

В.С. Бердников, В.А. Винокуров, В.В. Винокуров, В.А. Гапонов

Институт теплофизики СО РАН, Новосибирск, Россия

ТЕПЛООБМЕН В РЕЖИМАХ ТЕПЛОВОЙ ГРАВИТАЦИОННО-КАПИЛЛЯРНОЙ КОНВЕКЦИИ В ВАРИАНТЕ МЕТОДА ЧОХРАЛЬСКОГО С НЕПОДВИЖНЫМ ТИГЛЕМ

АННОТАЦИЯ

Исследованы режимы термогравитационной и тепловой гравитационно-капиллярной конвекции расплавов с числами Прандтля 0,05, 16, 45, 2700 в методе Чохральского. Изучены гидродинамика и теплообмен. Численные исследования проведены методами конечных и компактных разностей. Экспериментально исследовано влияние гидродинамики на форму фронта кристаллизации при $Pr = 45,6$.

1. ВВЕДЕНИЕ

Для вытягивания кристаллов из расплавов наиболее широко применяется метод Чохральского. При разработке технологии получения монокристаллов [1—5] решение задач повышения качества кристаллов и оптимизации технологических режимов требует исследований гидродинамики расплава, теплоотдачи от кристалла и в целом сложного сопряженного тепломассообмена в ростовых установках. Поскольку общемировой тенденцией остается увеличение диаметра кристаллов с одновременным ростом требований к их совершенству, то актуальным остается решение вопроса о корреляции условий роста кристалла и его взаимосвязанных объемных кристаллографических, оптических или электрофизических характеристик. Необходимо, в частности, прогнозировать гидродинамику расплава, особенно в пограничном слое на фронте кристаллизации. Для решения этой проблемы, основываясь на теории подобия, проводились исследования на моделях различного уровня и назначения. В рамках частичного моделирования широко применяются и совершенствуются физическое моделирование [1—11], численное [3, 9—11], согласованный комплексный подход [3, 9—11]. Развиваются глобальные численные модели [12], претендующие на расчет сложного сопряженного тепломассообмена во всей ростовой камере, и трехмерные гидродинамические модели для системы “тигель—расплав—кристалл” [13]. В то же время далеко не исчерпаны возможности более простых осесимметричных моделей в рамках традиционного частичного моделирования, которые позволяют понять суть физических процессов, происходящих в относительно автономных частных системах “тигель—расплав—кристалл”. До настоящего времени не исследована достаточно полно тепловая гравитационно-капиллярная конвекция (ТГКК) в расплавах, возникающая из-за перепада температуры между фронтом кристалли-

зации и стенками тигля. ТГКК принципиально неустраняема и плохо управляема в неизотермических системах, находящихся в поле тяжести. Свободная конвекция — исходный режим при переходе к смешанной конвекции при включении и увеличении угловой скорости вращения кристалла, что используется для управления теплообменом в подавляющем большинстве вариантов технологии. Но некоторые оксидные кристаллы вытягивают только в режимах свободной конвекции. В этом базовом режиме в зависимости от состояния свободной поверхности и условий теплоотдачи в окружающую среду меняется относительная роль сил плавучести и термокапиллярного эффекта.

Экспериментальные исследования с прозрачными жидкостями — имитаторами расплава необходимы для понимания основных закономерностей гидродинамики расплавов и для верификации результатов и методов численного моделирования. Для расплавов с большими значениями числа Прандтля результаты физического эксперимента адекватны реальному технологическому процессу и позволяют получить исчерпывающие результаты во всех режимах течения: от ламинарных до развитых турбулентных [4—11]. Без фундаментальных исследований процессов ламинарно-турбулентного перехода, амплитудно-частотных и пространственно-временных характеристик течений в переходных и турбулентных режимах невозможен осознанный поиск способов управления гидродинамикой с помощью внешних воздействий. Реально же плохо изучено даже в ламинарных режимах влияние комбинации сил плавучести и термокапиллярного эффекта, тем более при добавке центробежных сил за счет вращения кристалла или/и тигля.

