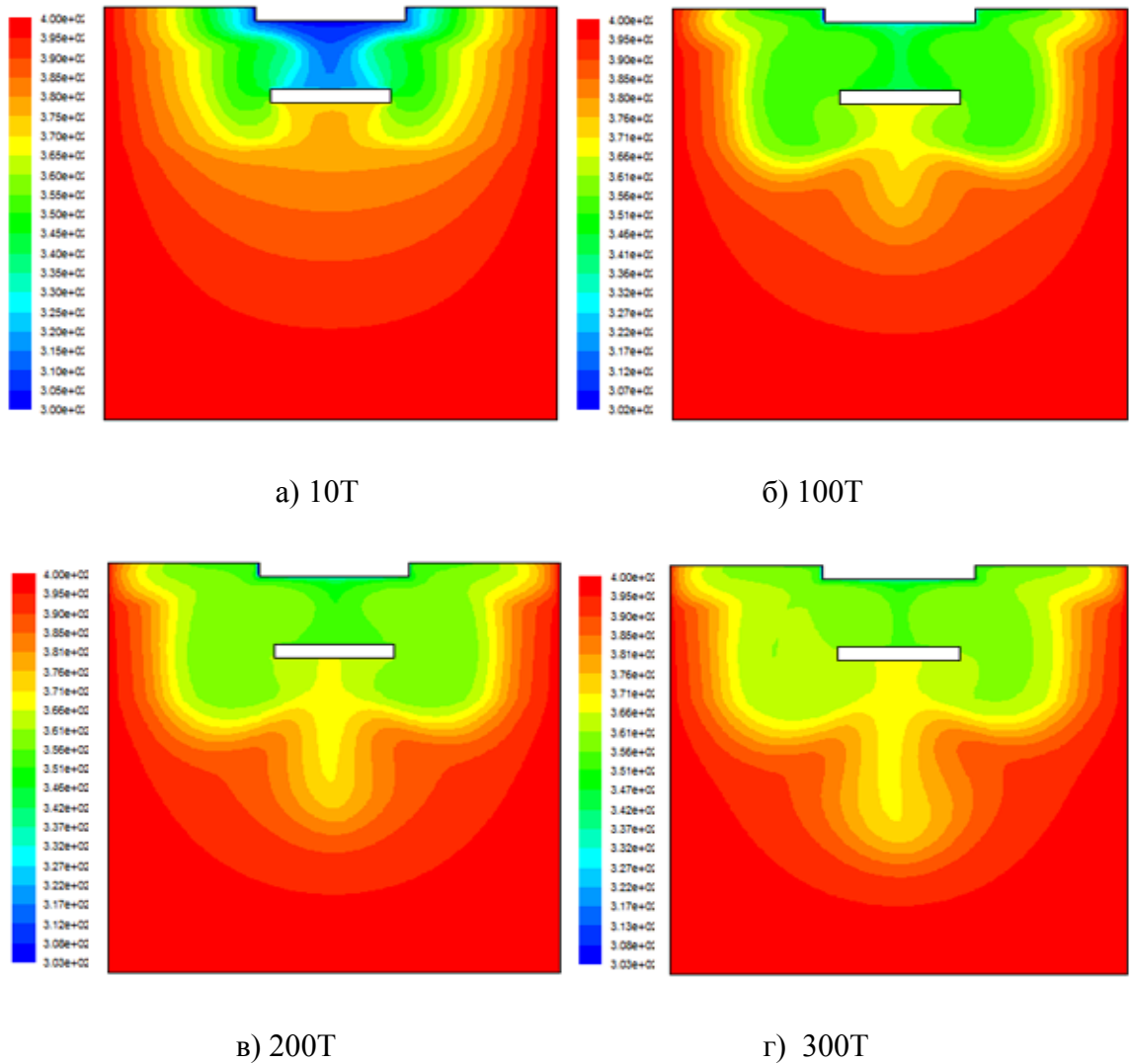


Рис. 4.30 Осреднённое поле температур. Осреднение производилось по одному периоду вибрации спустя соответственно а) - $10T=0.5c$, б) - $100T=5c$, в) - $200T=10c$, г) - $300T=15c$ после начала вычисления.

(см. продолжение на следующей странице)

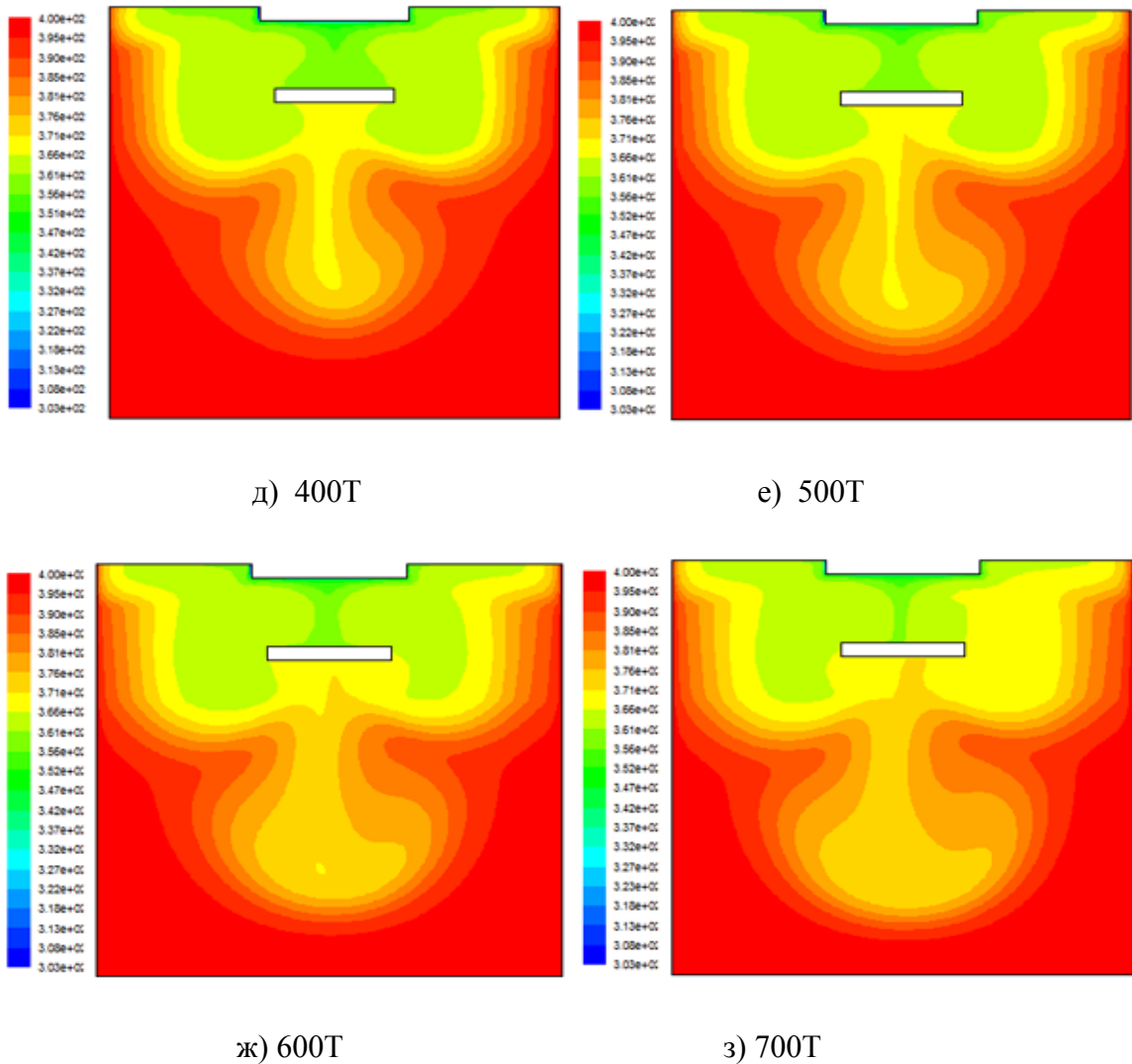


Рис. 4.31 (продолжение) Осреднённое поле температур. Осреднение производилось по одному периоду вибрации спустя соответственно д) - $400T=20c$, е) $500T=25c$, ж) $600T=30c$, з) $700T=35c$ после начала вычисления.

Интересно, что наблюдается небольшая несимметричность поля температур относительно центральной вертикальной оси. Хотя конечно, данную задачу можно было бы считать и в симметричной постановке – это позволило бы сократить время счёта, за счёт уменьшения количества контрольных объёмов в 2 раза. Вообще говоря несимметричность решения может зависеть от алгоритма решения слау (направление обхода

узлов в методе Якоби) или от особенностей аппроксимации : автор заметил что на треугольных сетках решения получаются как правило несимметричные.

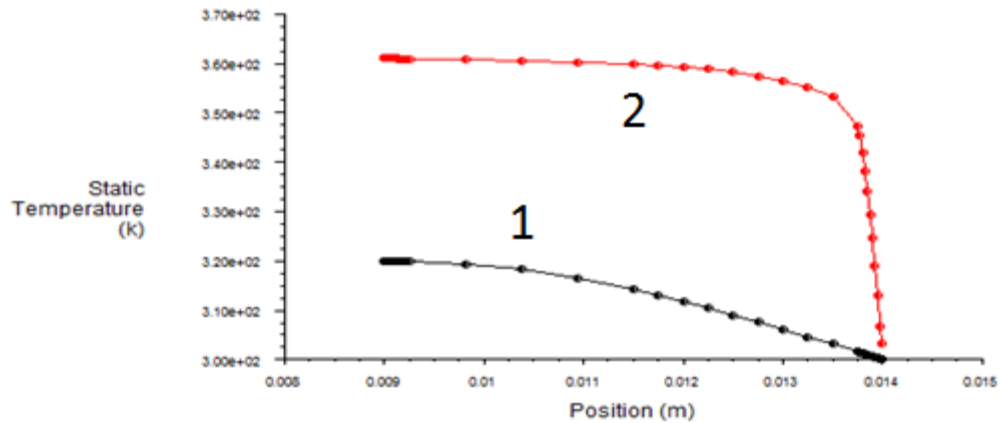


Рис. 4.32 Вертикальный профиль температуры. Зависимость температуры в центральном вертикальном сечении расчётной области от значения координаты y ($y=0.014$ м – соответствует поверхности кристалла; $y=0.009$ м – соответствует ближайшей к кристаллу поверхности вибратора). Линия 1- без вибрации, а линия 2 - с вибрацией ($A=0.4$ мм, $F=20$ Гц) осреднённая по одному периоду на момент 700Т.

Из вида температурных профилей, изображенных на рис. 4.24, 4.29 и 4.32, можно сделать вывод, что при вибрационном воздействии градиент температуры вблизи кристалла возрастает, а температурный пограничный слой уменьшается. И это проявляется тем сильнее, чем выше число Прандтля.

4.3.3.4. Расплав с большим числом Прандтля при наличии естественной конвекции

В п. 4.3.3.1, 4.3.3.2 и 4.3.3.3 были представлены результаты для условий невесомости ($g=0$). Рассмотрим теперь дополнительный

осложняющий фактор - наличие естественной конвекции ($g \neq 0$) для $Pr=100$, $Re_{vibr}=1500$, $Gr=1000$, $h/d=0.5$.

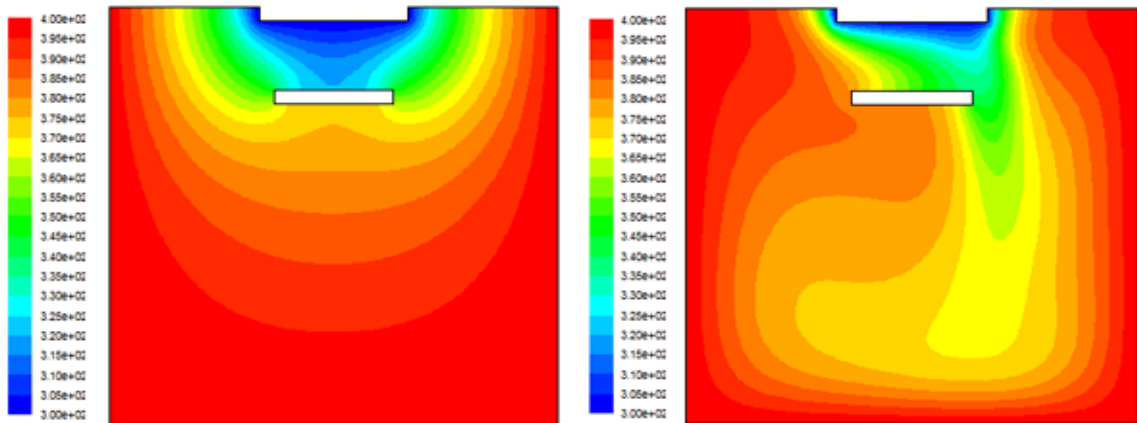


Рис. 4.33 Поле температур. Слева при $Gr=0$, а справа при $Gr=1000$. Вибрация отсутствует $Re_{vibr}=0$.

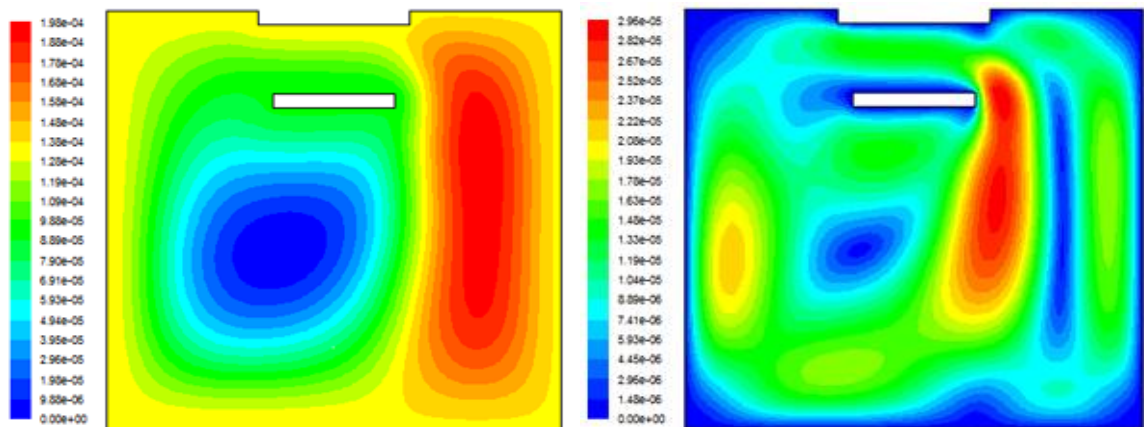
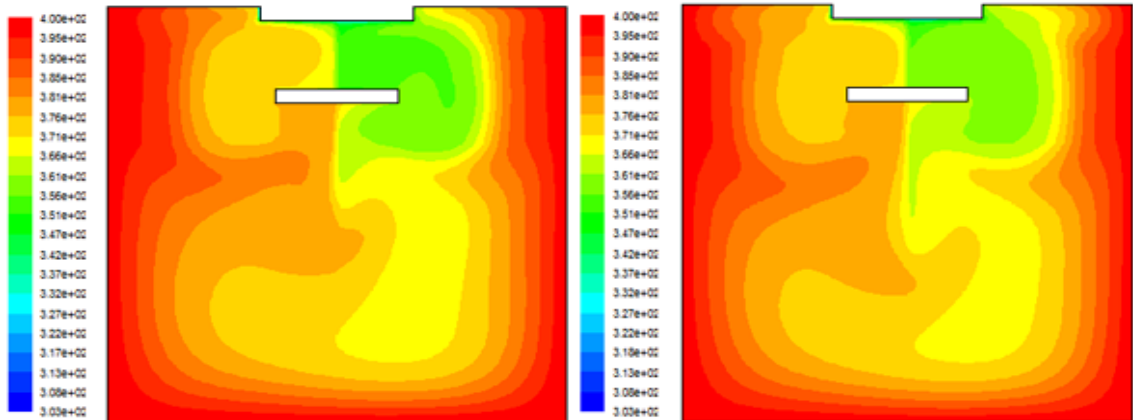


Рис. 4.34 Функция тока слева и модуль скорости справа при естественной конвекции $Gr=1000$, $Re_{vibr}=0$.

