

плоскопараллельному случаю. В кольцевом же лотке неоднородность поля скорости связана не только с турбулизацией жидкости движущимся экраном, но и наличием развитого радиального движения [7]. Поэтому для правильного описания докритического течения в кольцевом лотке необходима более подробная информация о структуре потока. В сверхкритическом случае геометрия течения менее существенна, так как неоднородность потока, обусловленная генерацией крупных вихрей в слое сдвига, доминирует над неоднородностями другого происхождения.

Гипотеза об однородности по вертикали профилей средней скорости и плотности в верхнем слое — достаточно грубое приближение. В действительности хорошо перемешанный слой отделен от покоящейся жидкости прослойкой, толщина которой может составить значительную часть верхнего слоя. Тем не менее рассмотренная выше модель дает не только качественное, но и количественное совпадение с результатами наблюдений. Этот факт, по-видимому, можно объяснить тем, что переходный слой динамически нейтрален, т. е. в этом слое выделявшаяся за счет перестройки потока кинетическая энергия пульсационного движения расходуется на преодоление сил плавучести. Поэтому величина q^2 в (8) представляет разность кинетической и потенциальной энергий течения, обусловленных неоднородностью потока, т. е. «свободную» энергию вихрей, не компенсированную возрастанием плавучести. Таким образом, уравнения (8) формально описывают эволюцию верхнего слоя с учетом переходной зоны, если только под величиной h понимать расстояние от поверхности жидкости до середины прослойки. Учет диссипации, параметризованной выражением вида $\varepsilon = kq^3h^{-1}$, не приводит к качественному изменению поведения решений системы (8).

ЛИТЕРАТУРА

1. Price J. F. On the scaling of stress-driven entrainment experiments.— J. Fluid Mech., 1979, v. 90, N 3.
2. Kantha L. H., Phillips O. M., Azad R. S. On turbulent entrainment at a stable density interface.— J. Fluid Mech., 1977, v. 79, N 4.
3. Kato H., Phillips O. M. On the penetration of a turbulent layer into a stratified fluid.— J. Fluid Mech., 1969, v. 37, N 4.
4. Mellor G. L., Durbin P. A. The structure and dynamics of the ocean surface mixed layer.— J. Phys. Oceanogr., 1975, v. 5, N 4.
5. Китайгородский С. А. Динамика верхнего термостата в океане.— Итоги науки и техники, 1977, т. 4.
6. Ниллер П. П., Краус Э. Б. Одномерные модели верхнего слоя океана.— В кн.: Моделирование и прогноз верхних слоев океана/Под ред. Э. Б. Крауса. Л.: Гидрометеопиздат, 1979.
7. Deardorff J. W., Willis G. E. Dependence of mixed-layer entrainment on shear stress and velocity jump.— J. Fluid Mech., 1982, v. 115.

Поступила 28/XII 1984 г.

УДК 532.22 + 532.61 + 539.23

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАВНОВЕСНЫХ ФОРМ КАПЕЛЬ ЖИДКОСТИ ПРИ ГРАФОЭПИТАКСИИ ИЗ РАСТВОРОВ

Ю. В. Апанович, В. И. Клыкков

(Рига)

Первый удачный эксперимент по графоэпитаксии — рост из раствора [1]. Впоследствии основное число работ оказалось сосредоточенным на получении пленок полупроводников, в основном кремния. Графоэпитаксия из растворов отошла на второй план, хотя она обладает рядом несомненных достоинств:

— является удобным модельным объектом: исследуя рост из низкотемпературных растворов, можно судить о процессах в высокотемпературных растворах в расплаве, непосредственное наблюдение за которыми затруднено;

— имеет прикладное значение, поскольку ряд важных материалов может быть выращен этим методом в контролируемых условиях;

— может быть использована как промежуточный этап для многоступенчатой графоэпитаксии.

В [2] показано, что при графоэпитаксии из растворов на узоре в виде двумерной решетки происходит эволюция формы испаряющихся капель, влияющая на азимутальную ориентацию растущих кристаллов. Ясно, что для разработки управляемого процесса графоэпитаксии необходимо детальное понимание всех особенностей этого явления и их связи с технологическими факторами. Поэтому в данной работе проведено моделирование эволюции формы жидкой капли методом вычислительного эксперимента.