Данная работа является продолжением цикла работ [4—11]. Ниже систематизированы результаты исследований конвективного теплообмена. Численные исследования проведены методами конечных и компактных разностей. Используя гексадекан в качестве жидкости—имитатора расплава с числом Прандтля $Pr = 45,6$, экспериментально исследованы режимы тепловой гравитационно-капиллярной конвекции и влияние конвективного теплообмена на форму фронта кристаллизации.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Идеализированная модель процессов в системе тигель—расплав—кристалл — это конвекция у дисков различных диаметров, частично закрываю-

щих свободную поверхность жидкости, находящуюся в неподвижном цилиндрическом контейнере. Численно исследована ламинарная конвекция различной природы: термогравитационной, термокапиллярной и гравитационно-капиллярной. Использована система уравнений конвекции в приближении Буссинеска и в предположении осевой симметрии полей движения и температуры в переменных вихрь, функция тока, температура, азимутальная скорость. Система уравнений и граничных условий для ТГКК:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + U \frac{\partial \omega}{\partial r} + V \frac{\partial \omega}{\partial z} - \frac{U \omega}{r} = \left(\Delta \omega - \frac{\omega}{r} \right) - Gr \frac{\partial \theta}{\partial r};$$

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

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

дно тигля:

$$\psi = 0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial z} = 0, \quad \frac{\partial \theta}{\partial z} = 0, \quad z = 0, \quad 0 \leq r \leq R_T;$$

боковая поверхность:

$$\psi = 0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial r} = 0, \quad \theta = 1, \quad 0 \leq z \leq H, \quad r = R_T;$$

свободная поверхность:

$$\psi = 0, \quad \omega = -\frac{Ma}{Pr} \frac{\partial \theta}{\partial z}, \quad \frac{\partial \theta}{\partial z} = 0, \quad z = H, \quad 1 \leq r \leq R_T;$$

фронт кристаллизации:

$$\psi = 0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial z} = 0, \quad \theta = 0, \quad z = H, \quad 0 \leq r \leq 1;$$

ось симметрии:

$$\psi = 0, \quad \omega = 0, \quad \frac{\partial \theta}{\partial r} = 0, \quad 0 \leq z \leq H, \quad r = 0.$$

В режимах термогравитационной конвекции на свободной поверхности расплава ставятся условия отсутствия трения и сохраняются условия недеформируемости и адиабатичности границы:

$$\psi = 0, \quad \omega = 0, \quad \frac{\partial \theta}{\partial z} = 0, \quad z = H, \quad 1 \leq r \leq R_T;$$

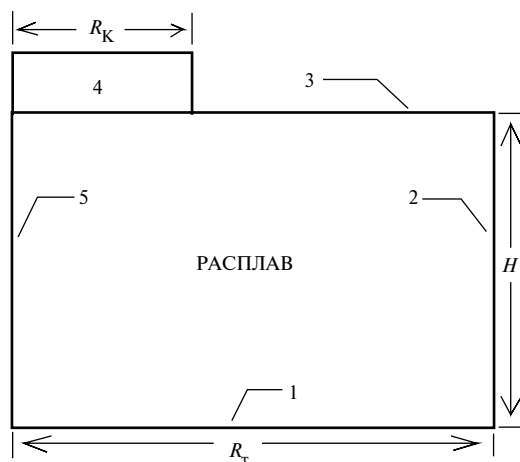


Рис. 1. Расчетная область: 1 — дно; 2 — боковая стенка; 3 — свободная граница; 4 — кристалл; 5 — ось симметрии

Численное моделирование методом конечных разностей проводилось в основном на равномерной сетке 160×160 или 320×320 . Эксперименты выполнены на стенде с использованием методик визуализации и измерений, подробно описанных в [7—11]. Схема расчетной области показана на рис. 1.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