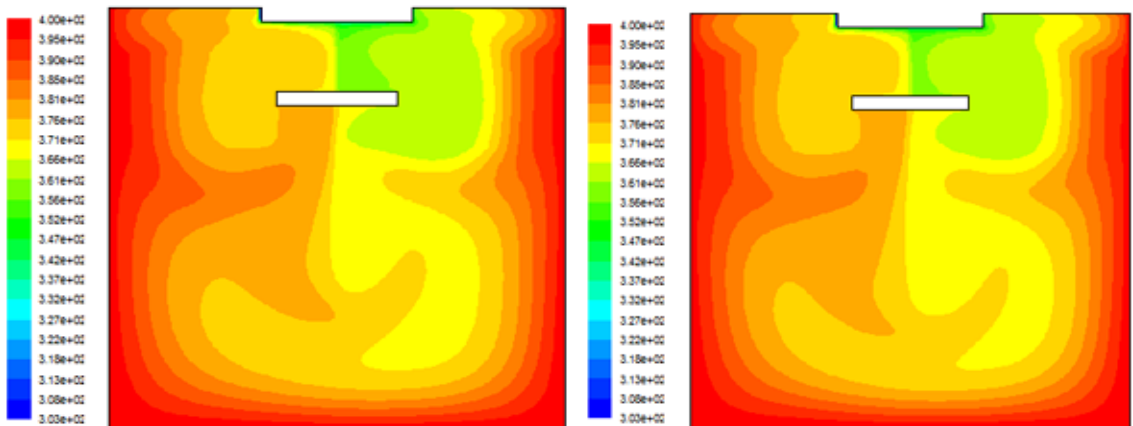
Из рисунка 4.34 виден неустановившийся характер течения и наблюдается два вихря: один под вибратором, а второй справа от вибратора.

На рис. 4.35 показано осреднённое поле температур, полученное в результате численного расчёта с параметрами $Pr=100$, $Re_{vibr}=1500$, $Gr=1000$, $h/d=0.5$. Осреднение производилось по $1T$ (одному периоду вибрации) для времён $100T$, $200T$, $300T$, $400T$, $500T$, $600T$.



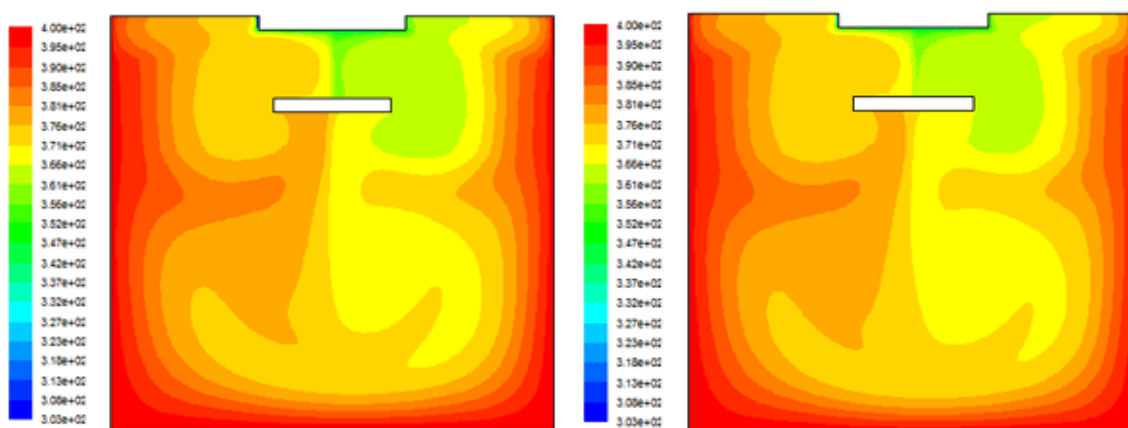
а) 100T

б) 200T



в) 300T

г) 400T



д) 500Т

е) 600Т

Рис. 4.35 Осреднённое поле температур. Осреднение производилось по одному периоду вибрации спустя соответственно а) $100T=5с$, б) $200T=10с$, в) $300T=15с$, г) $400T=20с$, д) $500T=25с$, е) $600T=30с$ после начала вычисления.

Проведены численные расчеты с учетом наличия естественной конвекции и без нее, с вибрациями и без вибраций. На рис. 4.36 приведены профили температур для всех случаев.

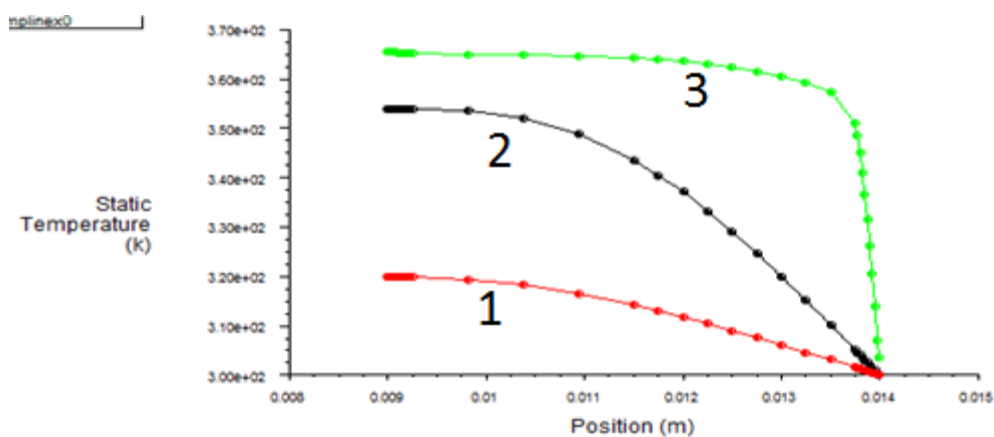


Рис. 4.36 Вертикальный профиль температуры. Зависимость температуры в центральном вертикальном сечении расчётной области от значения координаты y ($y=0.014$ м – соответствует поверхности кристалла; $y=0.009$ м – соответствует ближайшей к кристаллу поверхности вибратора). Линия 1 соответствует $Gr=0$,

$Re_{vibr}=0$. Линия 2 соответствует $Gr=1000$, $Re_{vibr}=0$. Линия 3 соответствует $Gr=1000$, $Re_{vibr}=1500$.

Из приведённых на рис. 4.35 (полях температур) и рис. 4.36 (профилях) видно, что естественная конвекция, также как и вибрационное воздействие, способствует увеличению градиента температуры вблизи фронта кристаллизации, а также уменьшению толщины температурного пограничного слоя. Однако, вибрационное воздействие с числом $Re_{vibr}=1500$ гораздо более сильно увеличивает градиент температуры вблизи фронта кристаллизации и уменьшает толщину температурного пограничного слоя, чем естественная конвекция с числом $Gr=1000$.

Возможно, если бы диаметр вибратора (погруженного разделителя) был больше (например в 2 раза), то естественная конвекция при том же числе Грасгофа $Gr=1000$ оказывала бы значительно более слабое воздействие на поле температур, т.к. вибратор (разделитель) препятствует естественной конвекции в зоне между разделителем и кристаллом.

Интересна несимметричность поля температур вызываемая присутствием вибратора и естественной конвекцией.

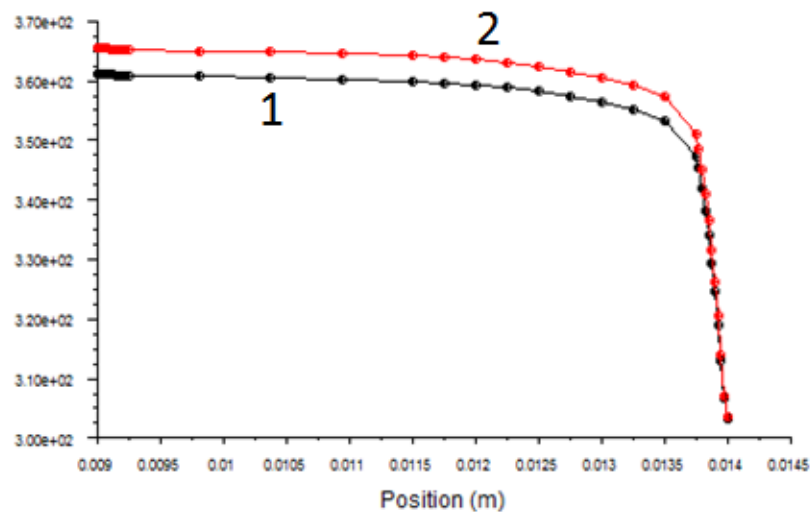


Рис. 4.37 Вертикальные профили температуры. Зависимость температуры в центральном вертикальном сечении расчётной области от значения координаты y ($y=0.014$ м – соответствует поверхности кристалла; $y=0.009$ м – соответствует ближайшей к кристаллу поверхности вибратора). Нижний график с маркером 1 - без естественной конвекции $Gr=0$. Верхний график с маркером 2 - с естественной конвекцией $Gr=1000$. В обоих случаях присутствует вибрация $Re_{vibr}=1500$. Графики представляют собой осреднённые по одному последнему периоду величины.

Если сравнивать поля температур при вибрационном воздействии $Re_{vibr}=1500$ на момент установления квазистационарного режима, то можно наблюдать совпадение вертикальных профилей температуры с присутствием и без присутствия естественной конвекции вблизи фронта кристаллизации. В этом смысле естественная конвекция не оказывает влияния на градиент температуры и пограничный слой вблизи фронта кристаллизации.

4.3.3.5. Расплав нитрата натрия

Рассмотрим влияние удалённости поверхности вибратора от поверхности кристалла на примере расплава нитрата натрия $Pr=7$, $Re_{vibr}=1500$, $Gr=0$, $h/d=0.8$:

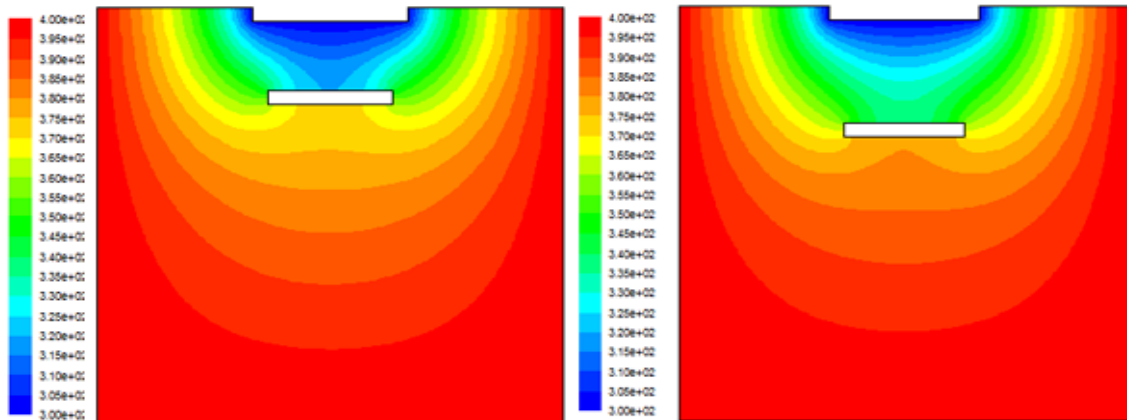
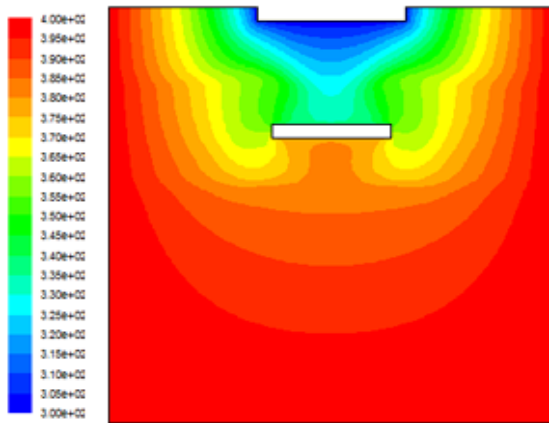


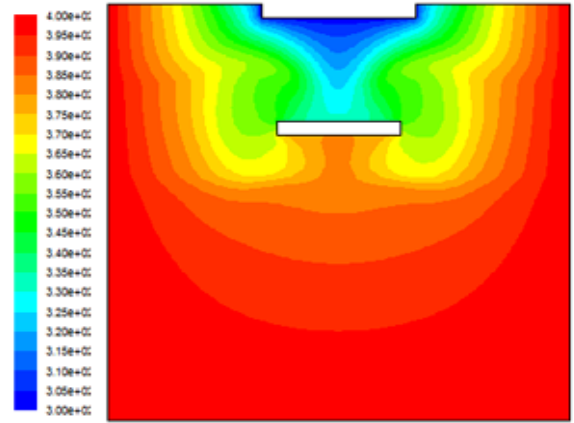
Рис. 4.38 Поле температур: стационарное поле без вибрации. Слева вибратор удалён от кристалла на расстояние 0.5мм равное радиусу кристалла, а справа вибратор удалён на расстояние 0.8 мм от поверхности кристалла. Материал расплав нитрата натрия $Pr=7$.

Для $h=0.8$ мм и чисел $Pr=7$, $Re_{vibr}=1500$ произведён расчёт длительностью в 600 периодов (30с).

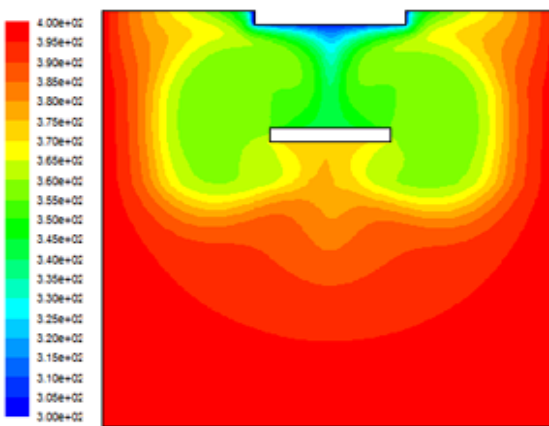
На рис. 4.39 представлены осреднённые, полученные в результате численного расчёта, поля температур. Осреднение производилось по $1T$ (одному периоду вибрации) для времён $10T=0.5с$, $20T=1с$, $100T=5с$, $200T=10с$, $300T=15с$, $400T=20с$, $500T=25с$, $600T=30с$.