1. Математическая модель. Изучим квадратную ячейку, внутри которой находится испаряющаяся капля раствора. Ячейка образована на плоской подложке выступами, профиль которых в поперечном сечении имеет вид гауссовой кривой (рис. 1). Выступы расположены так, что между их торцами имеются зазоры, облегчающие тангенциальный рост монокристаллического слоя. В центр ячейки поместим начало декартовой системы координат таким образом, чтобы ось z была перпендикулярна поверхности подложки. Так как ячейка квадратная, используя ее симметрию, рассмотрим задачу о нахождении равновесной формы капли в области Ω_1 , составляющей $1/8$ часть ячейки. Область Ω_1 — равнобедренный прямоугольный треугольник OAB (рис. 1).

Пусть Ω — проекция на плоскость xy области, занимаемой каплей в Ω_1 , а γ — проекция линии трехфазного контакта. Поверхность выступа и ячейки в Ω_1 задается уравнением

$$(1.1) \quad z = \Phi(x, y), \quad \Phi(x, y) = \begin{cases} A \exp \left[-\frac{(y-0,5)^2}{B^2} \right], & 0 \leq x \leq 0,35, \quad 0 \leq y \leq \\ \leq 0,5, \quad y \geq x, \\ A \exp \left[-\frac{(y-0,5)^2 + (x-0,35)^2}{B^2} \right], & 0,35 \leq x \leq \\ \leq 0,5, \quad 0 \leq y \leq 0,5, \quad y \geq x. \end{cases}$$

Параметры A и B позволяют подобрать форму поверхности, наиболее близкую к используемой в эксперименте. Будем считать, что конвективное движение жидкости отсутствует, испарение происходит медленно и капля последовательно проходит ряд равновесных форм, соответствующих различным объемам жидкости.

Согласно [3], для равновесия жидкости необходимо и достаточно, чтобы на линии трехфазного контакта выполнялось условие Дюпре — Юнга, а на свободной поверхности — уравнение капиллярности Лапласа (1.2)

$$p_0 - p = \sigma_{lv} (k_1 + k_2),$$

где p — давление в капле; p_0 — давление пара; σ_{lv} — коэффициент поверхностного натяжения на границе жидкость — пар; k_1 и k_2 — кривизны главных нормальных сечений.

В качестве характерного размера задачи принята длина стороны квадратной ячейки $L = 22$ мкм. Для капель водных растворов солей, имеющих размер L , число Бонда $Bo = 10^{-4} - 10^{-5}$. Поэтому силой тяжести можно пренебречь и считать, что форма капли и положение линии трехфазного контакта определяются только капиллярными силами. Следовательно, давление p в объеме капли постоянное, и тогда уравнение (1.2) сводится к

$$(1.3) \quad k_1 + k_2 = -C,$$

где постоянная $C = (p - p_0)/\sigma_{lv}$ зависит от объема капли.

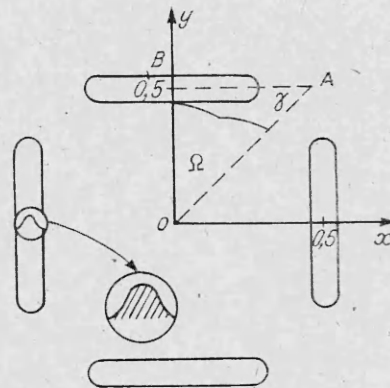


Рис. 1.

Следуя [3], введем векторную функцию $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\xi, \eta)$, $0 \leq \xi \leq 1$, $0 \leq \eta \leq 1$, которая переводит область Ω в Ω^* , являющуюся единичным квадратом в координатах ξ, η . Компоненты $x = x(\xi, \eta)$ и $y = y(\xi, \eta)$ зададим как

$$(1.4) \quad x = f\left(\frac{\pi}{4} \xi\right) \eta \sin \frac{\pi}{4} \xi, \quad y = f\left(\frac{\pi}{4} \xi\right) \eta \cos \frac{\pi}{4} \xi, \quad 0 \leq \xi \leq 1, \quad 0 \leq \eta \leq 1.$$