Термогравитационная конвекция исследована в условиях отсутствия трения на свободной поверхности жидкости. Расчеты проведены при $Pr = 0,05; 16; 50$ и 2700 , что соответствует диапазону от расплавов полупроводников до вязких оксидов. Изучена эволюция структуры течения жидкости с ростом Gr . На рис. 2, 3, слева — изолинии функции тока, справа — изотермы, и на всех рисунках представлена только правая часть осесимметричных полей изолиний для геометрии области: $H/R_T = 0,7, R_T/R_K = 2,76$. На рис. 2 показаны формы меридионального течения и изотерм при одном и том же числе Рэлея $Ra = 500$. Для $Pr = 50, 16, 2700$ формы течения и поля изотерм практически совпадают. Формы изотерм при $Pr = 0,05$ тоже близки к формам изотерм при остальных числах Pr , но структура течения отлична. Сравнение меридионального течения и изотерм при одном и том же числе $Gr = 100$ для разных чисел Pr показывает, что уже при небольшом числе Gr изолинии функции тока и изотермы существенно отличаются. Для жидкого металла этот режим, практически, совпадает с режимом теплопроводности (рис. 3). А для жидкости с $Pr = 2700$ структура течения изменилась наибольшим образом, т.е. система все в большей мере уходит от режима теплопроводности к режиму пограничного слоя с ростом Pr . В диапазоне $16 \leq Pr \leq 2700$ уже при слабой конвекции ($Gr = 10$) форма изотерм существенно меняется из-за выноса горячей жидкости в верхнюю часть объема. При $Gr = 100$ изотермы в ядре жидкости горизонтальны, т.е. уже при практически ничтожных перепадах температуры в системе четко прослеживается переход к режиму пограничного слоя. Формируется устойчиво стратифицированное застойное ядро, и циркуляция жидкости по контуру области все более интенсивная с ростом Gr . В случае $Pr = 0,05$ почти до $Gr = 2 \cdot 10^3$ изотермы сохраняют вид, близкий к характерному для режима теплопроводности (рис. 3, а). В диапазоне $2 \cdot 10^3 \leq Gr \leq 10^4$ на изотермах в ядре жидкости появляются горизонтальные участки (рис. 3, б). Эту особенность отслеживают радиальные распределения теплового потока (рис. 4) и зависимость интегрального теплового потока от Gr (рис. 5). В области до $Gr \leq 10^3$ кривые радиальных распределений теплового потока практически сливаются (рис. 4). Конвекция существенно влияет на распределение температуры в жидком металле и на теплообмен, начиная с $Gr \geq 2 \cdot 10^3$. При дальнейшем росте Gr на качественном уровне форма изолиний ψ и T почти не отличается от случая больших значений Pr . Таким образом многие черты

поведения жидкометаллических систем, в том числе расплава кремния, можно моделировать, используя прозрачные имитаторы расплава. С ростом Gr локальный тепловой поток имеет все более выраженный максимум на передней кромке. Вниз по потоку локальный тепловой поток становится все меньше. Особенности формирования поля температуры приводят к тому, что при росте монокристалла в режиме подавляющего влияния свободной конвекции фронт кристаллизации будет коническим. Это подтверждено в физическом эксперименте (рис. 6). Значение числа Nu (рис. 5) при Ra = 500 для жидкостей с числами Прандтля 16, 50, 2700 примерно одинаково и равно 1.76, для Pr = 0.05 Nu = 1.27. При Ra = 5 × 10⁴ заметны отличия в значениях Nu: они равны 4.95, 5.07, 5.15 для Pr = 16, 50, 2700 соответственно, а для Pr = 0.05 Nu = 3.21. Вклад конвекции в теплообмен при Pr = 0.05 становится заметным и растет по примерно тому же закону, что и при 16 ≤ Pr ≤ 2700, при достижении достаточно большой интенсивности конвективного течения: при числах Грасгофа на три порядка выше, чем для сред с 16 ≤ Pr ≤ 2700. В диапазоне 0 ≤ Gr ≤ 2500 для Pr = 16 с высокой точностью выполняется зависимость Nu = (0.81 ± 0.08)Gr^{0.227 ± 0.01}. В диапазоне чисел 16 ≤ Pr ≤ 2700 данные по интегральному теплообмену с высокой точностью обобщаются в виде зависимости Nu (Gr, Pr): Nu = (0.55 ± 0.035)Pr^{0.206 ± 0.009}Gr^{0.2}.

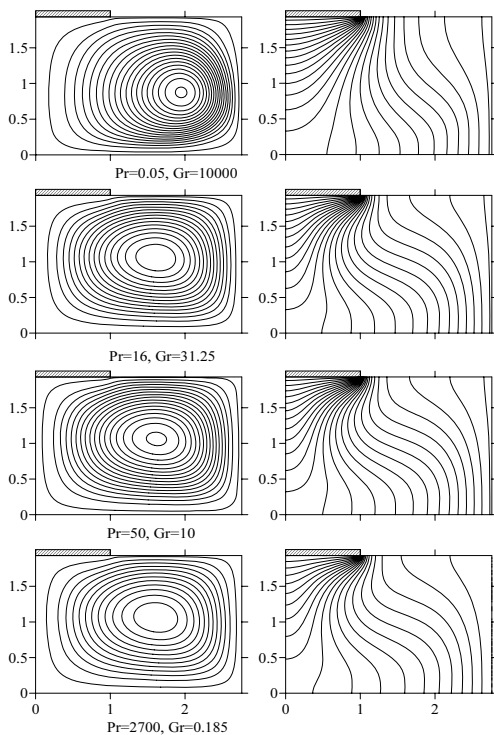


Рис. 2. Зависимость структуры течения от Pr при Ra = 500

В экспериментальных исследованиях (в наземных условиях) отдельно изучить влияние сил плавучести и термокапиллярного эффекта невозможно. Роль численных исследований резко возрастает. Открываются возможности понимания действия и