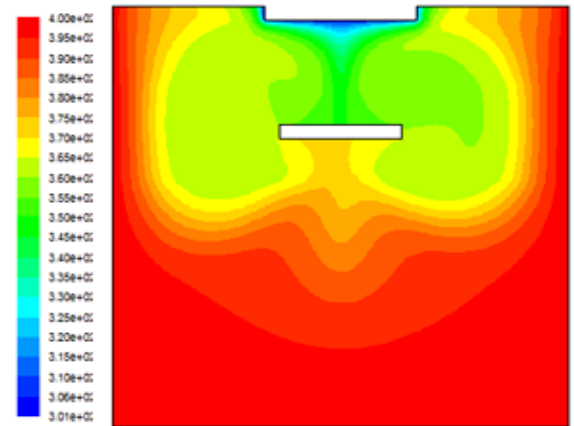
a) 10T



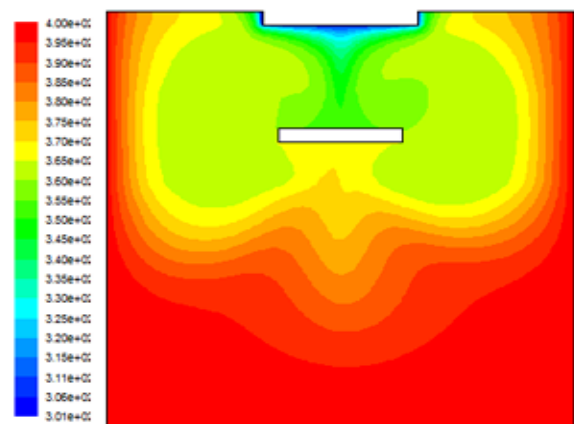
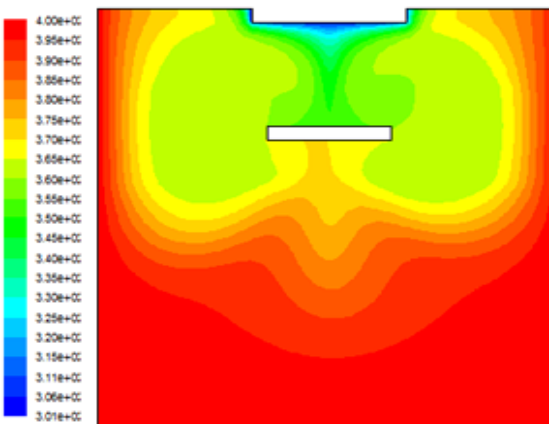
б) 20T



B) 100T



r) 200T



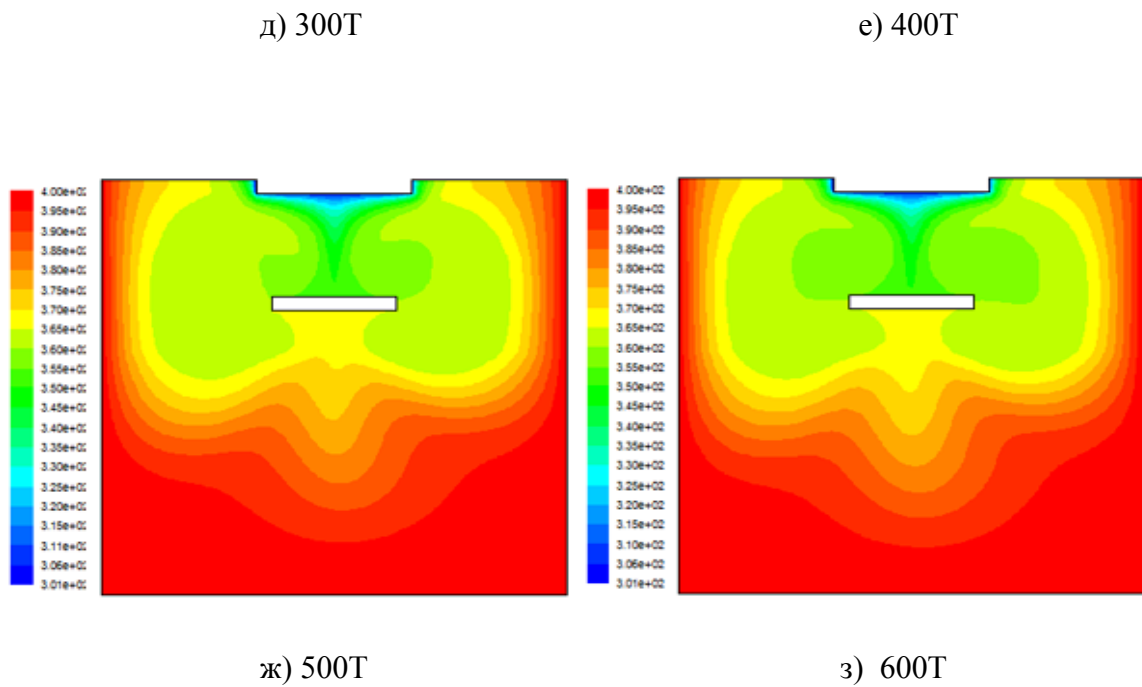


Рис. 4.39 Осреднённое поле температур. Осреднение производилось по одному периоду вибрации спустя соответственно а) $10T=0.5c$, б) $20T=1c$, в) $100T=5c$, г) $200T=10c$, д) $300T=15c$, е) $400T=20c$, ж) $500T=25c$, з) $600T=30c$ после начала вычисления.

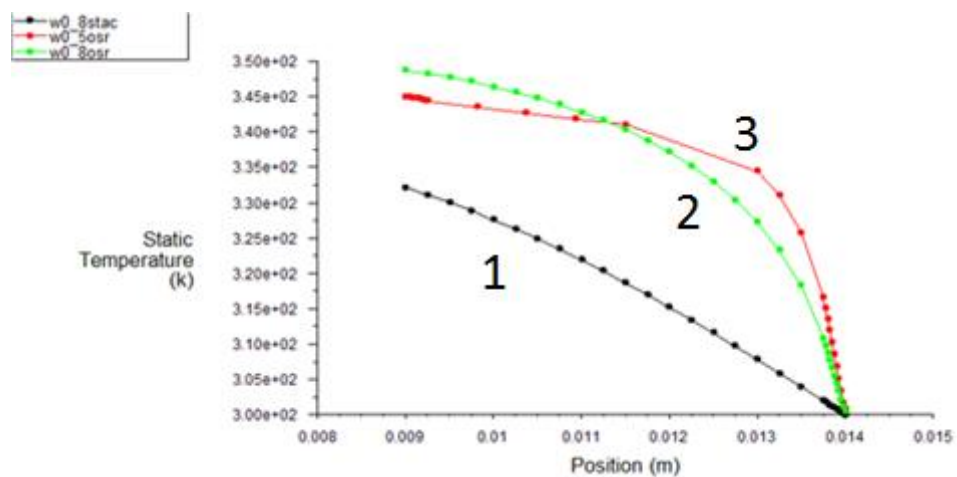


Рис. 4.40 Вертикальный профиль температуры. Зависимость температуры в центральном вертикальном сечении расчётной области от значения координаты y

($y=0.014$ м – соответствует поверхности кристалла; $y=0.009$ м – соответствует удалению на радиус кристалла). Линия 1 - без вибрации, линия 2 - с вибрацией при $h/d=0.8$, а линия 3 - с вибрацией при $h/d=0.5$ ($A=0.4$ мм, $F=20$ Гц).

Из результатов, представленных на рис. 4.40 следует, что при вибрационном воздействии градиент температуры вблизи кристалла возрастает, а температурный пограничный слой уменьшается. Кроме того, удаление вибратора на более далёкое расстояние способствует небольшому уменьшению градиента температуры, по сравнению со случаем более близкого расположения вибратора.

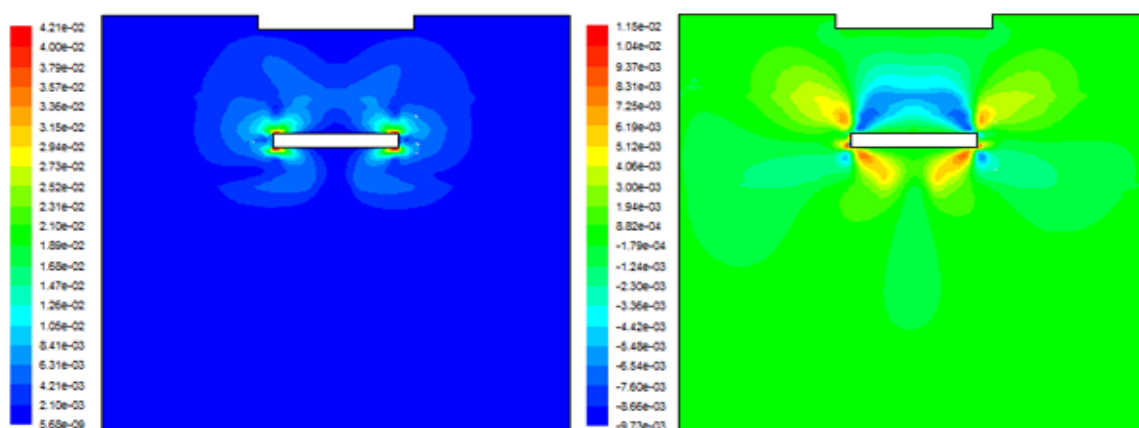


Рис. 4.41 Осреднённый модуль скорости и осреднённая вертикальная скорость на момент 600Т осреднённые по одному периоду. Здесь $h=0.8$ мм.

4.3.3.6. Водно-глицериновая смесь

Рассмотрим влияние удалённости поверхности вибратора от поверхности кристалла на примере водно-глицериновой смеси: $Pr=100$, $Re_{vibr}=1500$, $Gr=0$, $h/d=1.35$.

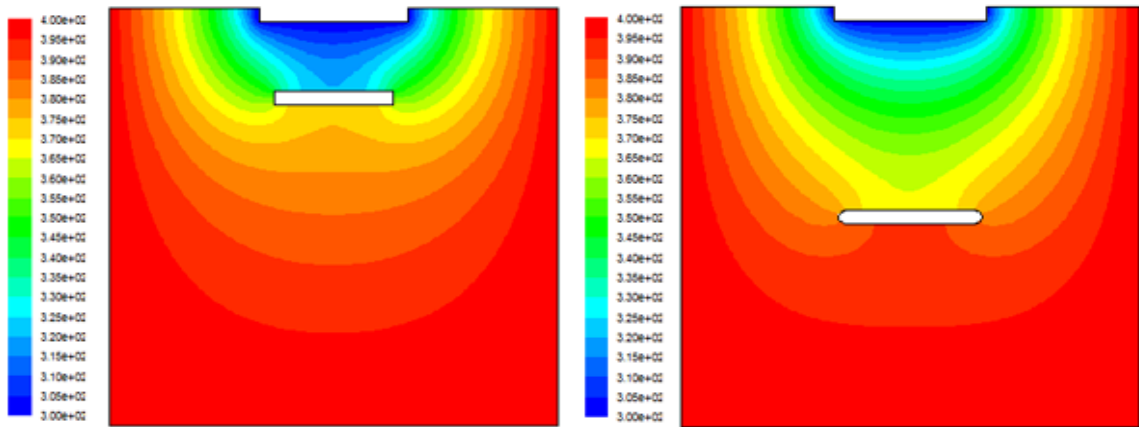
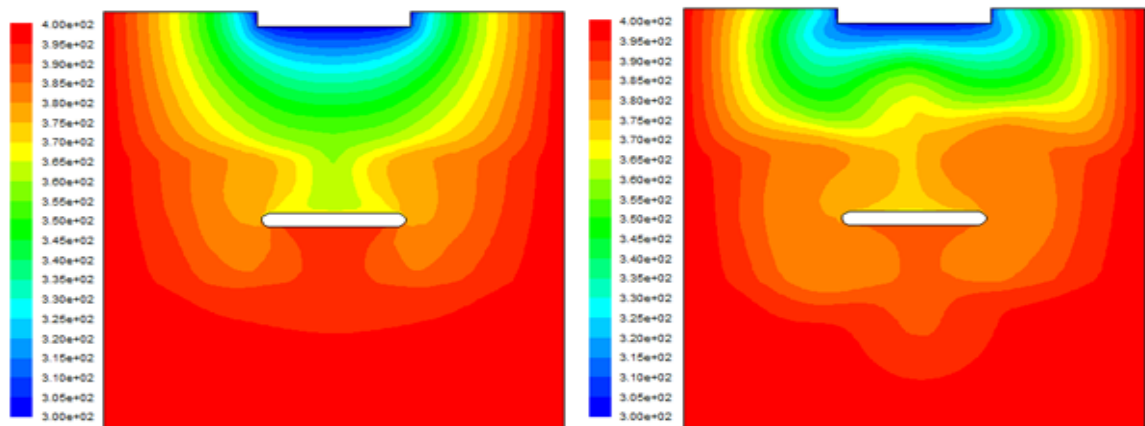
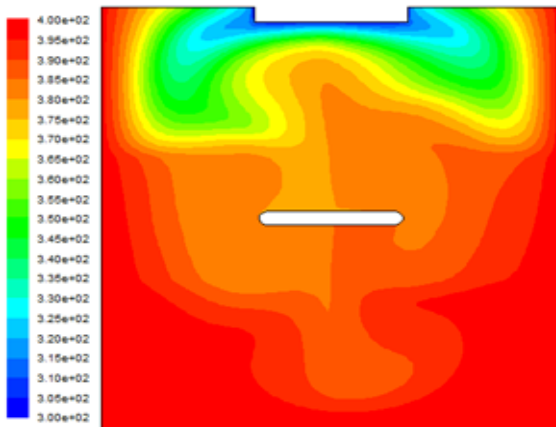


Рис. 4.42 Поле температур: стационарное поле без вибрации. Слева вибратор удалён на расстояние 0.5мм равное радиусу кристалла, а справа вибратор удалён на расстояние 1.35 мм от поверхности кристалла и находится по центру расчётной области. Водно-глицериновая смесь $Pr=100$.