Здесь использовано уравнение линии γ в полярных координатах $r = f(\varphi)$, $0 \leq \varphi \leq \pi/4$ (угол φ возрастает по часовой стрелке от оси y). Преобразование (1.4) приводит линию γ в сторону квадрата $0 \leq \xi \leq 1$, $\eta = 1$. Уравнение (1.3) в координатах ξ, η запишем в виде

$$(1.5) \quad \mathbf{n} \cdot \Delta_r \mathbf{x} = -C,$$

$$\text{где } \Delta_r \mathbf{x} = \frac{1}{\sqrt{a}} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{a_{22} \partial \mathbf{x}}{\sqrt{a} \partial \xi} - \frac{a_{12} \partial \mathbf{x}}{\sqrt{a} \partial \eta} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(-\frac{a_{12} \partial \mathbf{x}}{\sqrt{a} \partial \xi} + \frac{a_{11} \partial \mathbf{x}}{\sqrt{a} \partial \eta} \right) \right];$$

\mathbf{n} — вектор нормали к поверхности капли; $\mathbf{n} = \frac{1}{\sqrt{a}} \left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \xi} \times \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \eta} \right)$; $a_{\alpha\beta} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u_\alpha} \cdot \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u_\beta}$ — метрический тензор; $\mathbf{x} = (x, y, z)$; $\alpha, \beta = 1, 2$; $u_1 = \xi$; $u_2 = \eta$; $a = a_{11} a_{22} - a_{12}^2$.

Граничные условия для (1.4) на линии $0 \leq \xi \leq 1$, $\eta = 1$ поставим следующим образом:

условие Дюпре — Юнга

$$(1.6) \quad \frac{\mathbf{x}_\xi \times \mathbf{x}_\eta}{\sqrt{\mathbf{x}_\xi^2 \mathbf{x}_\eta^2 - (\mathbf{x}_\xi \cdot \mathbf{x}_\eta)^2}} \cdot \mathbf{N} = \cos \alpha,$$

где \mathbf{N} — вектор нормали к поверхности подложки в точках $x = x(\xi, 1)$, $y = y(\xi, 1)$, α — угол контакта трех фаз, который считаем постоянным и равным 45° ;

условие контакта

$$(1.7) \quad z(\xi, 1) = \Phi(x(\xi, 1), y(\xi, 1)), \quad 0 \leq \xi \leq 1.$$

На остальных границах Ω^* ставятся граничные условия симметрии

$$(1.8) \quad \partial z / \partial \xi = 0, \quad \xi = 0, \quad 0 \leq \eta \leq 1, \quad \partial z / \partial \xi = 0, \quad \xi = 1, \quad 0 \leq \eta \leq 1, \\ \partial z / \partial \eta = 0, \quad 0 \leq \xi \leq 1, \quad \eta = 0.$$

Так как необходимо найти равновесную форму капли внутри ячейки, следует добавить условие

$$(1.9) \quad z \geq \Phi(x(\xi, \eta), y(\xi, \eta)), \quad 0 \leq \xi \leq 1, \quad 0 \leq \eta \leq 1.$$

Таким образом, равновесная форма капли и линия ее контакта с подложкой будут определяться уравнением (1.5), системой граничных условий (1.6) — (1.8) и условием (1.9). Вопрос об устойчивости этой равновесной формы в настоящей работе не рассматривается.

2. Методика численного решения. Приведенная постановка задачи не содержит явно в качестве параметра величину объема капли $v = \int_{\Omega} (z - \Phi(x, y)) dx dy$. Поэтому в данной работе последовательность равновесных форм, соответствующих различным объемам капли, получается из решения краевой задачи (1.5) для множества слабо отличающихся друг от друга значений константы C . По полученному решению вычисляется объем капли, соответствующий заданному C . Необходимо отметить, что однозначности такого соответствия может не быть (см., например, [3]). Решение задачи для фиксированного C находилось по следующим этапам:

1) в качестве начального приближения задавалось множество точек (r_i, φ_i) , $1 \leq i \leq n_\xi$, расположенных равномерно по углу $\varphi = \frac{\pi}{4} \xi$, $0 \leq \xi \leq$

