

И. В. Белова, Г. Б. Волкова

### ТЕРМОКАПИЛЛЯРНАЯ КОНВЕКЦИЯ ПРИ БЕСТИГЕЛЬНОЙ ЗОННОЙ ПЛАВКЕ

Метод бестигельной зонной плавки применяется для получения монокристаллов высокого качества или для очистки кристалла от примеси. При этом в цилиндрическом образце с помощью нагревателя формируется жидкая зона, которая за счет сил поверхностного натяжения расплава удерживается между твердыми частями образца. Градиент температуры на свободной поверхности жидкой фазы изменяет поверхностное натяжение, что в свою очередь приводит к термокапиллярной конвекции расплава. В последнее время проводятся интенсивные исследования математических задач, моделирующих процесс бестигельной зонной плавки. Гидродинамические, тепловые, диффузионные процессы в образце рассматриваются в основном по отдельности.

Применение численных методов позволяет проанализировать получаемые решения в зависимости от характерных параметров задачи, которым в эксперименте соответствуют теплофизические свойства материалов, размеры получаемых образцов, тепловые параметры используемых нагревателей и др. Поэтому численный анализ дает необходимый материал для задачи оптимизации режимов процесса. Так, целью работ [1—3] являлось выяснение зависимости размеров расплавленной зоны от мощности источника тепла. Авторы [4, 5] исследовали конвекцию расплава при заданном распределении температуры на боковой поверхности образца. В [4] форма фронта считалась плоской и была задана, в [5] рассчитывался процесс с неизвестным заранее положением фронта кристаллизации.

В данной работе численно исследуется влияние термокапиллярной конвекции расплава в отсутствие силы тяжести на положение и форму фронта при реальных граничных условиях на боковой поверхности образца. Из экспериментальных данных обычно известно только распределение температуры на внутренней поверхности нагревателя, что приводит в математической модели для расчета теплопереноса к нелинейным граничным условиям третьего рода на боковой поверхности (рис. 1, где 1 — нагреватель, 2 — зазор, 3 — образец). Предполагается симметричность решения относительно средней плоскости расплавленной зоны, что основано на результатах [3, 4], а также близость свободной поверхности расплава к цилиндрической, что оправдано при ширине источника тепла, не большей одного диаметра образца. В [3] показано, что при этом условии искривление свободной поверхности расплава незначительно влияет на форму фронта кристаллизации.

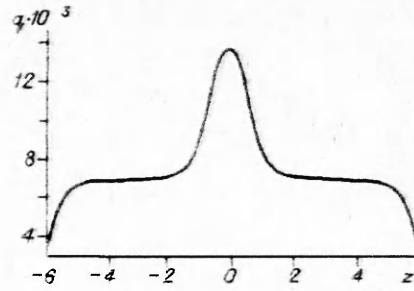
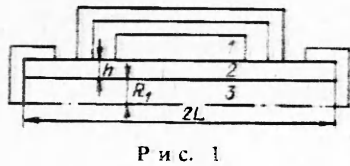
1. Постановка и метод решения задачи. В цилиндрической области  $\{(r, z): 0 \leq r \leq 1, 0 \leq z \leq B\}$  ( $r$  и  $z$  — безразмерные координаты, отнесенные к радиусу образца  $R_1$ ,  $B$  — половина безразмерной длины образца) решается стационарное уравнение

$$(1.1) \quad \Delta U + \text{Pr} \nabla \cdot (\nabla U) = 0.$$

Здесь  $U$  — приведенная температура, связанная с реальной температурой  $T$  по формуле

$$U = (T/T_* - 1)/\alpha, \quad \alpha = \begin{cases} \kappa_s/\kappa_L, & T > T_*, \\ 1, & T \leq T_*; \end{cases}$$

$T_*$  — температура кристаллизации;  $\text{Pr} = \nu/\chi$  — число Прандтля;  $\nabla$  — вектор скорости. Тогда положение фронта кристаллизации определяется линией уровня  $U = 0$ . Распределение температуры легко восстанавливается, если получено распределение  $U$ .



Граничные условия следующие:  
на осях симметрии

$$(1.2) \quad \partial U / \partial r|_{r=0} = \partial U / \partial z|_{z=0} = 0;$$

на торце при  $z = B$

$$(1.3) \quad U = T_1 / T_* - 1$$

( $T_1$  — заданная температура); на боковой поверхности

$$(1.4) \quad \partial U / \partial n|_{r=1} = -Q\epsilon \{ (1 + \alpha U)^4 / \alpha - q / \alpha \},$$

где  $Q = R_1 \sigma T_*^3 / \kappa_L$  — безразмерная величина;  $\epsilon$  — степень черноты (зависит от температуры);  $\sigma$  — постоянная Стефана — Больцмана;  $q$  — подводимый поток тепла. На рис. 2 представлено распределение  $q$ , рассчитанное по полученному из экспериментальных данных распределению температуры на нагревателе. Формула для расчета потока (пренебрегаем вкладом отраженных потоков в результирующий поток) имеет вид [6]

$$q(z) = \sigma \epsilon_2 R_1 \int_{-L}^L \frac{h^2 T_2^4}{(h^2 + (z-s)^2)^2} ds.$$

Здесь  $\epsilon_2$ ,  $T_2$  — степень черноты и распределение температуры на стенке нагревателя;  $h$  — зазор между поверхностью образца и поверхностью нагревателя.