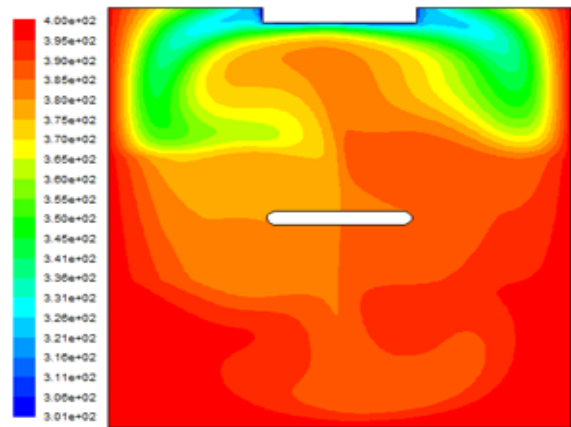


а) 20Т

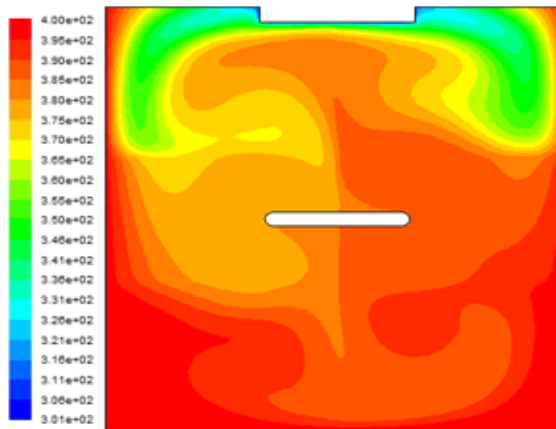
б) 100Т



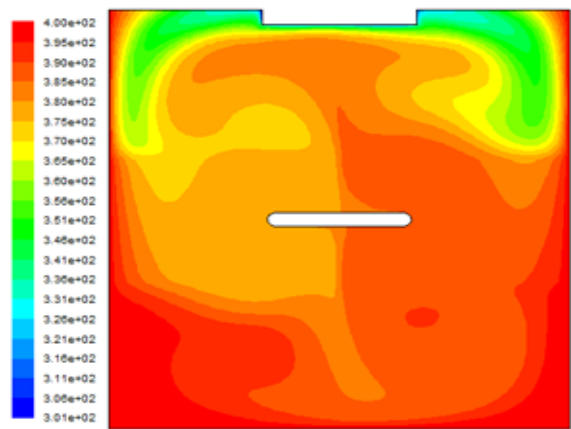
в) 200T



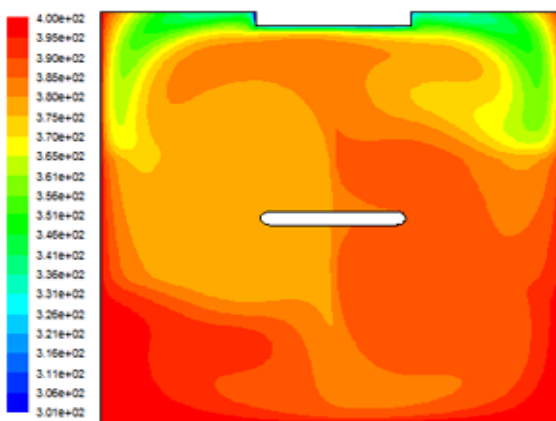
г) 300T



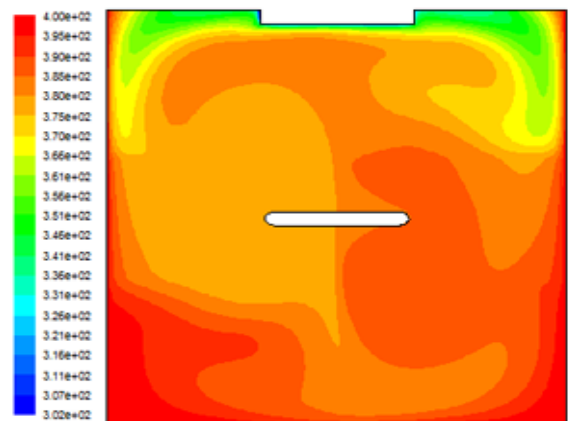
д) 400T



е) 500T



ж) 600T



з) 700T

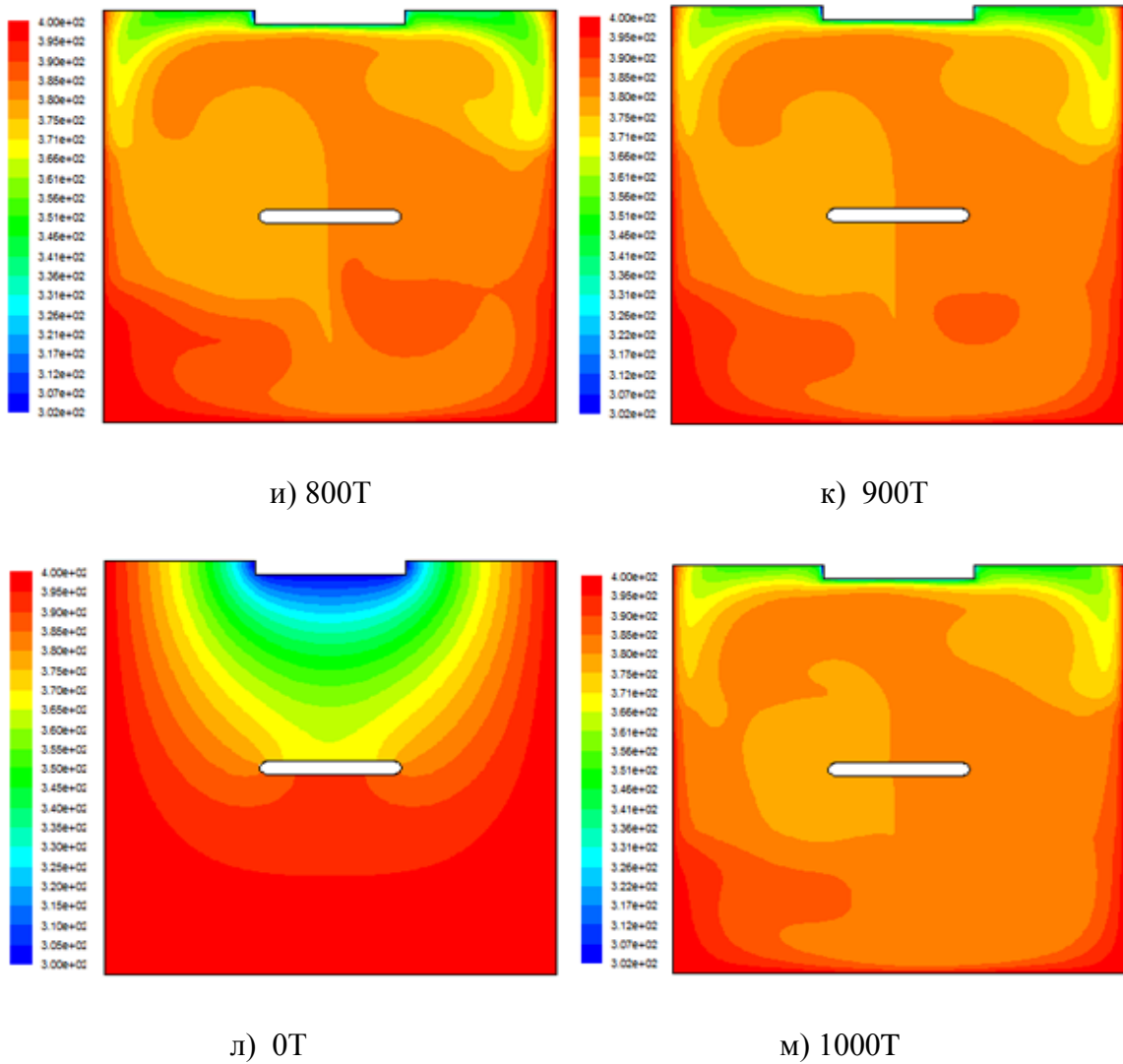


Рис. 4.43 Осреднённое поле температур. Осреднение производилось по одному периоду вибрации спустя соответственно а) $20T=1\text{с}$, б) $100T=5\text{с}$, в) $200T=10\text{с}$, г) $300T=15\text{с}$, д) $400T=20\text{с}$, е) $500T=25\text{с}$, ж) $600T=30\text{с}$, з) $700T=35\text{с}$ и) $800T=40\text{с}$, к) $900T=45\text{с}$, м) $1000T=50\text{с}$ после начала вычисления. Водно-глицериновая смесь $Pr=100$, $Re_{vibr}=1500$, $Gr=0$, $h/d=1.35$

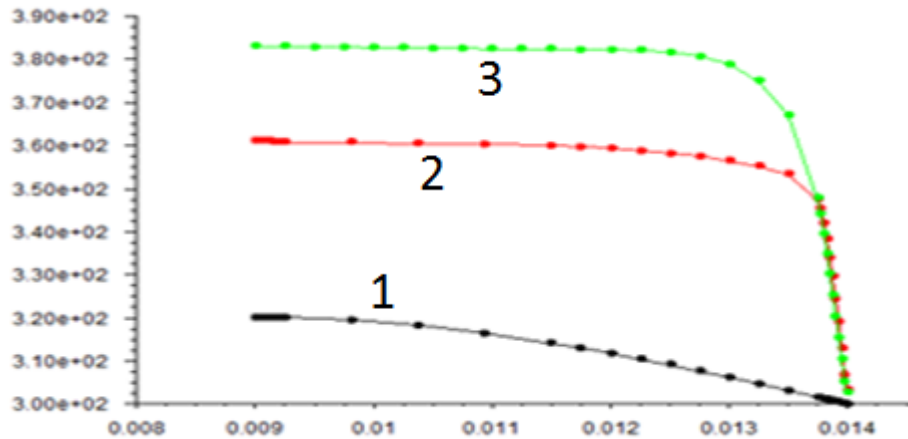


Рис. 4.44 Вертикальный профиль температуры. Зависимость температуры в центральном вертикальном сечении расчётной области от значения координаты y ($y=0.014$ м – соответствует поверхности кристалла). Линия 1 - без вибрации, линия 2 - с вибрацией при $h/d=0.5$, а линия 3 - с вибрацией при $h/d=1.35$ ($A=0.4$ мм, $F=20$ Гц). Водно-глицериновая смесь.

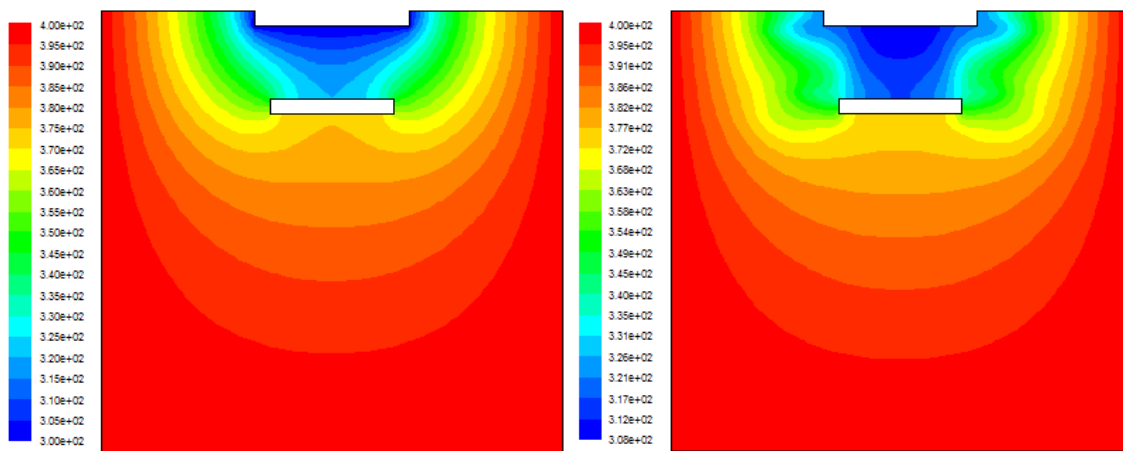
Из рис. 4.44 следует, что при вибрационном воздействии градиент температуры вблизи кристалла возрастает, а температурный пограничный слой уменьшается. Если произвести сравнение с рис. 4.40, то можно заключить, что при таких больших числах Прандтля как у водно-глицериновой смеси ($Pr=100$), удаление вибратора от поверхности кристалла не оказывает такого сильного уменьшения градиента температуры как это было, например, с расплавом нитрата натрия ($Pr=7$).

4.3.4. Вибрации кристалла и вибратора совместно с гравитационной конвекцией

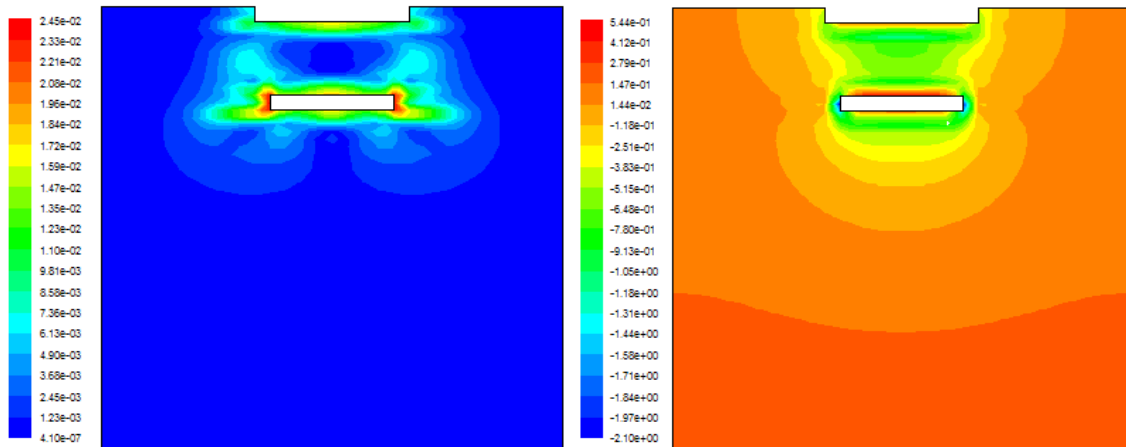
В данном параграфе рассмотрим случай совместных гармонических поступательных вибраций кристалла и погруженного вибратора с учетом конвекции. Вибрации кристалла и вибратора осуществляются по единому закону синхронно. Математическая постановка задачи и детали процедуры расчёта аналогичны, приведённым в предыдущем параграфе.

4.3.4.1. Результаты моделирования:

Совместное действие вибрации кристалла и погруженного вибратора $Re_{vibr} = 1500$ без конвекции представлено на рис. 4.45

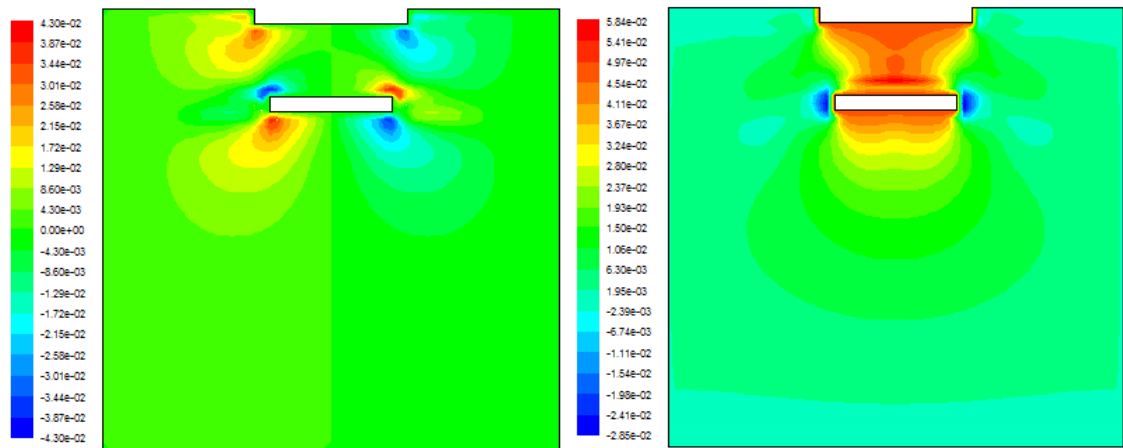


Поле температур:
слева без воздействия вибрации,
справа при вибрационном воздействии
осреднённое при $Re_{vibr} = 1500$.



Осреднённая магнитуа скорости.

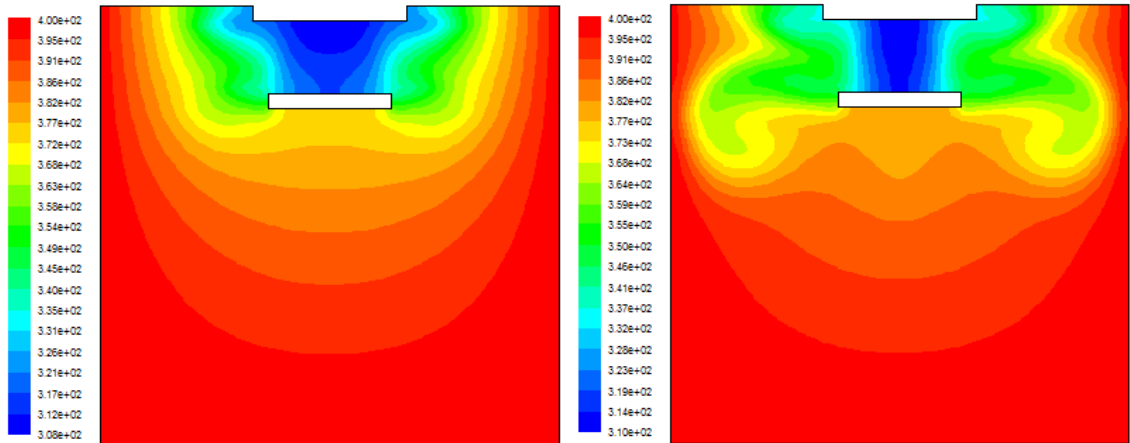
Осреднённое давление. $Re_{vibr} = 1500$.