≤ 1 ; эти точки получались либо из уже найденного решения с ближайшим C , либо лежали на дуге окружности заданного радиуса; количество точек совпадало с числом узлов разностной сетки n_ξ по переменной ξ ;

2) в области Ω по точкам (r_i, φ_i) , где $1 \leq i \leq n_\xi$, строилась разностная сетка, соответствующая равномерной в Ω^* сетке с шагами $h_\xi = 1/(n_\xi - 1)$ и $h_\eta = 1/(n_\eta - 1)$; координаты ее узлов в декартовой системе

$$\left. \begin{aligned} x_{ij} &= r_j(j-1)h_\eta \sin \left[h_\xi(i-1) \frac{\pi}{4} \right], \\ y_{ij} &= r_j(j-1)h_\eta \cos \left[h_\xi(i-1) \frac{\pi}{4} \right] \end{aligned} \right\} 1 \leq i \leq n_\xi, 1 \leq j \leq n_\eta;$$

3) используя значения функции z , найденные на предыдущей итерации, определяли $n_x \Delta_r x$ и $n_y \Delta_r y$;

4) решалось разностное уравнение, аппроксимирующее (1.5) с граничным условием (1.7); этапы 3 и 4 повторялись до выполнения заданного критерия сходимости по функции z ;

5) используя полученное z , вычисляли значения невязки условия (1.6) во всех точках (r_i, φ_i) , $1 \leq i \leq n_\xi$;

6) производилось смещение линии γ (т. е. определялись новые (r_i, φ_i) , $1 \leq i \leq n_\xi$) таким образом, чтобы уменьшалось максимальное по модулю значение невязки (1.6); если это значение становилось менее 10^{-3} , то вычисления прекращались, в противном случае вычисления продолжались при новом положении линии γ по этапам 2, . . . , 6 и т.д.

В Ω^* уравнение (1.5) аппроксимировалось консервативной разностной схемой со вторым порядком аппроксимации на квадратной (20×20 узлов) сетке;

3. Результаты и их обсуждение. Для сравнения результатов моделирования с экспериментом на поверхности аморфной подложки (плавленый кварц) при помощи фотолитографии и жидкостного травления приготовлен микрорельеф в виде штриховой решетки с периодом 22 мкм. Поскольку скорость травления аморфной подложки изотропна, будет иметь место плавный переход от поверхности подложки к выступам, формирующим ячейку. Если к тому же проводить травление специальным образом, например, до полного отслаивания фоторезиста, верхние части выступов также будут закруглены. Тогда профиль выступа в поперечном сечении можно аппроксимировать гауссовой кривой с константами A и B , задающими соответственно высоту и ширину выступа. Торцы выступов образованы поверхностью вращения гауссовой кривой. В целом поверхность микрорельефа в координатах x, y в области Ω_1 можно аппроксимировать выражением (1.1). Моделирование проводилось для подложки с рельефом двух видов: «пологий» ($A = B = 0,1$) и «крутой» ($A = 0,1, B = 0,03$). Угол смачивания задавался равным 45° .

Наиболее наглядно результаты расчетов могут быть отображены графически в виде линий одинакового уровня $z = \text{const}$. На рис. 2 и 3 представлены квадратная ячейка в координатах x, y , контур капли и изолинии свободной поверхности. При этом необходимо иметь в виду следующее обстоятельство: особенностью методики расчета является то, что равновесные формы капель находились при последовательном увеличении объема жидкости, тогда как в действительности при испарении капель их объем уменьшается. Поэтому в эксперименте эволюция капель идет в обратной последовательности по сравнению с показанной на рис. 2 и 3.

«Пологий» рельеф, т. е. в (1.1) $A = B = 0,1$, что соответствует случаю микрорельефа с очень пологими и плавными очертаниями выступов. Последовательность равновесных форм жидкости для данного случая показана на рис. 2. При $C = 5$ (рис. 2, а) объем капли мал, линия трехфазного контакта представляет собой окружность и проходит по практически плоскому дну ячейки, не касаясь ее выступов. Форма капли с хорошей точностью совпадает с точным решением для капли на плоскости.