относительной роли массовых и поверхностных сил в генерации конвективного течения. Результаты расчетов в режимах термокапиллярной конвекции были представлены в [10, 11]. Влияние термокапиллярного эффекта приводит к подтягиванию горячей жидкости к кромке кристалла и резкому росту локального теплового потока на кромке кристалла (почти в три раза для сред с Pr = 16 и 45,6). На рис. 7 показана зависимость числа Nu от Gr при заданном Ma с зависимостью в режиме термогравитационной конвекции. Отсюда видно, что при сохранении влияния на локальный тепловой поток на кромке с ростом Gr вклад в интегральный тепловой поток снижается.

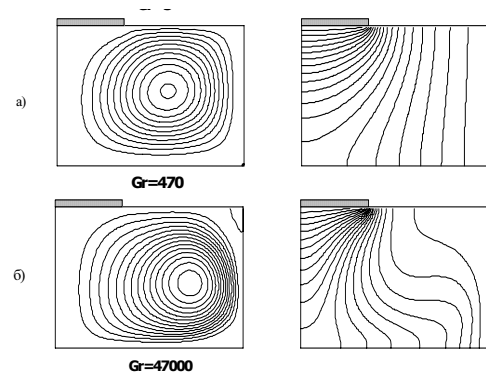


Рис. 3. Зависимость структуры течения от Gr при Pr = 0,05

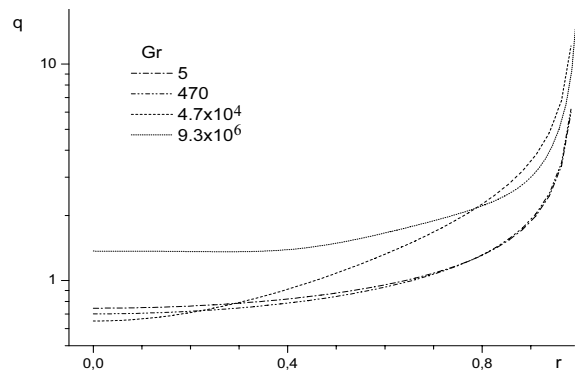


Рис. 4. Зависимости радиальных распределений локальных тепловых потоков от Gr при Pr = 0,05

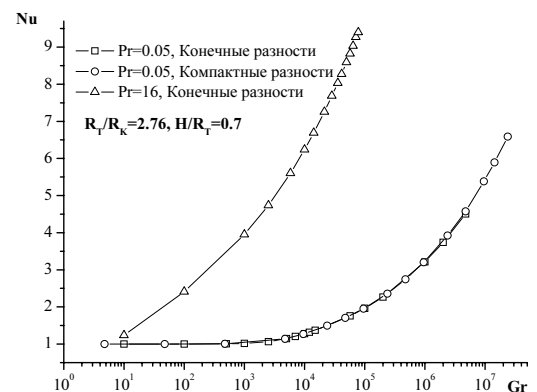


Рис. 5. Зависимость Nu от Gr в режиме термогравитационной конвекции

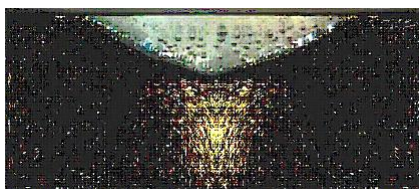


Рис. 6. Форма фронта: $Gr = 3\ 280$; $Ma = 3\ 165$; $Re = 24$

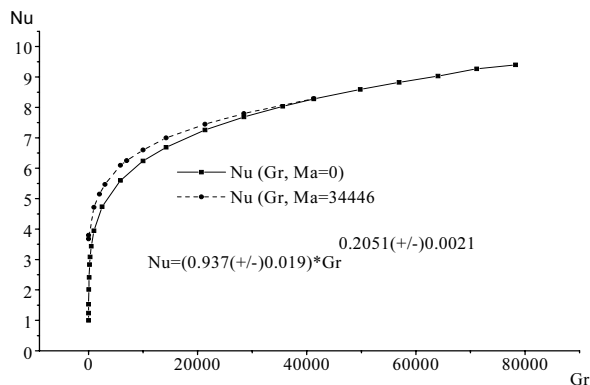


Рис. 7. Зависимость Nu от Gr в режиме тепловой гравитационно-капиллярной конвекции