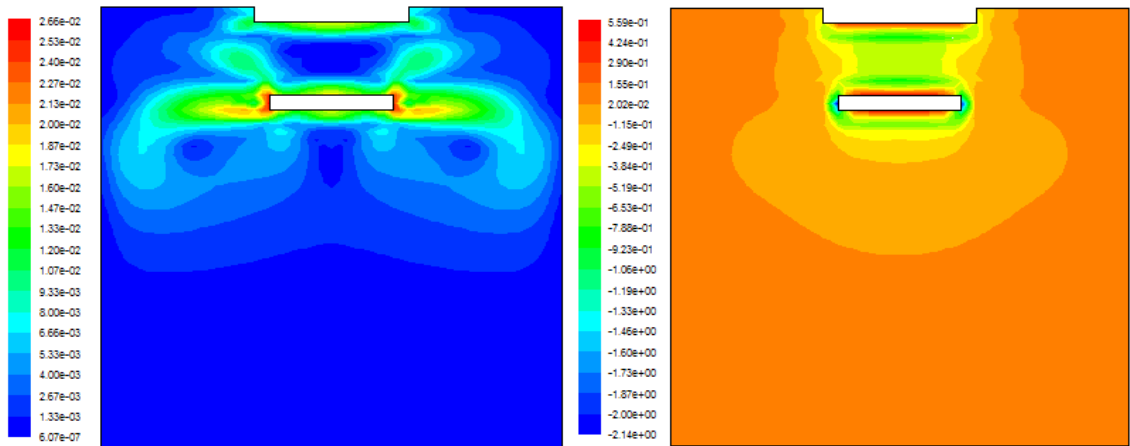
Мгновенные: горизонтальная скорость слева и вертикальная справа на момент установления квази-стационарного режима $Re_{vibr} = 1500$.

Рис. 4.45 Сравнение поля температур в покоящейся жидкости (теплопроводный режим) с осреднённым полем температур за счёт возникновения ОВТ при $Re_{vibr}=1500$, $Pr=7$. А также характеристики течения жидкости : скорость и давление.

Совместное действие вибрации кристалла и погруженного вибратора при наличии естественной конвекции $Re_{vibr} = 1500$, $Ra = 10^4$, $Pr=7$ представлено на рис.4.46.

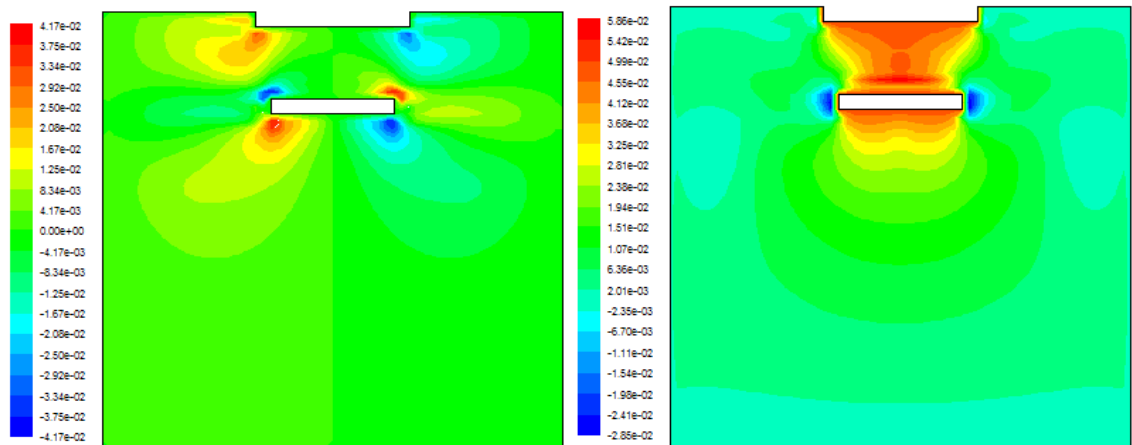


Поле температур: слева при воздействии вибрации, но без естественной конвекции, а справа при вибрационном воздействии и при естественной конвекции осреднённое в обоих случаях. $Re_{vibr} = 1500, Ra = 10^4$.



Осреднённая магнитуа скорости слева и осреднённое давление справа

$$Re_{vibr} = 1500, Ra = 10^4$$



Мгновенные: горизонтальная скорость слева и вертикальная справа на момент установления квази-стационарного режима $Re_{vibr} = 1500$, $Ra = 10^4$

Рис. 4.46 Сравнение поля температур при $Re_{vibr}=1500$, $Pr=7$ для случаев $Ra=0$ слева и $Ra=10^4$ справа. А также характеристики течения жидкости: скорость и давление.

Из результатов, представленных на рис.4.45 и рис. 4.46 можно сделать вывод, что естественная конвекция способствует дополнительному уменьшению толщины температурного пограничного слоя, образованного вибрациями.

4.3.5. Вращательно-качательные вибрации

4.3.5.1. Постановка задачи и математическая модель.

Рассматривается двумерная модель выращивания кристаллов методом Чохральского с вибрационным воздействием на расплав со стороны погруженного вибратора в виде вращательно-качательных вибраций на малый угол относительно его плоскости.

Моделируются вращательно качательные вибрационные воздействия в двумерной области. Схема исследуемой области показана на рис 4.47. Область заполнена расплавом ($Pr = 7$). Размер области: 3×3 см². Кристалл имеет диаметр 1 см и погружен в расплав на глубину 1 мм; Вибратор диаметром 2 см, толщиной 1мм находится на расстоянии 1.45 см от поверхности кристалла по центру расчётной области. Вибратор совершает вращения вокруг оси перпендикулярной расчётной области и проходящей через точку пересечения диагоналей вибратора. Вращательно-качательные происходят на угол с различными амплитудами A (радиан) и частотой $\theta = 20$ Гц по гармоническому закону (4.4):

$$\varphi = A \cdot \sin(2\pi\theta \cdot t), \quad (4.4)$$

где φ угол отклонения вибратора от начального (горизонтального) положения изображённого на рис. 4.47.

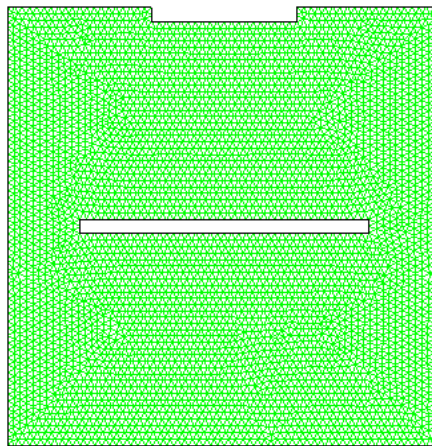


Рис. 4.47.

При решении задачи используется система уравнений Навье-Стокса (4.5):

$$\begin{aligned}
\frac{\partial V}{\partial t} + (V \nabla) V &= -\frac{\nabla P}{\rho} + \nu \Delta V \\
\operatorname{div} V &= 0 \\
\frac{\partial T}{\partial t} + (V \nabla) T &= a \Delta T
\end{aligned}
\tag{4.5}$$

где V – вектор скорости; P – давление; ρ – плотность; T – температура; a , ν – коэффициенты температуропроводности и кинематической вязкости.

Для скорости на всех границах, кроме свободной, ставится условие прилипания (на неподвижных стенках скорости равны нулю, на подвижной стенке скорость равна скорости стенки). На свободной поверхности для скорости поставлено условие проскальзывания.

Для температуры ставятся такие условия: тигель горячий и имеет постоянную температуру в 400К, кристалл холодный и имеет температуру в 300К. На свободной поверхности расплава, соединяющей кристалл с тиглем выполнено условие теплоизоляции $\frac{\partial T}{\partial y} = \frac{\partial T}{\partial n} = 0$, где n внешняя нормаль к свободной поверхности. На вибраторе $\frac{\partial T}{\partial n} = 0$, где n внешняя нормаль к погруженному вибратору.

В качестве начальных условий задаётся неподвижная жидкость с постоянной температурой в 300К.

Данная задача определяется следующими безразмерными числами Прандтля (Pr), вибрационным числом Рейнольдса $Re_{vibr} = \frac{2\pi\theta A H^2}{\nu}$.

4.3.5.2. Метод расчёта.

Расчеты проводились с помощью гидродинамической программы FLUENT 6 на равномерной треугольной сетке с шириной ячейки 0.5 мм. Модель течения жидкости – ламинарная. Модель вычисления – нестационарная с шагом по времени – 25 шагов за период вибрации, плюс 60 итераций на каждом временном шаге. Используется динамическая сетка, и файл с профилем вибраций. Для создания профилей колебания по заданному закону, была написана UDF (функция пользователя). FLUENT считывает UDF, которая представляет собой текстовый файл на языке C, компилирует её создавая библиотеку libudf. Далее происходит загрузка созданной библиотеки и последующие настройки производятся уже на вкладке Define->DynamicMesh. Для перестроения сетки используются встроенные во FLUENT методы Smoothing и Remeshing.

4.3.5.3. Результаты моделирования вращательно-качательных вибраций.

Численный расчет проводился до установления квази-стационарного режима колебаний, где и проводился анализ результатов.

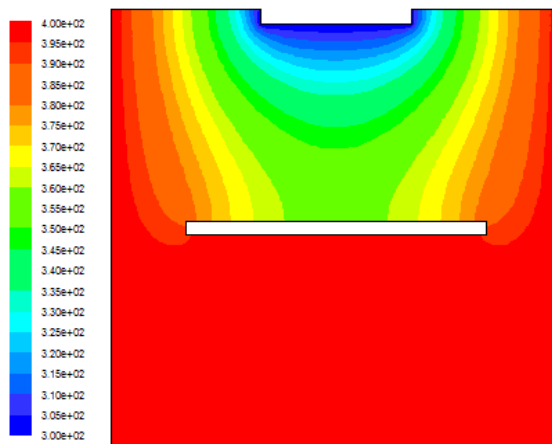


Рис. 4.48. Поле температур без вибраций.

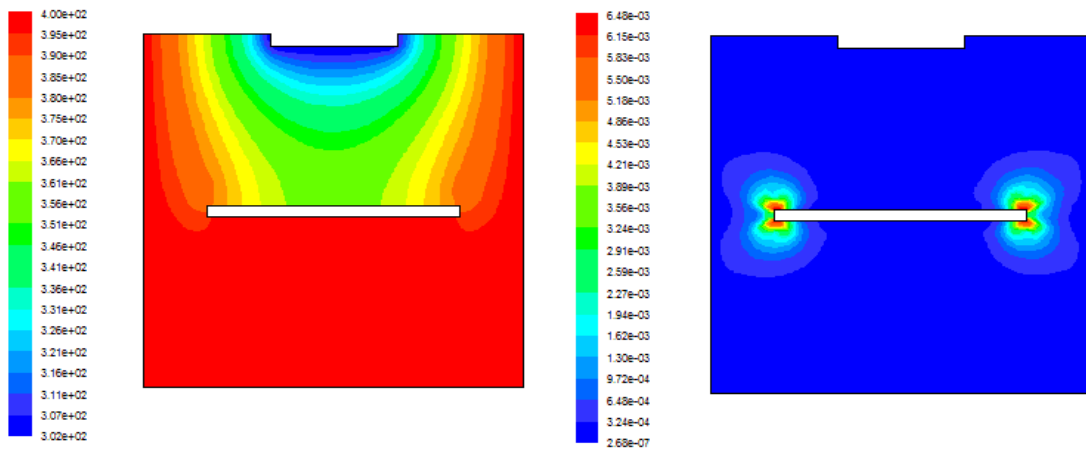


Рис. 4.49. Вращение : 1 градус, 20 Гц.

Слева поле температур, а справа модуль скорости. $Pr=7$.

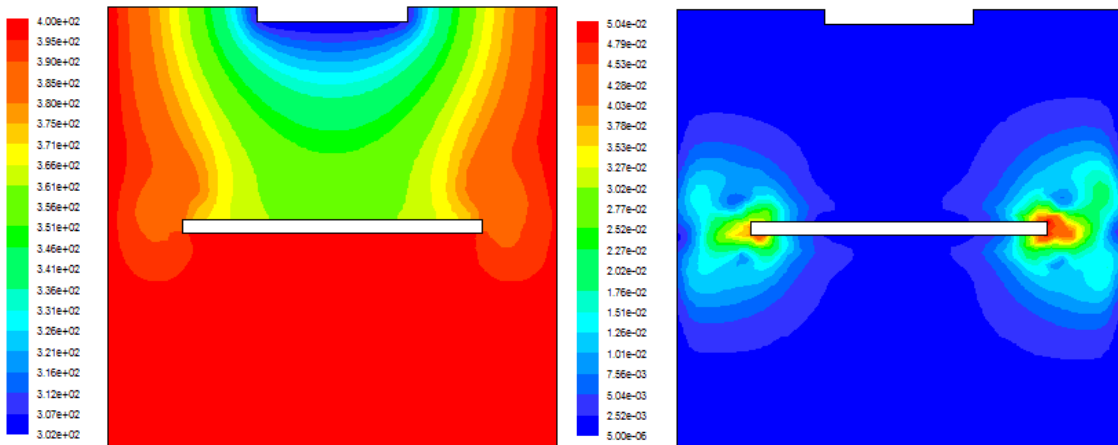


Рис. 4.50. Вращение : 5 градусов, 20 Гц.

Слева поле температур, а справа модуль скорости. $Pr=7$.

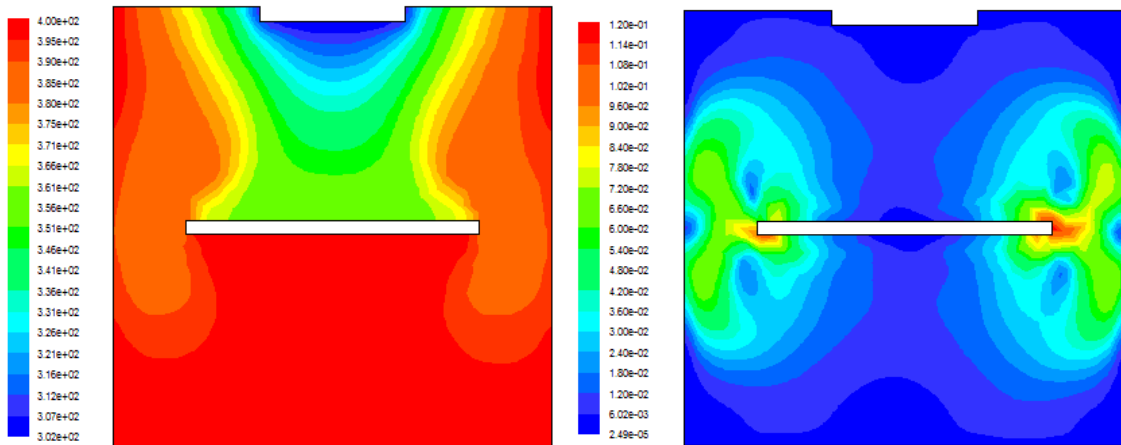


Рис. 4.51. Вращение : 10 градусов, 20 Гц.

Слева поле температур, а справа модуль скорости. $Pr=7$.