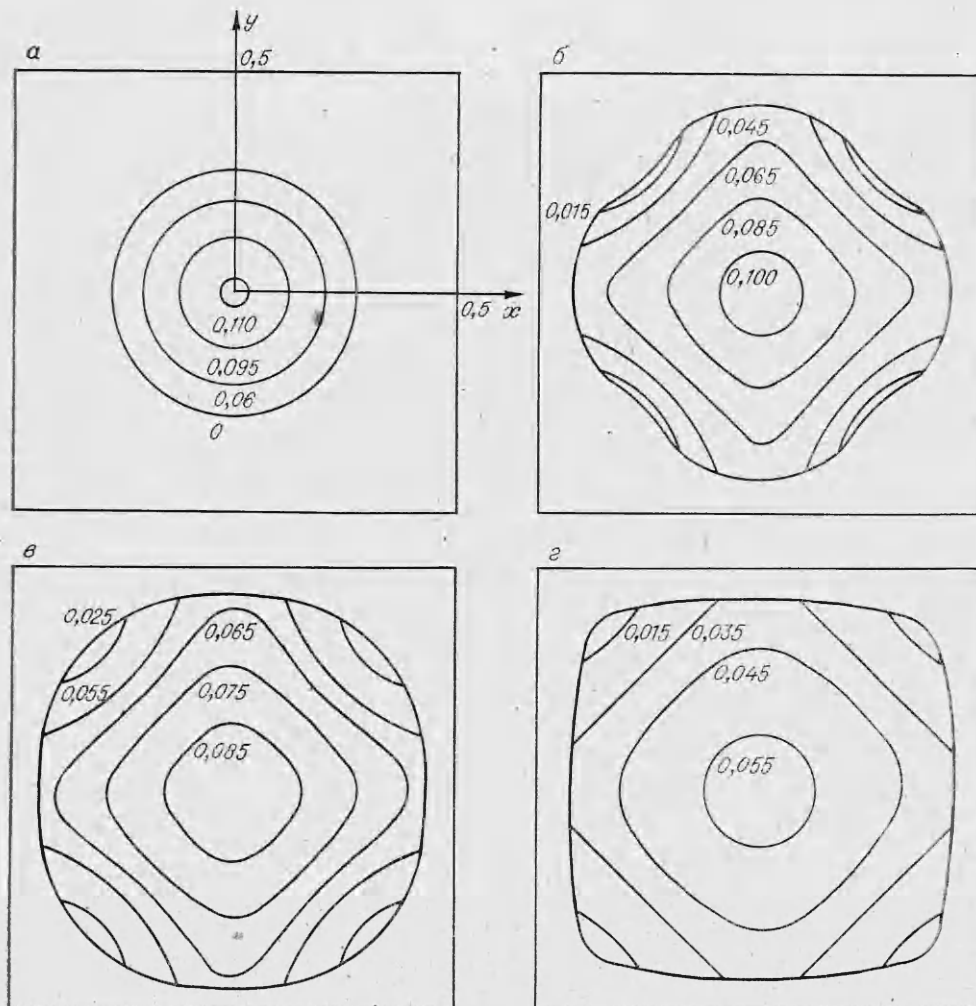


Рис. 2.

С увеличением объема капли линия контакта приближается к выступам, которые искажают ее форму. При $C = 2$ (рис. 2, б) видно, что линии $z = \text{const}$ имеют вид деформированных квадратов, повернутых относительно ячейки на 45° . Будем называть такую ориентацию диагональной или двойниковой по отношению к ячейке.

Двойниковая ориентация поверхности капли, которая остается слабо выпуклой, сохраняется при $C = 1$ и $C = 0,6$ (рис. 2, в, г). Расчеты для $C < 0,6$ провести не удалось. По-видимому, это связано с тем, что при заданных A, B и $\alpha = 45^\circ$ не могут реализоваться конфигурации вогнутой поверхности.

«Крутой» рельеф ($A = 0,1, B = 0,03$). В этом случае последовательность равновесных форм, соответствующих увеличению объема жидкости, первоначально повторяет рассмотренную выше (рис. 2, а — г). Затем при объеме жидкости $v > 0,0415$ скачком происходит переход в следующее равновесное положение (рис. 3). Константа C меняет знак ($C = -0,6$), поверхность жидкости становится вогнутой, линия фазового контакта сильно изогнута в углах ячейки. Линии $z = \text{const}$ образуют в центральной части капли округлый квадрат, находящийся в параллельном положении по отношению к ячейке.