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Экспериментально и численно проведено моделирование гидродинамики и конвективного тепло-массообмена в системах, подобных используемым для вытягивания монокристаллов из расплавов классическим вариантом метода Чохральского. Исследована ламинарная конвекция различной природы: термогравитационной, термокапиллярной и гравитационно-капиллярной. Изучены закономерности локального и интегрального теплообмена при каждом типе конвекции с ростом чисел Грасгофа и Марангони. Расчеты проведены в диапазонах чисел Грасгофа $0 \leq Gr \leq 4 \cdot 10^8$, Марангони $0 \leq Ma \leq 6,5 \cdot 10^4$. Воспроизведена пространственная форма осесимметричного ламинарного течения, наблюдаемая экспериментально. Эксперименты на модельной жидкости с реальной кристаллизацией показали, что выводы о возможных формах фронта кристаллизации, сделанные по результатам исследований однофазной конвекции в различных режимах конвекции, подтверждаются.

Работа была поддержана РФФИ (гранты № 02-01-00808а и № 05-01-00813а) и СО РАН (интеграционные проекты № 155-2003 и № 84-2006).

СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ

$Gr = \beta g \Delta T R_K^3 / \nu^2$ — число Грасгофа;

$Ra = \beta g \Delta T R_K^3 / \alpha \nu$ — число Рэлея;

$Ma = (-\partial \sigma / \partial T) \cdot \Delta T \cdot R_K / \mu \alpha$ — число Марангони;

$Pr = \nu / a$ — число Прандтля;

T — температура, К;

ΔT — перепад температуры, К;

H — высота слоя расплава;

R_K, R_T — радиусы кристалла и тигля;

β — коэффициент объемного расширения;

g — ускорение свободного падения;

$a = \lambda / \rho c_p$ — коэффициент температуропроводности;

μ — коэффициент динамической вязкости;

ν — коэффициент кинематической вязкости;

σ — коэффициент поверхностного натяжения;

λ — коэффициент теплопроводности;

ρ — плотность;

c_p — теплоемкость при постоянном давлении.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Тепло- и массообмен** при получении монокристаллов / П.К. Конаков, Г.Е. Веревошкин, Л.А. Горьяинов и др.; М.: Металлургия, 1971. 240 с.
2. **Шашков Ю.М.** Выращивание монокристаллов методом вытягивания. М.: Металлургия, 1982. 312 с.
3. **Математическое** моделирование конвективного теплообмена на основе уравнений Навье-Стокса / В.И. Полежаев, А.В. Бунэ и др. М.: Наука, 1987.
4. **Бердников В.С., Борисов В.Л.** Экспериментальное моделирование гидродинамики расплава при выращивании монокристаллов методом Чохральского // Теплофизические явления при кристаллизации и конденсации металлов: Сб. науч. тр. ИТ СО РАН. Новосибирск, 1981. С. 96—106.
5. **Бердников В.С., Борисов В.Л., Марков В.А., Панченко В.И.** Лабораторное моделирование макроскопических процессов переноса в расплаве при выращивании монокристаллов методом вытягивания // Гидродинамика и теплообмен в технологии получения материалов. М.: Наука, 1990. С. 68—88.
6. **Бердников В.С., Панченко В.И., Соловьев С.В.** Тепловая гравитационно-капиллярная конвекция в методе Чохральского // Теплофизика кристаллизации и высокотемпературной обработки материалов: Сб. науч. тр. ИТ СО РАН. Новосибирск, 1990. С. 162—199.
7. **Бердников В.С., Винокуров В.В., Панченко В.И., Соловьев С.В.** Теплообмен в классическом методе Чохральского // ИФЖ. 2001. Т. 74. № 4. С. 122—127.
8. **Berdnikov V.S., Vinokurov V.V., Gaponov V.A., Markov V.A.** Complex simulation of crystal pulling from the melt // Single crystal growth and heat and mass transfer: Proc. 4-th Int. Conf. Obninsk, 2001. Vol. 1. P. 80—106.
9. **Berdnikov V.S., Vinokourov V.A., Vinokourov V.V., Gaponov V.A.** Mixed convection flow of the melt and heat transfer during Czochralski crystal growth // Single crystal growth and heat & mass transfer: Proc. 5-th Int. Conf. Obninsk, 2003. Vol. 1. P. 43—67.
10. **Xiao Q., Derby J.J.** Three dimensional melt flow in Czochralski oxide growth: high-resolution, massively parallel, finite element computations // J. Crystal Growth. 1995. Vol. 152. N 3. P. 169—181.
11. **Polezhaev V.I., Bessonov O.A., Nikitin N.V., Nikitin S.A.** Convective interaction and instabilities in GaAs Czochralski model // J. Crystal growth. 2001. Vol. 230. P. 40—47.