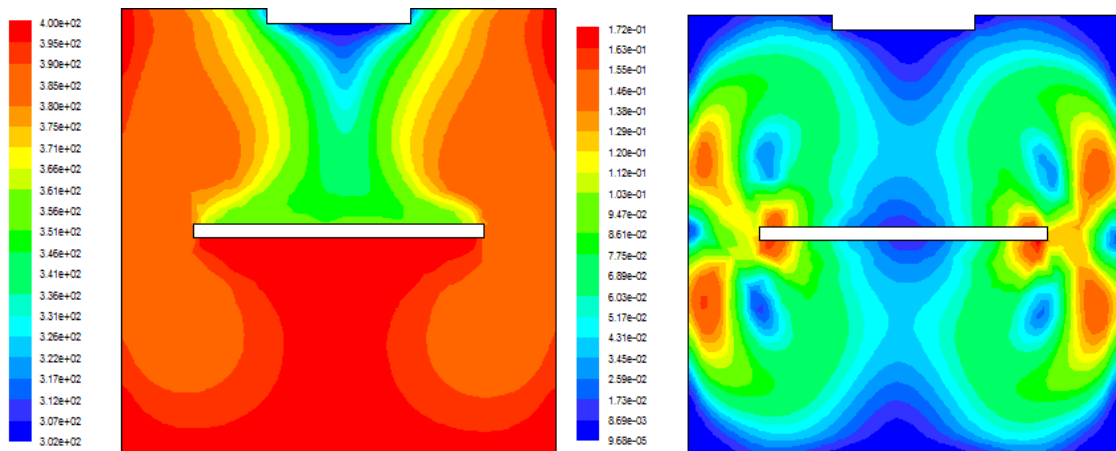


Рис. 4.52. Вращение : 15 градусов, 20 Гц.

Слева поле температур, а справа модуль скорости. $Pr=7$.

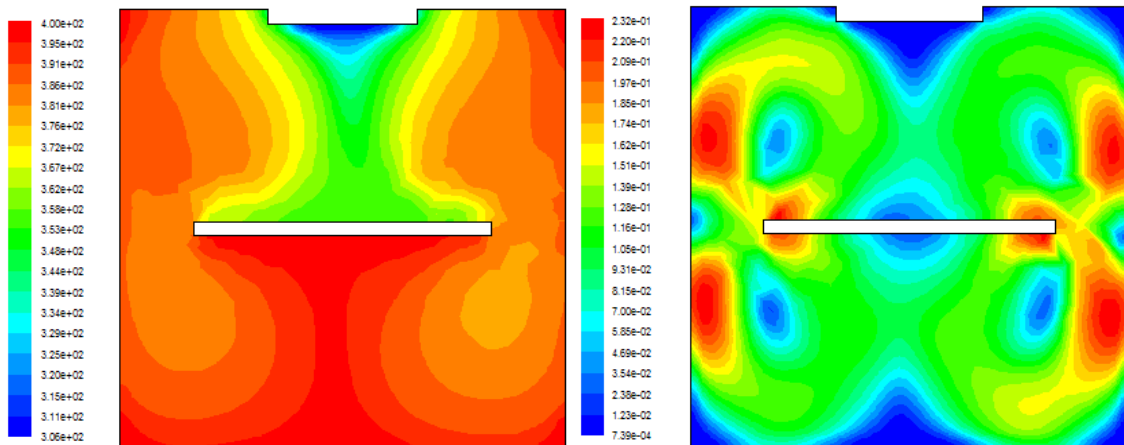


Рис. 4.53. Вращение : 20 градусов, 20 Гц.

Слева поле температур, а справа модуль скорости. $Pr=7$.

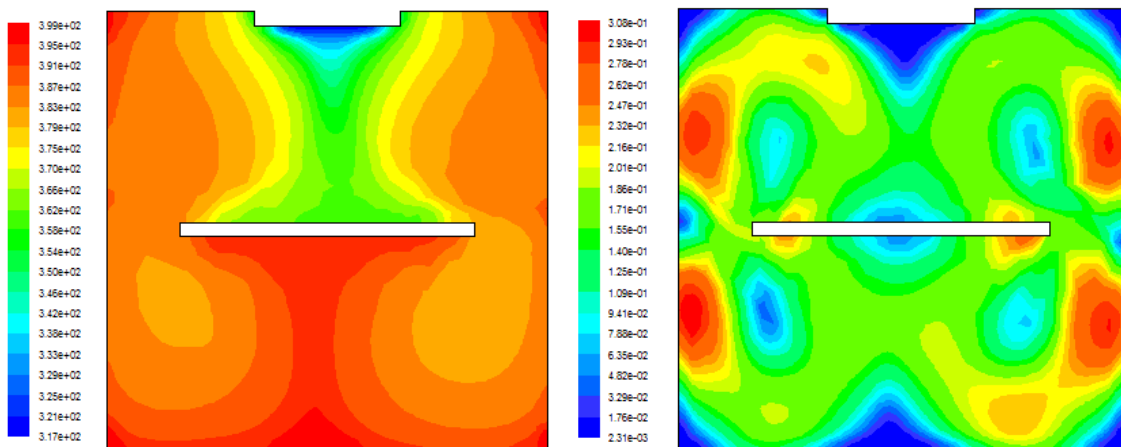


Рис. 4.54. Вращение : 25 градусов, 20 Гц.

Слева поле температур, а справа модуль скорости. $Pr=7$.

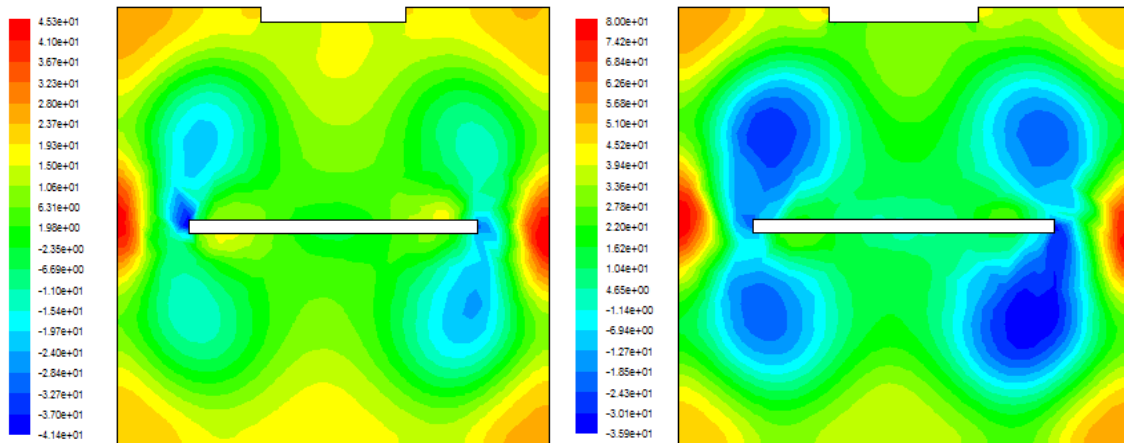


Рис. 4.55. Осреднённое давление :
слева 20 градусов – справа 25 градусов, 20 Гц.

Результаты расчётов показывают, что в структуре осреднённого вибрационного течения (ОВТ) в каждом из 4 углов расчётной области образуется по вихрю. Каждый из вихрей первую половину периода вращается в одну сторону, а вторую половину периода в противоположную сторону. Направления вращения вихрей согласованны. Вращательно-качательные вибрации погруженной пластины способствуют хорошей интенсификации течения и перемешиванию расплава.

Показано, что вибрации искажают поле температур, что важно учитывать при выращивании монокристаллов. Само присутствие погруженного теплоизолированного вибратора в расплаве вблизи кристалла уже искажает поле температур по сравнению со случаем, когда вибратор отсутствует. В дальнейшем может быть перспективным продолжение данных исследований для жидкостей с разными теплофизическими свойствами влияния вращательно-качательных воздействий на распределение температуры и активных и пассивных примесей с целью оптимального управления их распределением в расплаве.

4.4. Выводы по результатам моделирования метода Чохральского

Показано преобладающее влияние вибраций при наличии термокапиллярной и гравитационной конвекции расплава.

Для различных конфигураций расположения вибратора и свойств жидкостей показано уменьшение толщины пограничных слоев для разных вариантов вибрационного воздействия, что подтверждает общую закономерность данного факта.

Математическое моделирование вращательно-качательных вибраций погруженной пластины показало структуру полей движения и температуры и показало, что данное воздействие способствует очень хорошей интенсификации течения и перемешиванию расплава

В дальнейшем может быть перспективным продолжение исследований влияния вращательно-качательных воздействий на распределение температуры и примесей (активных и пассивных) с целью оптимального управления их распределением в расплаве.

5. Метод плавающей зоны

5.1. Постановка задачи

Метод зонной плавки заключается в том, что расплавляется узкая часть слитка (часто поликристаллического) и затем перемещением слитка или температурного поля происходит его перекристаллизация и получение монокристалла. Этот метод также используется и для очистки слитков от примесей при неоднократной перекристаллизации. Расплавленная часть слитка - плавающая зона граничит с твердым не расплавившимся слитком и атмосферой, и удерживается за счет сил вязкости и поверхностного натяжения. В поле силы тяжести форма расплавленной зоны отличается от формы твердого слитка. Существуют горизонтальные и вертикальные методы плавающей зоны. В данной работе мы будем рассматривать вертикальный метод плавающей зоны, то есть, когда вектор силы тяжести направлен параллельно оси слитка (и плавающей зоны). В этом случае форма расплавленной зоны имеет осевую симметрию. Часто для дополнительного перемешивания расплава и симметризации теплового поля нерасплавленные части слитка вращают в противоположные стороны.

Цель данных исследований заключается в выявлении влияния поступательных гармонических вибраций на гидродинамику и теплоперенос при выращивании монокристаллов. Для сокращения времени расчета, форма плавающей зоны рассчитывалась до проведения и оставалась постоянной при дальнейших расчетах гидродинамики и теплопереноса (влиянием гидродинамики на форму плавающей зоны пренебрегалось). Форма плавающей зоны рассчитывалась из уравнения

гидростатики для двухфазной среды жидкость-газ с учетом баланса сил давления, поверхностного натяжения и силы тяжести. Для определения границы раздела (формы плавающей зоны) использовался нестационарный VOF (Volume Of Fluid) метод повышенной точности с учетом угла смачивания и поверхностных сил по методу баланса поверхностных сил, используя метод Эйлера с неявным методом геометрической реконструкцией границы интерфейса на каждом шаге по времени [28]. Начальная форма плавающей зоны выбиралась цилиндрической с радиусом равным твердому слитку и высотой, определенной по изотерме плавления (но не более полутора диаметров) и конечная форма жидкой зоны определялась методом установления.

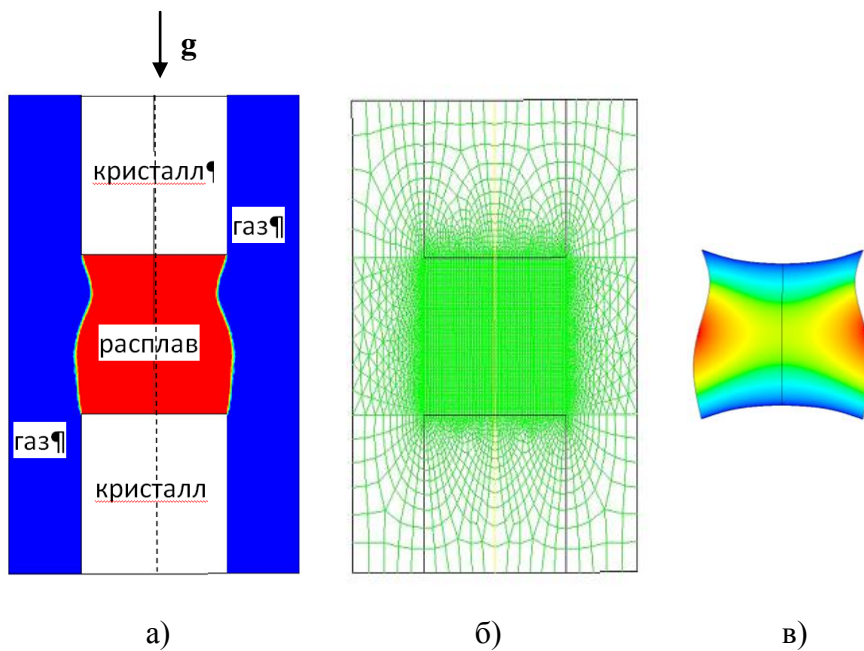


Рис. 5.1 Модель плавающей зоны

- а) - схема расчетной области, б) - сетка для расчета формы плавающей зоны, в) - рассчитанная форма плавающей зоны с начальным полем температуры.

Численное моделирование конвективного теплопереноса для модели плавающей зоны (рис. 5.1) было проведено на основе решения двумерных уравнений Навье-Стокса с учетом осевой симметрии. В данных расчетах рассматривалась только фиксированная жидкая зона, геометрия которой была определена предварительно, на основе расчетов уравнения равновесия при наличии силы тяжести и с учетом величины угла смачивания, для кремния ($Pr=0.01$). Фронт кристаллизации в данной модели задавался изотермой, равной температуре кристаллизации. В данной модели наличие mushy зоны [15] не предполагалось.

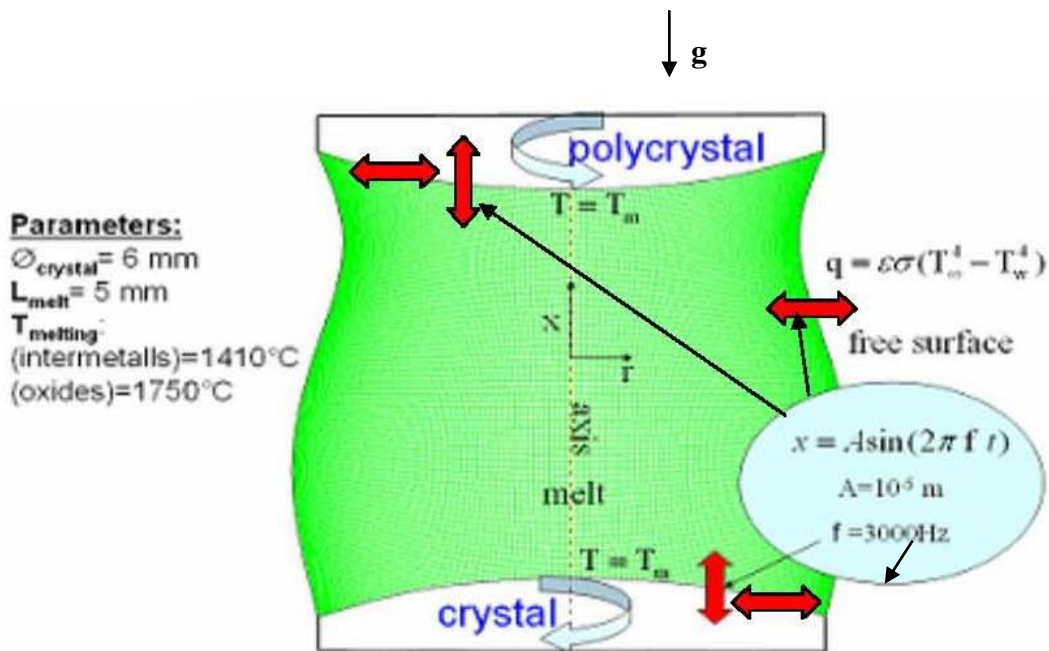


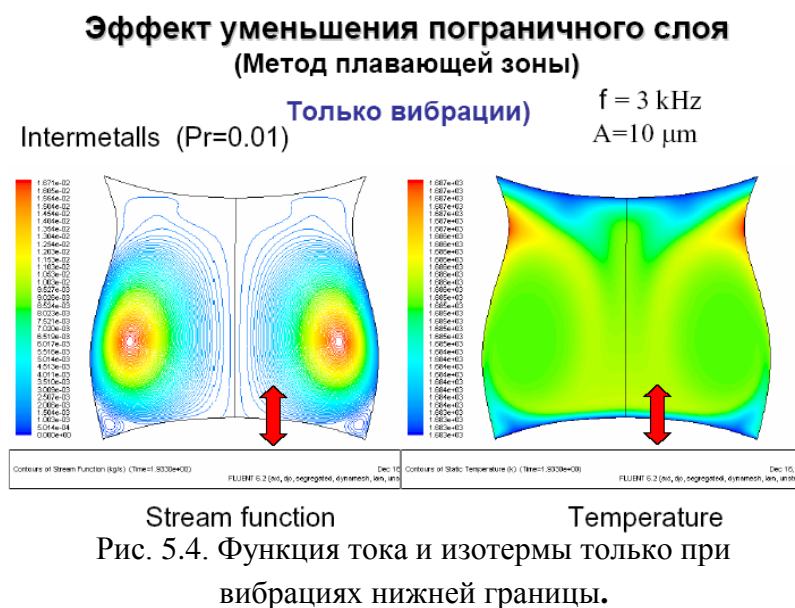
Рис.5.2. Математическая модель плавающей зоны

В данных расчетах рассматривались вибрации кристалла, поликристалла и свободной поверхности с частотой $f=3\text{КГц}$ и амплитудой $A=10\mu\text{m}$, скорость вращения $\pm 30\text{rpm}$, на боковой свободной поверхности

задавалось условие излучения (см. рис.2), температура для условия излучения задавалась температура $T_{\infty} = 2200\text{K}$, остальные теплофизические параметры брались для расплава кремния Si. Результаты были получены с помощью моделирования на основе численного решения уравнений Навье – Стокса и уравнения сохранения энергии в подвижной расчетной области с использованием динамически изменяемой сетки. Модель метода плавающей зоны учитывает следующие особенности данного метода: криволинейность свободной поверхности и фронтов кристаллизации (плавления), вращение, горизонтальные и вертикальные вибрации, термокапиллярную конвекцию и условия излучения на свободной поверхности..