Дальнейшее увеличение объема сначала приводит к более выраженной параллельной ориентации верхней части капли (рис. 3, б), но затем по-

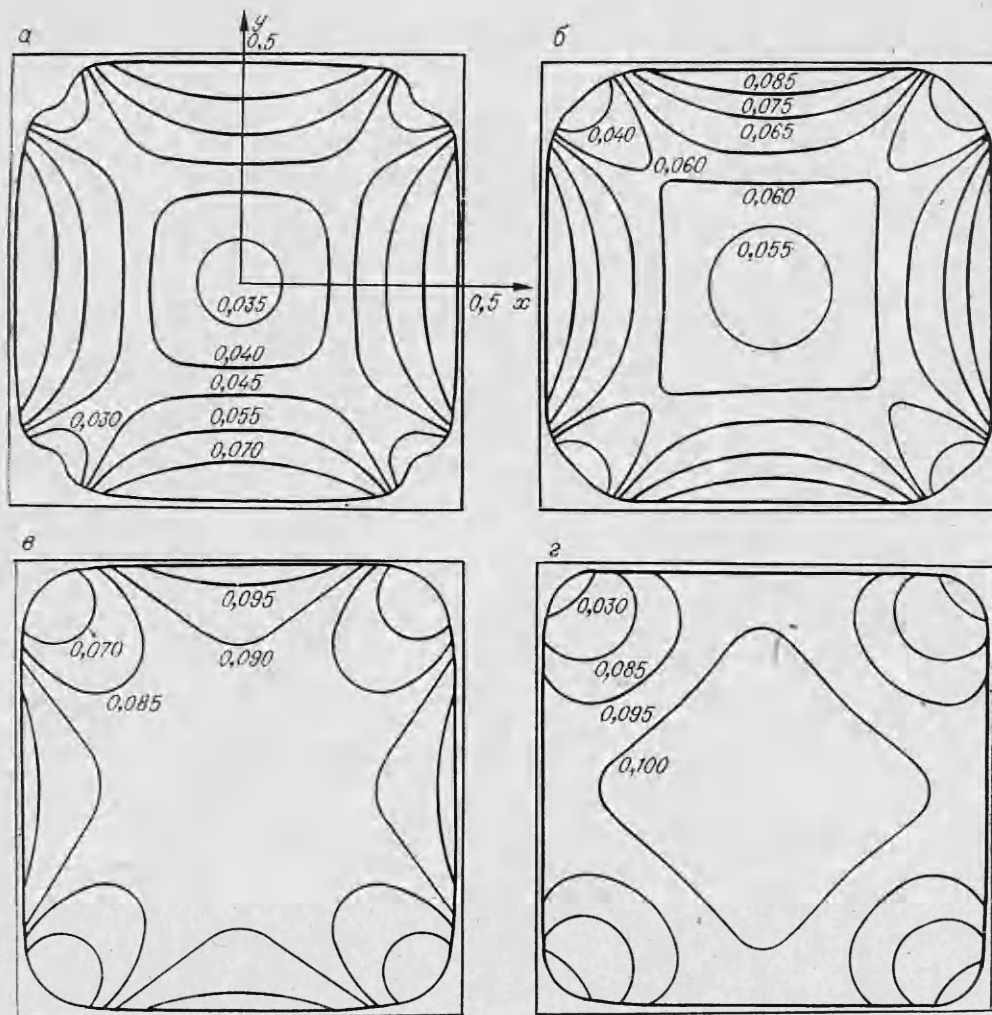


Рис. 3.

верхность капли выпрямляется, становится почти плоской ($C = 0$) и линии $z = \text{const}$ образуют фигуру промежуточной формы (рис. 3, в), переходящую затем в квадрат с диагональной ориентацией (рис. 3, г). Поверхность жидкости при этом вышуклая. Данная форма поверхности капли сохраняется вплоть до значений $C = 0,5$ и объема $v = 0,110$. При $v > 0,110$ жидкость, вероятно, полностью закрывает микрорельеф, образуя сплошной слой.