Уравнение (1.1) с граничными условиями (1.2) — (1.4) решалось методом конечных элементов с использованием разбиения области на 8-узловые изопараметрические элементы [7].

Компоненты вектора скорости являются решением следующей задачи. При  $T \leq T_*$   $V \equiv 0$ . При  $T > T_*$  в области  $0 \leq r \leq 1$ ,  $0 \leq z < f(r)$  ( $z = f(r)$  — положение фронта кристаллизации) решается система уравнений

$$u = -\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z}, \quad v = \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r}, \quad \omega = \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{\partial u}{\partial z}$$

( $u, v$  — компоненты вектора скорости,  $\psi$  — функция тока,  $\omega$  — ненулевая компонента вектора вихря),

$$u \frac{\partial \omega}{\partial r} + v \frac{\partial \omega}{\partial z} - \frac{u\omega}{r} = \frac{\partial^2 \omega}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \omega}{\partial r} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial z^2} - \frac{\omega}{r^2},$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \omega r$$

с граничными условиями

$$\psi|_{r=0} = \psi|_{r=1} = \psi|_{z=0} = \psi|_{z=f(r)} = 0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial n} \Big|_{z=f(r)} = 0,$$

$$\omega|_{r=0} = \omega|_{z=0} = 0, \quad \omega|_{r=1} = \frac{\sigma_T \alpha T_* R_1}{\rho v^2} \frac{\partial U}{\partial z}.$$

Для замыкания задачи для вихря на твердой стенке — поверхности раздела фаз — использовался метод непосредственного удовлетворения гра-

ничным условиям, описанный в [8], заключающийся в том, чтобы обеспечить выполнение разностного аналога граничного условия прилипания  $(\partial\psi/\partial n)_r = 0$  на каждом временном слое непосредственно, что достигается подправлением функции тока  $\psi$  вблизи границы.

Определяющими критериями в задаче являются: число Прандтля, интенсивность вихря на свободной поверхности, безразмерная величина теплового потока  $\bar{q} = Q\epsilon q/\alpha$  и приведенная температура на границе  $z = B$ .

Уравнения гидродинамики в переменных функция тока — вихрь решаются методом установления. Стационарные уравнения заменяются на нестационарные с введением итерационного параметра, аналогичного времени. Далее используется схема переменных направлений [8]. Для оптимизации расчета на каждом временном слое итерационного цикла применялась методика определения оптимальных параметров, описанная в [9]. Эта методика состоит в подправлении оценок для максимального и минимального собственных значений задачи по насчитанным на предыдущих шагах результатам.

Задача (1.1)—(1.4) совместно с уравнениями гидродинамики решалась следующим образом. В начальный момент полагалось  $V = 0$ . Затем определялась форма фронта (без конвекции). После этого проводился расчет конвекции. Найденные в результате этого скорости подставлялись в (1.1), и определялась новая форма фронта. Итерационный процесс продолжался до установления последней.

2. Результаты расчетов. Расчеты проводились по полученным из экспериментов данным при следующих размерах образца:  $R_1 = 0,79$  см,  $L = 4,8$  см,  $h = 0,56$  см. Характеристики материала соответствуют германию. Результаты расчетов при  $T_1 = 925$  и  $949$  К представлены соответственно на рис. 3, 4. Линия 1 на рис. 3, а, 4, а отвечает положению фронта, получаемому в расчетах без конвективного движения расплава, 2 — положению фронта с конвекцией в расплаве. На рис. 3, а, 4, а приведены также линии уровня функции тока, на рис. 3, б, 4, б — изотермы в жидкой фазе. На рис. 3, а и 4, а видны два вихря, направленных одинаково и разделенных небольшой областью почти полного покоя. Вихри локализованы вдоль свободной границы расплава, что обусловлено наличием пограничного слоя в этой области и отсутствием других механизмов, порождаю-