5.2. Результаты расчетов

На рис. 5.2 показана расчетная область диаметром 6 мм и высотой 5 мм, сетка, граничные условия и параметры расчетов. На рис. 5.1в) представлено начальное невозмущенное поле температуры (теплопроводность и излучение) без вращения, без конвекции и без



вибраций.

Вибрационное воздействие способно существенно изменить температурное поле и привести в движение расплав. На рис. 5.4 показаны для установившегося режима функция тока (слева) и изотермы (справа) при воздействии вибраций на расплав кремния.

Результаты расчетов показали, что для зонной плавки для малых чисел Прандтля так же, как и для методов Бриджмена и Чохральского, вибрации существенно уменьшают толщину температурного пограничного слоя, т.е. увеличивают градиент температуры около кристалла. Ранее авторы показывали этот эффект для расплавов с числом Прандтля $Pr > 1$, и указывали на то, что при амплитудах $A < 100 \mu\text{m}$ и частотах до $f < 100 \text{ Гц}$ 'этот эффект не проявляется для расплавов полупроводников с малыми числами Прандтля.

Интенсивность течения расплава кремния при различных видах конвекции (Метод плавающей зоны)

Тип конвекции	Максимум функции тока [g/s]
Вращение	$4 \cdot 10^{-4} - 2.5 \cdot 10^{-3}$
Естественная конвекция	$3 \cdot 10^{-4}$
Термокапиллярная конвекция	0.4
Вибрации (3 kHz/ 10 μm)	16
Диапазон	0.4 – 16

Таблица 5.1. Сравнение максимальных значений функции тока для течений расплава, вызванного: вращением, естественной конвекцией, конвекцией Марангони и вибрацией.

Данные расчеты также подтвердили предположения автора [16-20] о том, что эффект уменьшения толщины пограничных слоев существует и для $Pr=0.01$, но при более больших вибрационных числах Рейнольдса (частотах или амплитудах). Кроме указанных расчетов также были проведены расчеты влияния на теплоперенос и течение расплава отдельных факторов: тепловой конвекции, конвекции Марангони, вращения кристалла и поликристалла.

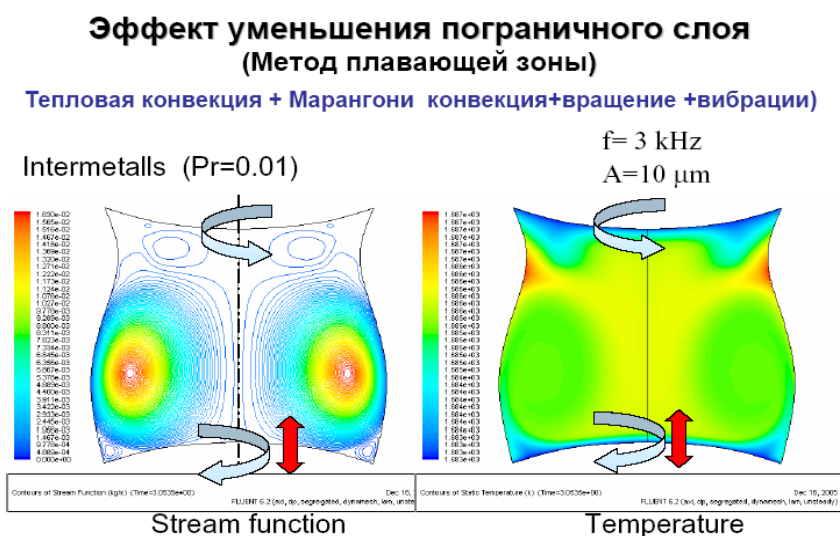


Рис. 5.5. Функция тока и изотермы при суперпозиции вибраций с вращениями, естественной и термокапиллярной конвекциями для расплава кремния.

На рис. 5.5 показаны изолинии функции тока и изотермы для случая совместного действия тепловой, термокапиллярной конвекций, вращения и вибраций. Анализ численных результатов показал, что, при указанных параметрах, наиболее интенсивное течение вызывается вибрацией, затем по интенсивности идут конвекция Марангони, тепловая гравитационная конвекция и вращение. Данные результаты представлены в Таблице 5.1, где приведены максимальные значения функции тока для разных видов течения.

5.2.1. Вертикальные вибрации.

На рис.5.6 показано влияние вибраций на вертикальные профили температуры (1- без вибраций 2- с вибрациями).

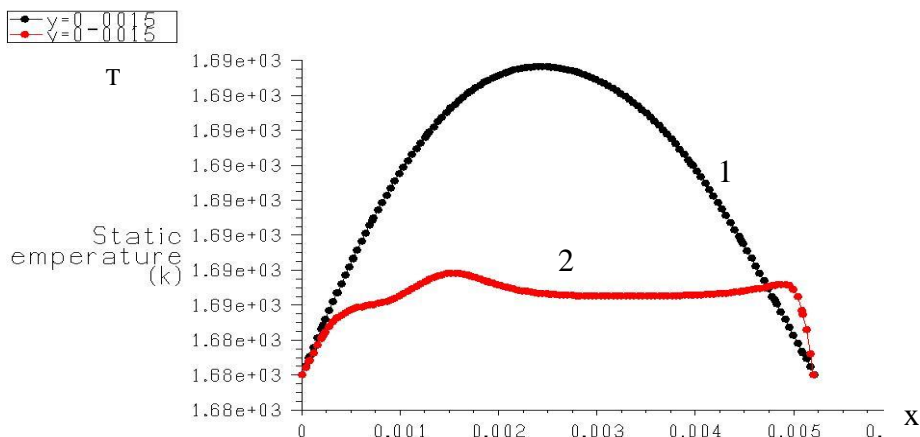


Рис. 5.6. Профили температуры в вертикальном сечении ($r=0.005\text{м}$):
1 – без вибраций, термокапиллярная и гравитационная конвекция,
2 – вибрации, с вращением, с термокапиллярной и гравитационной конвекциями,

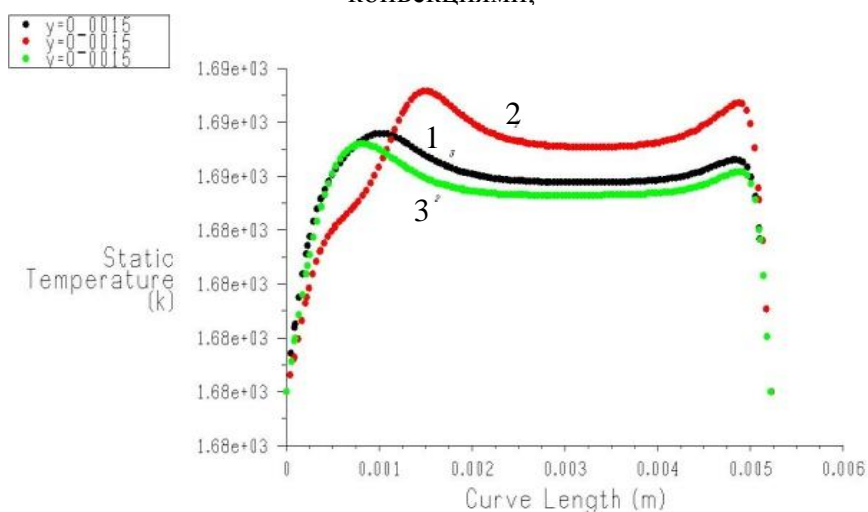


Рис. 5.7 Профили температуры в вертикальном сечении ($r=0.005\text{м}$) при вертикальных вибрациях: 1- кристалла, 2 – кристалла и поликристалла, 3 – кристалла, поликристалла и свободной поверхности).

Результаты, представленные на рис.5.6-5.7, показывают, что вертикальные вибрации изменяют толщину температурного пограничного

слоя и наиболее действенными являются вибрации кристалла и поликристалла.

5.2.2. Горизонтальные вибрации.

Численные расчеты показали, что горизонтальные вибрации не существенно влияют на градиент температуры у фронта кристаллизации и изменяют температурное поле в расплаве в сравнении со случаем без вибраций. На рис.5.8 показаны профили температуры при горизонтальных вибрациях: линия 1- при вибрации кристалла, линия 2 – при вибрации свободной поверхности.

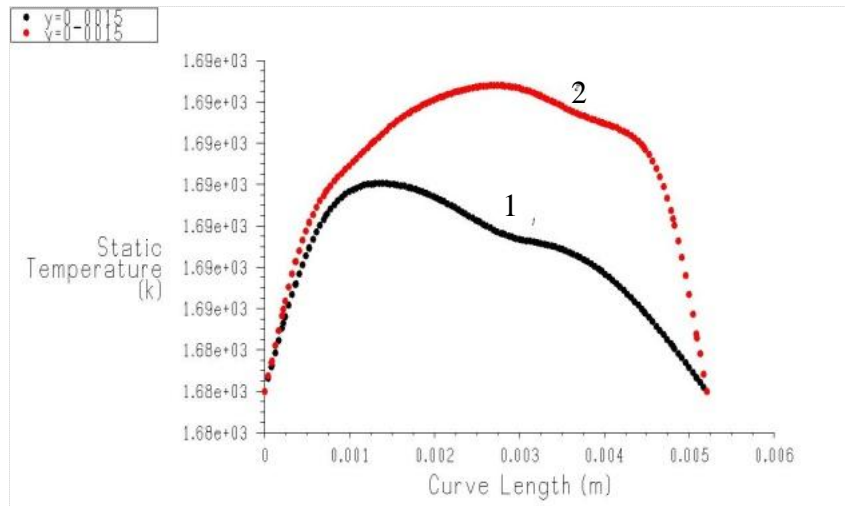


Рис. 5.8 Профили температуры при горизонтальных вибрациях (1- кристалла, 2 – свободной поверхности).

5.2.3. Вертикальные и горизонтальные вибрации.

Был рассмотрен случай одновременного воздействия вертикальных вибрациях кристалла и поликристалла и горизонтальных вибраций свободной поверхности. На рис. 5.9а показан профиль температуры в вертикальном сечении ($r=0.005\text{м}$), а на рис.5.9б изолинии функции тока. В

данном случае структура течения становится двухвихревой, что сказывается на профиле температуры.

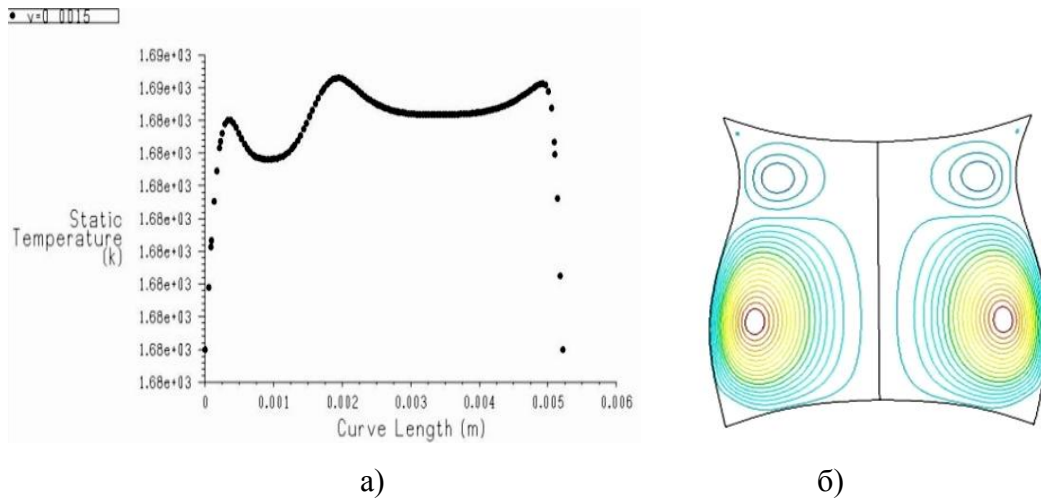


Рис. 5.9 Влияние вертикальных вибраций кристалла и поликристалла, и горизонтальных вибраций свободной поверхности:

а) вертикальный профиль температуры б) – изолинии функции тока

5.3. Выводы по результатам моделирования зонной плавки.

Анализ численных результатов показал, что высокочастотные вибрации с малыми амплитудами могут быть доминирующим источником перемешивания расплава по сравнению с существующими конвективными течениями.

Вибрации могут уменьшать температурный пограничный слой и, как следствие, увеличивать температурный градиент на фронте кристаллизации.

Наиболее эффективными, с точки зрения уменьшения температурных пограничных слоев у фронтов кристаллизации, являются вертикальные вибрации.

6. Выводы

Математическое моделирование показало существенное влияние расположения, и формы вибратора на распределение примеси в кристалле, которые необходимо учитывать при определении оптимальных вибрационных режимов.

Численно показано, что вибрации могут уменьшать ширину температурного пограничного слоя и, как следствие, увеличивать температурный градиент на фронте кристаллизации. Это может интенсифицировать теплообмен около фронта кристаллизации, а также скорость роста кристаллов.

Расчеты показали, что при существенном влиянии вибраций на пограничный фронт они могут практически не сказываться на колебаниях температуры у фронта кристаллизации. Например, для расплавов с числом Прандтля больше единицы, изменения температуры, вызванные вибрационным воздействием, за один период колебаний составляют не более одного процента.

Представлены мгновенные и осредненные по времени характеристики течения и теплопереноса, показывающие влияние гармонических вибраций на течение жидкости (расплава) в сочетании с различными конвективными течениями.

Показано влияние вращательно-крутильных вибраций погруженной пластины на динамику и теплоперенос жидкости.