Результаты вычислительного эксперимента согласуются с прямыми наблюдениями за испаряющимися каплями. На рис. 4 и 5 показаны капли раствора алюмокалиевых квасцов, снятые с использованием интерференционного светофильтра ($\lambda = 0,574$ мкм). Видны диагональная (рис. 4) и параллельная (рис. 5) ориентации вершинок капель.

Эволюция формы капель позволяет проследить изменение симметрии поля капиллярных сил, определяющих ориентацию центров кристаллизации. Становится понятным происхождение двойниковой ориентации кристалла KCl (рис. 6), наблюдаемой при графоэпитаксии из раствора наряду с параллельной.

Результаты расчетов показывают, что явление смены двойниковой ориентации вершины капли на параллельную обусловлено изменением объема капли и формой штрихов подложки и что на «мелком» и «пологом» микрорельефе параллельная ориентация, по-видимому, не должна наблюдаться.

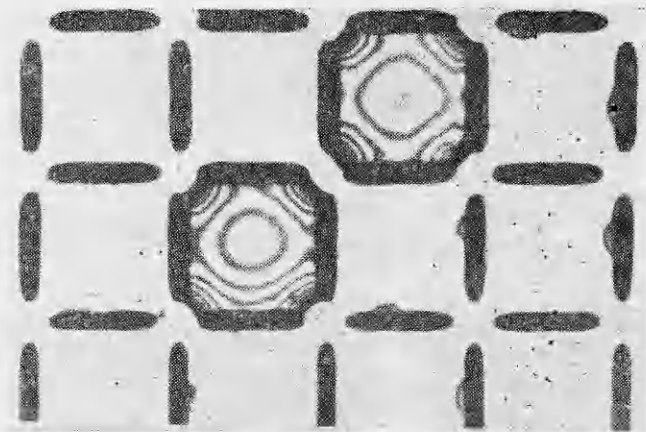


Рис. 4.

даться. Этот вывод подлежит экспериментальной проверке. На «глубоком» и «крутом» рельефе возможно существование как параллельной, так и двойниковой ориентации растущих из раствора кристаллов.

Описанные закономерности эволюции фигур симметрии и поверхности капель жидкости присущи также треугольной и гексагональной решеткам, хотя для последней они слабо выражены.

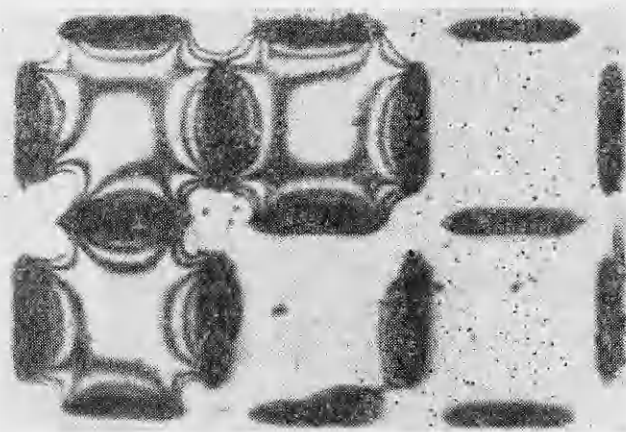


Рис. 5.

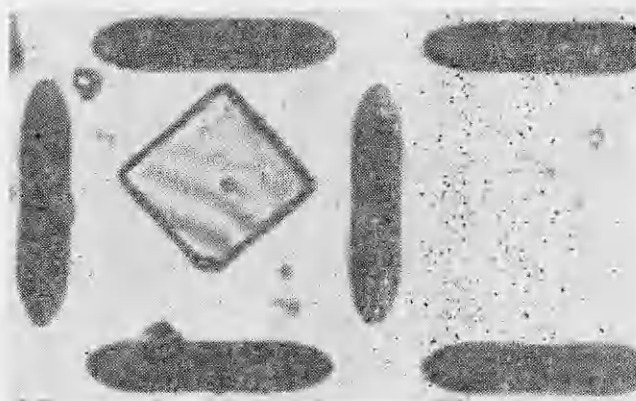


Рис. 6.

Авторы благодарят Т. А. Черепанову за постоянный интерес и поддержку при проведении данной работы, а также за ее полезное обсуждение.