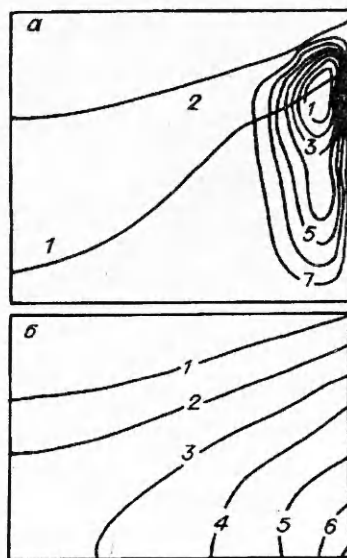


Рис. 3

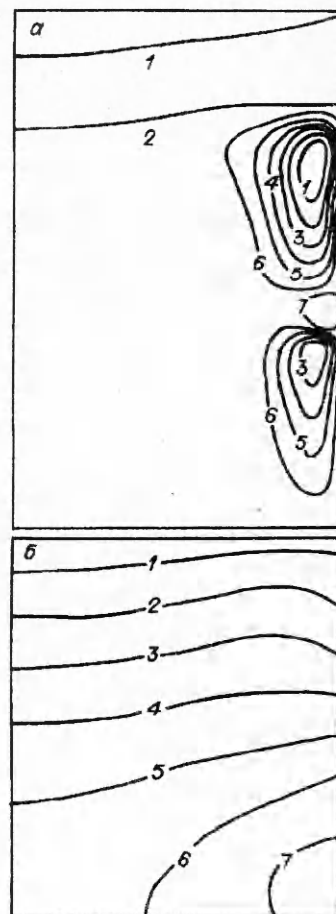


Рис. 4

щих конвективное движение. Проведенные расчеты позволяют сделать вывод о том, что термокапиллярная конвекция существенным образом влияет как на положение поверхности раздела фаз, так и на ее форму. В целом форма фронта становится менее искривленной, но вблизи боковой поверхности появляется небольшое искривление, обусловленное локальным действием термокапиллярной конвекции. При этом наличие последней может привести как к увеличению ширины расплавленной зоны, так и к ее уменьшению в зависимости от теплового режима на торцах заготовки (рис. 3, а, 4, а). Основываясь на данных [7] и на полученных результатах по выяснению влияния конвекции на процесс бестигельной зонной плавки, можно утверждать, что развитая термокапиллярная конвекция, сглаживая поверхность раздела фаз, создает более благоприятное для технических целей напряженное состояние в растущей твердой фазе. При этом может вообще не возникнуть областей, в которых интенсивность сдвиговых напряжений превосходит критическое и приводит к существенному увеличению плотности дислокаций, либо такие области будут локализованы вдоль боковой поверхности образца. Необходимо, конечно, учитывать и изменение ширины расплавленной зоны, так как для этого параметра процесса существует критическое значение, определяющее область устойчивости процесса.

Авторы выражают признательность В. В. Кузнецову и О. М. Лаврентьевой за полезное обсуждение настоящей работы.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Дональд Д. К. Тепловой режим в условиях вакуумной плавки // Приборы для научных исследований.— 1961.— № 7.
2. Kobayashi N. Power required to form a floating zone and the zone shape // J. Crystal Growth.— 1978.— V. 43.— P. 417.
3. Анисютин Б. М. Численное исследование тепловой задачи для процесса бестигельной зонной плавки // Задачи гидромеханики и тепломассообмена со свободными границами: Межвуз. сб. науч. тр./Новосиб. гос. ун-т.— Новосибирск, 1987.
4. Славчев С. Г., Кожухарова Ж. Д. Численное моделирование термокапиллярной конвекции в нецилиндрической плавающей зоне кристалла // Численные методы и их приложения.— София, 1985.
5. Апанович Ю. В., Люмкис Е. Д. Моделирование процессов тепломассообмена при зонной перекристаллизации/Тр. III Всесоюз. конф. «Моделирование роста кристаллов».— Рига, 1990.
6. Якоб М. Вопросы теплопередачи.— М.: ИЛ, 1960.
7. Белова И. В. Расчет температуры и термоупругих напряжений в монокристаллах при бестигельной зонной плавке // Математическое моделирование. Прикладные задачи математической физики.— Рига, 1990.
8. Математическое моделирование конвективного тепломассообмена на основе уравнений Навье — Стокса/В. И. Полежаев, А. В. Бунэ, Н. А. Везуб и др.— М.: Наука, 1987.
9. Хейгеман Л., Янг Д. Прикладные и итерационные методы.— М.: Мир, 1986.

г. Новосибирск

Поступила 4/XII 1992 г.,  
в окончательном варианте — 11/I 1993 г.

УДК 548.01:66.065

А. И. Мошинский

### ОБ ОДНОМ ПРЕДЕЛЬНОМ РЕЖИМЕ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ПОЛИДИСПЕРСНОЙ СИСТЕМЫ ИЗ РАСТВОРОВ

Описание поведения полидисперсной системы частиц при наличии фазового перехода представляет интерес при исследовании ряда природных и технологических проблем. Примерами могут служить рост капель тумана при конденсации, обратный ему процесс — исчезновение капель из-за испарения, кристаллизация и растворение твердых частиц в растворе при