Для метода плавающей зоны показано, что для малых чисел Прандтля ($Pr=0.01$) вибрации также могут уменьшать температурный пограничный слой и увеличивать температурный градиент на фронте кристаллизации но при больших частотах вибрационного воздействия.

Анализ численных результатов показал, что высокочастотные вибрации с малыми амплитудами могут быть доминирующим источником перемешивания расплава по сравнению с существующими конвективными течениями.

Выполненные исследования по анализу конвективного теплопереноса при вертикальных, горизонтальных и обоюдных вибрационных воздействиях на расплав применительно к выращиванию монокристаллов методами Бриджмена, Чохральского и плавающей зоны могут быть использованы на практике.

Показано уменьшение толщин пограничных слоев для разных вариантов вибрационного воздействия, разных конфигураций расположения вибратора, свойств жидкостей, что подтверждает общую закономерность данного факта.

Исследование влияния вращательно-качательных воздействий на распределение температуры и примесей (активных и пассивных) с целью оптимального управления их распределением в расплаве может быть перспективным в дальнейшем.

Благодарность.

Авторы благодарны профессорам Н.Г. Бураго, Е.В. Жарикову и И.Х. Аветисову за помощь, консультации и полезные советы при проведении данной работы.

Литература

1. M, Faraday, "On a Peculiar Class of Acoustical Figures", Phil. Trans, Roy, Soc., 1831, 121, 299-340.
2. Lord Rayleigh, On the Circulation of Air observed in Kundt's Tubes, and on some Allied Acoustical Problems, Transactions of the Royal Society of London, 175 (1), 1883, pp 1-21.
3. .Z.Gershuni and D.V.Lubimov. Termal vibrational convection. John Willey&Sons Ltd., G 1998, 357p.
4. Г.З. Гершуни, Е.М. Жуховицкий, А.А. Непомнящий. Устойчивость конвективных течений. Москва, «Наука», 1989, 320с.
5. А.А. Иванова. Устойчивость свободно-конвективного течения в горизонтальном цилиндрическом слое в вибрационном поле. Конвективные течения. Пермь, 1989, с.37-44.
6. С.М. Зеньковская, И.Б. Симоненко, О влиянии вибраций высокой частоты на возникновение конвекции. Изв. АН СССР, МЖГ, 1966, №5, с51-55.
7. А.А. Иванова. Устойчивость свободно-конвективного течения в горизонтальном цилиндрическом слое в вибрационном поле. Конвективные течения. Пермь, 1989, с.37-44.
8. Lan C.W. Effects of axial vibration on vertical zone-melting processing // Interna-tional Jounal of Heat and Mass Transfer. 2000. V. 43. P. 1987-1997.
9. Витовский Б.В. Повышение скорости роста кристалла подачей на него колебаний звуковой частоты. // Труды ИКАН СССР. 1955. выпуск 11. С. 1.

10. В.Г. Козлов. О вибрационной тепловой конвекции в полости совершающей высокочастотные вращательные качания. Изв. АН СССР, № 3, с.138-144.
11. Zharikov E.V., Prihod'ko L.V., Storozhev N.R. Vibrational convection during the growth of crystals // *Growth of Crystals*. 1993. V. 19. P. 71-81.
12. Аветисов И.Х., Жариков Е.В., Зиновьев А.Ю., Садовский А.П. Новый метод управления тепломассопереносом в расплаве при выращивании кристаллов по Чохральскому // *Доклады Академии Наук*. 2009. Т. 428. № 2. С. 177-179.
13. Avetissov I., Sadovskiy A., Belov S., Khomyakov A., Rekunov K., Kostikov V., Sukhanova E. Thermodynamic features of axial vibrational control technique for crystal growth from the melt // *CrystEngComm* 2013. V. 15. P. 2213-2219.
14. A. V. Zyuzgin, G. F. Putin, and A. F. Kharisov. Ground Modeling of Thermovibrational Convection in Real Weightlessness // *Fluid Dynamics*, 2007, Vol. 42, No. 3, pp. 354–361
15. А.И. Федюшкин. Моделирование гидродинамики и тепломассообмена при выращивании кристаллов с учетом прикристаллизационной (mushy) зоны без и с вибрационным воздействием на расплав. Обзор. - Препринт ИПМех РАН, № 1074, Москва, 2014, 35с .
16. A. Fedyushkin. The gravitation, rotation and vibration - controlling factors of the convection and heat – mass transfer. Proc. of 4th ICCHMT, Paris, FRANCE, 2005

17. A. Fedyushkin, N. Bourago, V. Polezhaev and E. Zharikov. The influence of vibration on hydrodynamics and heat-mass transfer during crystal growth. *Crystal Growth* v. 275, 2005, p. e1557-e1563
18. A. Fedyushkin, N. Bourago, V. Polezhaev and E. Zharikov. The influence of vibration on hydrodynamics and heat-mass transfer during crystal growth. *J. Crystal Growth* v. 275, 2005, p. e1557-e1563
19. Федюшкин А.И. Конвекция, вращение и вибрация - управляющие факторы при выращивании монокристаллов. VIII съезд по теоретической и прикладной механике. Екатеринбург УрО РАН 2001, стр. 576.
20. Федюшкин А.И. Гидродинамика и тепломассоперенос при вибрационных воздействиях на расплав. Сборник трудов XIX Международной конференции « Математические методы в технике и технологиях», Т.3, Воронеж, 2006, стр. 29-34.
21. N.G.Bourago, A.I.Fedyushkin, V.I.Polezhaev. Dopant distribution in crystals growth by the submerged heater method under steady and oscillatory rotation. *Adv. Space Res.* Vol.24, No 10, pp. 1245-1250, 1999.
22. N.G.Bourago, A.I.Fedyushkin 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
23. А.И. Федюшкин, Н.Г. Бураго, В.И. Полежаев, Е.В. Жариков "Влияние вибраций на гидродинамику и тепло-массообмен в расплаве при выращивании кристаллов методом Бриджмена". Сборник трудов VII Российского симпозиума "Механика невесомости. Итоги и

перспективы фундаментальных исследований гравитационно-чувствительных систем", Москва, ИПМ РАН, 2001, стр.365-392.

24. Полежаев В.И., Белло М.С., Вerezуб Н.А., Дубовик К.Г., Лебедев А.П., Никитин С.А., Павловский Д.С., Федюшкин А.И. Конвективные процессы в невесомости. - М.: Наука, 1991, 240с.
25. А.Ф. Пшеничников, А.Ю. Пинягин, В.И. Полежаев, А.И. Федюшкин, Г.Ф. Шайдуров. Термоконцентрационная конвекция в прямоугольной области при боковых потоках тепла и массы. Препринт, УНЦ АН СССР, Свердловск, 1985, 54с.
26. А.И. Федюшкин. Исследование матричного метода решения уравнений конвекции. Комплекс программ «МАРЕНА». Препринт ИПМ АН СССР, № 471, Москва, 1990, 32с.
27. Bourago N.G. Numerical methods for non-linear processes in elastic plastic media. In: "Lectures of FEM-94 Seminar", Chalmers Univ. Techn., Struct.Mech.Dept., Publ:1994.1, Gothenberg, pp. 1-15.
28. Manual of Ansys-FLUENT 15. User's Guides, ANSYS-Fluent.Inc., 2013.
29. Иванов К.А. Верификация программного кода для расчёта поля температур, М., Электронная техника, Серия 2, Полупроводниковые приборы, Выпуск 1 (232), 2014.
30. Иванов К.А., Зубков А.М., Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2013660267 "Программа трёхмерного моделирования тепло- и массообмена в радиаторах, состоящих из набора прямоугольных параллелепипедов." Заявка № 2013617938. Дата поступления 04 сентября 2013г. Дата

государственной регистрации в Реестре программ для ЭВМ 30 октября 2013г.

31. I. Sezai. SIMPLE method for the solution of incompressible flows on non-staggered grids. Eastern Mediterranean University, 2011.
32. Патанкар С.В. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. // М.: Энергоатомиздат, 1984. – 152 с.
33. Полежаев В.И. и др. Математическое моделирование конвективного тепло и массообмена на основе уравнений Навье-Стокса, М., Наука, 1987, 271с.
34. В.В. Мареев, Е.Н. Станкова. Многосеточные методы. Введение в стандартные методы. Санкт-Петербург 2012, 60с.
35. Голубев А.А., Дерюгин Ю.Н., Зеленский Д.К., Козелков А.С., Лашкин С. В., Силаев Д.П., Симонов П.Г. Пакет программ Логос. Алгебраический многосеточный метод решения СЛАУ для задач гидродинамики. ФГУП «Российский федеральный ядерный центр - Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики». 2012, 35с.

Основные обозначения, термины, функции

σ - коэффициент поверхностного натяжения на границе раздела фаз Н/м.

A – амплитуда колебаний, [м] или [мкм]

f – частота колебаний, [Гц]

T – температура, [К]

V – скорость, [м/с] или [мм/с]

V_x, V_y, V_z – компоненты вектора скорости в декартовой системе координат, [м/с] или [мм/с]

V_x, V_r – осевая и радиальная компоненты вектора скорости в цилиндрической системе координат, [м/с] или [мм/с]

u, v - еще одно обозначение для горизонтальной и вертикальной компоненты скорости в декартовой прямоугольной системе координат [м/с],

U – масштаб скорости, [м/с]

L – масштаб длины, [м]

δP или p' - поправка давления [Па] фигурирующая в семействе SIMPLE подобных алгоритмов С.Патанкара и Б. Сполдинга [31, 32],

P - давление [Па],

\mathbf{g} - вектор ускорения силы тяжести [m/c^2],

ρ – плотность, [кг/м³] или [г/см³]

μ – динамическая вязкость, [Па·с]

$\nu = \mu / \rho$ – кинематическая вязкость, [м²/с]

λ (или k) – теплопроводность, [Вт/(м·К)]

λ_0 – относительная безразмерная теплопроводность

c_p – удельная теплоемкость при постоянном давлении, [Дж/(кг·К)]

$a = \frac{\kappa}{c_p \rho}$ – температуропроводность [м²/с]

K – проницаемость пористой среды [м²]

$Re = UL / \nu$ – безразмерное число Рейнольдса

$Pr = \nu \rho c_p / \lambda$ – безразмерное число Прандтля

$Sc = \nu / D$ – безразмерное число Шмидта

$Gr = g \beta \Delta T H^3 / \nu^2$ – безразмерное число Грасгофа

$Ra = Pr Gr$ – безразмерное число Рэлея

ψ – функция тока, [м²/с], в декартовой системе координат:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = v_y \quad \frac{\partial \psi}{\partial y} = -v_x$$

в цилиндрической системе координат:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = -r v_r \quad \frac{\partial \psi}{\partial r} = r v_x$$

∇ - символический оператор Гамильтона "набла" в декартовой прямоугольной системе координат $\vec{i} \cdot \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \cdot \frac{\partial}{\partial y}$, здесь \vec{i} и \vec{j} - орты осей прямоугольной системы координат.

div - оператор дивергенции (скалярное произведение оператора "набла" на векторную величину)

rot - ротор (векторное произведение оператора "набла" на векторную величину).

ω - в зависимости от контекста либо круговая частота поступательного движения вибратора : $T = \frac{2\pi}{\omega} = \frac{1}{f}$, $\omega = 2\pi f$, либо завихренность при записи

системы уравнений Навье-Стокса в переменных вихрь-функция тока

$$\omega = \text{rot} \vec{V} \Big|_z = \frac{\partial V_y}{\partial x} - \frac{\partial V_x}{\partial y} \quad [1/\text{с}].$$

Приложение 1

Алгоритм SIMPLE (С. Патанкар и Б. Сполдинг [32]), выглядит следующим образом:

1. Задается приближенное поле давления p^* .
2. Решаются дискретные аналоги уравнений сохранения импульса в проекциях на оси декартовой прямоугольной системы координат для получения промежуточного поля скоростей u^* и v^* :

$$a_e u_e^* = \sum a_{nb} u_{nb}^* + b + (p_p^* - p_E^*) \delta y$$

$$a_n v_n^* = \sum a_{nb} v_{nb}^* + b + (p_p^* - p_N^*) \delta x$$

Отметим что в матрицы данных линейных алгебраических уравнений вводится нижняя релаксация с коэффициентом 0.7.

3. Решаются дискретные аналоги преобразованного уравнения неразрывности для нахождения поправки к давлению p' , в правую часть подставляется V^* .

4. Рассчитывается давление p путем сложения p' и p^* . Точнее к P добавляется лишь часть δP , а именно $P := P + \alpha_p \delta P$, где $\alpha_p = 0.3$.

5. Рассчитываются u и v с учетом соответствующих значений промежуточного поля скоростей с помощью формул для поправки скорости:

$$u_e = u_e^* + d_e (p'_p - p'_E)$$

$$v_n = v_n^* + d_n (p'_p - p'_N)$$

6. Представляется скорректированное давления p как новое p^* .

7. Решение уравнений переноса для других скаляров : температура, концентрация, пользовательские скаляры. Возвращение к пункту 2 и повторение всей процедуры до тех пор, пока не будет получено сходящееся решение.

Приложение 2

Для задания вибраций в программе ANSYS Fluent использовался профиль вибраций (профайл) и динамическая сетка. Для создания профайла использовалась следующая программа на языке Паскаль:

```

program prof_wri_Inx86;
(* компилируется в Free Pascal Compiler *)
var
  A, nu, phi0, step, sum : real;
  filename, profname : string;
itime,i      : word;
iplane      : byte;
  F          : text;
function f_calk(var A,nu,t,phi0 : real): real;
begin
f_calk:=A*sin(2*3.141*nu*t+phi0)-A*sin(phi0);
end;
begin
writeln('This program create profile for FLUENT');
writeln('in case of vibrations under the law: ');
writeln(' A*sin(2*PI*nu*t+phi0)-A*sin(phi0) ');

  write('enter a file name: ');
readln(filename);
  write('enter the profile name: ');
readln(profname);
  write('enter amplitude of fluctuations A[m]: ');

```



```

readln(A);
  write('enter frequency of fluctuations nu[1/c]: ');
readln(nu);
  write('enter an initial phase phi0: ');
readln(phi0);
  write('enter a plane of fluctuations <1-the horizontal, 2-the vertical>:');
readln(iplane);
  write('enter splitting of an interval of time during fluctuations: ');
readln(itime);

  assign(F,filename);
  rewrite(F);
itime:=itime+1;
  write(F,'( ');
  write(F,profname);
  write(F,' transient ');
  write(F,itime);
writeln(F,' 1)');
writeln(F,'( time)');
  step:=1/nu;
  step:=step/(itime-1);
  sum:=0.0000000000;
  for i:=1 to itime do
  begin
    write(F,sum);
    write(F,' ');

```

```
        sum:=sum+step;
    end;
writeln(F,')');

    if iplane=1 then writeln(F,'(x')
    else writeln(F,'(y)');

    sum:=0.0000000000;
    for i:=1 to itime do
    begin
        write(F,f_calk(A,nu,sum,phi0));
        write(F,' ');
        sum:=sum+step;
    end;
    write(F,')');
close(F);
end.
```

Профайл, созданный с помощью данной программы, может быть использован и в параллельной версии FLUENT.

Федюшкин Алексей Иванович
Иванов Кирилл Андреевич

Гидродинамика и тепломассообмен при вибрационных
воздействиях на расплав в процессах выращивания монокристаллов



Подписано к печати 02.12.2014

Заказ № 39–2014

Тираж 50 экз.

Отпечатано в Федеральном Государственном Бюджетном Учреждении науки
Институте проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН
119526, Москва, пр-т Вернадского, 101, корп. 1