ЛИТЕРАТУРА

1. Шефгаль Н. Н., Бузынин А. И. Преимущественная ориентация кристаллов на субстрате и влияние царапин.— Вестн. МГУ. Сер. 4. Геология, 1972, № 3.
2. Klykov V. I. Diataxy (graphoepitaxy) from aqueous solutions.— In: Intern. Conf. on Industrial Crystallization. Czechoslovakia, Liberec, 1983.
3. Бабский В. Г., Коначевский Н. Д., Мышкис А. Д. и др. Гидромеханика невесомости. М.: Наука, 1976.

Поступила 2/1 1985 г.

УДК 532.529.6

НЕСТАЦИОНАРНЫЙ ТЕРМОКАПИЛЛЯРНЫЙ ДРЕЙФ КАПЛИ ВЯЗКОЙ ЖИДКОСТИ

Л. К. Антановский, Б. К. Копбосынов

(Новосибирск)

1. Математическая формулировка задачи о движении капли вязкой жидкости под действием термокапиллярных сил заключается в следующем [1]. Требуется найти поверхность Γ_t , разбивающую пространство R^3 на ограниченную односвязную область Ω_t^+ и ее дополнение $\Omega_t^- = R^3 \setminus \bar{\Omega}_t^+$, и поле скоростей \mathbf{v} , давлений p , температур T , зависящих от времени t и пространственных координат $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ и удовлетворяющих дифференциальным уравнениям

$$(1.1) \quad \partial \mathbf{v} / \partial t + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\rho^{-1} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{g}, \quad \nabla \cdot \mathbf{v} = 0,$$

$$\partial T / \partial t + \mathbf{v} \cdot \nabla T = \chi \nabla^2 T \quad \text{в } R^3 \setminus \Gamma_t,$$

условиям сопряжения

$$(1.2) \quad [P \cdot \mathbf{n}]^\pm = \sigma K \mathbf{n} + \nabla_\Gamma \sigma, \quad V_n = \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}, \quad [\mathbf{v}]^\pm = 0,$$

$$[\chi \partial T / \partial n]^\pm = 0, \quad [T]^\pm = 0 \quad \text{на } \Gamma_t,$$

условию на бесконечности

$$(1.3) \quad \mathbf{v} \rightarrow 0 \quad \text{при } |\mathbf{x}| \rightarrow \infty$$

и начальным условиям

$$(1.4) \quad \mathbf{v} = \mathbf{v}_0, \quad T = T_0, \quad \Gamma_t = \Gamma_0 \quad \text{при } t = 0.$$

Здесь плотность ρ , кинематический коэффициент вязкости ν , коэффициенты температуропроводности χ и теплопроводности κ являются кусочно-постоянными с поверхностью разрыва Γ_t ; коэффициент поверхностного натяжения σ — известная функция температуры; $P = -pI + 2\mu D(\mathbf{v})$ — тензор напряжений; $\mu = \rho\nu$ — динамический коэффициент вязкости; I — единичный тензор; $D(\mathbf{v})$ — тензор скоростей деформаций, равный симметричной части тензора $\nabla \mathbf{v}$; V_n — скорость движения Γ_t вдоль нормали \mathbf{n} , внешней по отношению к Ω_t^+ ; K — сумма главных кривизн Γ_t (след тензора кривизны); ∇ и ∇_Γ — операторы градиента в R^3 и на Γ_t соответственно. Символом $[\cdot]^\pm$ обозначается скачок, т. е. $[f]^\pm = f^+ - f^-$, где f^\pm — предельные значения функции $f(\mathbf{x}, t)$ при стремлении \mathbf{x} к точке поверхности Γ_t из Ω_t^\pm . Плотность массовых сил $\mathbf{g}(\mathbf{x}, t)$, функции $\mathbf{v}_0(\mathbf{x})$, $T_0(\mathbf{x})$ и поверхность Γ_0 заданы.

Из граничных условий (1.2) видно, что поля скоростей и температур непрерывны при переходе через Γ_t , а поле давлений и касательные напряжения терпят скачок. В результате при наличии градиента температуры возникают термокапиллярные силы, которые совместно с архимедовыми