ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 64 за 2025 г.

ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

А.О. Гусев, О.С. Мажорова

Численное исследование осесимметричного движения жидкости в модельной системе Чохральского

Статья доступна по лицензии
Creative Commons Attribution 4.0 International

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Гусев А.О., Мажорова О.С. Численное исследование осесимметричного движения жидкости в модельной системе Чохральского // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2025. № 64. 29 с. EDN: XZJMHV
https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2025-64

Ордена Ленина

ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ

им. М.В. Келдыша

Российской академии наук

А.О. Гусев, О.С. Мажорова

Численное исследование осесимметричного движения жидкости в модельной системе Чохральского

Москва — 2025

Гусев А.О., Мажорова О.С.

Численное исследование осесимметричного движения жидкости в модельной системе Чохральского

В работе исследуются структуры осесимметричных течений, формирующихся во вращающемся цилиндре, верхняя граница которого состоит из двух участков — вращающегося диска и свободной поверхности. Физические и геометрические параметры рассмотренной системы соответствуют развитой стадии процесса выращивания монокристаллов методом Чохральского. Изучено влияние естественной и вынужденной конвекции на теплоперенос в системе. В расчетах используется полностью консервативная разностная схема, гарантирующая выполнение закона изменения импульса, кинетической и внутренней энергии.

Ключевые слова: Естественная конвекция, вынужденная конвекция, вращающаяся жидкость, метод Чохральского, численное моделирование

Gusev A.O., Mazhorova O.S.

Numerical study of axisymmetric fluid motion in the model of the Czochralski system

The structures of axisymmetric flows formed in a rotating cylinder are studied. The upper boundary of the cylinder consists of a rotating disk and a free surface. The physical and geometrical parameters of the system under consideration align with advanced stage of Czochralski single-crystal growth. The influence of natural and forced convection on heat transfer within the system is investigated. The fully conservative numerical scheme which ensures the validity of momentum, kinetic, and internal energy balances is employed in computations.

Key words: Natural convection, forced convection, rotating fluid, Czochralski crystal growth, numerical simulation

1 Введение

В настоящее время одним из основных способов получения объемных монокристаллов из расплава является метод Чохральского. Свойства выращиваемых материалов формируются в результате сложного взаимодействия различных физико–химических процессов, протекающих в расплаве, на поверхности кристалла и внутри него. Важную роль здесь играет тепломассоперенос в расплаве, обусловленный естественной и вынужденной конвекцией. Поэтому исследованию гидродинамических процессов, протекающих в системе, уделяется особое внимание при разработке технологических режимов, обеспечивающих получение материалов с заданными свойствами. Теоретическое и экспериментальное исследование движения жидкости в областях с подвижными границами сопряжено со значительными трудностями. Вместе с тем изучение упрощенных моделей, отражающих основные особенности технологического процесса, позволяет получить полезные сведения, которые могут быть использованы при разработке и оптимизации режимов выращивания монокристаллов.

Применительно к методу Чохральского параметрические исследования конвективного теплопереноса, как правило, проводятся в осесимметричном приближении. Предполагается, что расплав находится во вращающемся цилиндре, верхняя граница которого состоит из двух участков — вращающегося диска и свободной поверхности. Температура на диске фиксирована и равна температуре фазового перехода.

В указанной постановке задача рассматривается многими авторами. Так, в работе [1] изучается взаимодействие течений, вызванных вращением диска и контейнера. Естественная конвекция во вращающемся цилиндре рассматривается в работах [2–4]. Анализ влияние конвекции Марангони на общую структуру течения проводится в работах [5, 6]. Устойчивость осесимметричных течений изучается в рамках аналогичной трехмерной постановки в работах [7, 8].

В данной работе рассмотрено влияние естественной и вынужденной конвекции, вызванной вращением кристалла и тигля, на общую структуру течения и тепловой поток, протекающий через межфазную границу. В расчетах использовалась полностью консервативная разностная схема, гарантирующая выполнение законов изменения импульса, кинетической и внутренней энергии.

2 Постановка задачи

Математическое моделирование строится в предположении, что расплав является вязкой несжимаемой жидкостью, теплоперенос в нем осуществляется механизмами конвекции и теплопроводности. Задача рассматривается в цилиндрической системе координат, при этом предполагается, что поля скорости жидкости $\tilde{\boldsymbol{V}}$, давления $\tilde{p}$ и температуры $\tilde{T}$ не зависят от угловой координаты φ, т.е. $\tilde{\boldsymbol{V}} = (V^r(t,r,z), V^\varphi(t,r,z), V^z(t,r,z))$, $\tilde{p} = \tilde{p}(t,r,z)$, $\tilde{T} = \tilde{T}(t,r,z)$. Расчет ведется в области $D(r,z) = [0, R_{\text{cruc}}] \times [0, H]$ (см. рис. 1). Фронт кристаллизации Γ_1 и свободная поверхность расплава Γ_2 предполагаются плоскими и неподвижными, фазовый переход происходит при температуре T_{ph}. Боковая стенка тигля имеет постоянную температуру T_{cruc}. Тигель и кристалл вращаются с постоянными угловыми скоростями $\tilde{\Omega}_{\text{cruc}}$ и $\tilde{\Omega}_{\text{cryst}}$ соответственно.

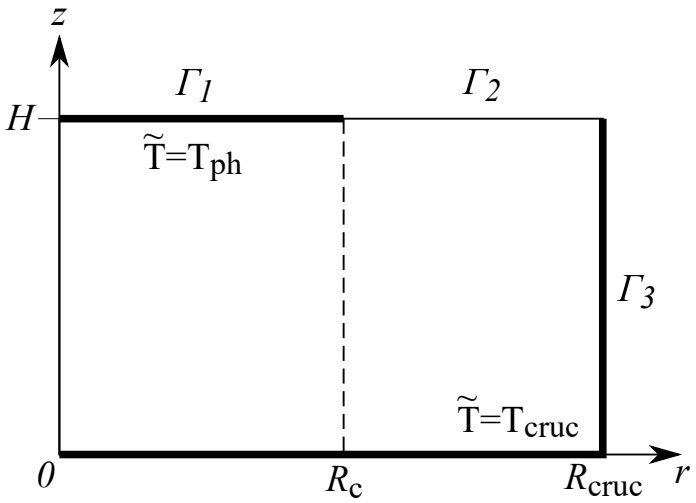


Рис. 1. Расчетная область

Математическая модель процесса записывается в безразмерном виде. Пространственный масштаб R_0 определяется радиусом тигля R_{cruc}. Характерные времена процессов переноса приведены в таблице 1, где ν — кинематическая вязкость, $\varkappa$ — температуропроводность, β_T — коэффициент температурного расширения. В зависимости от постановки задачи в качестве масштаба времени t_0 используется одно из времен — t_ν, t_{cruc} или t_{cryst}. Отклонение температуры от температуры фазового перехода определим как $T = (\tilde{T} - T_{ph})/(T_{\text{cruc}} - T_{\text{ph}})$. Безразмерная скорость $V^\alpha = \tilde{V}^\alpha / V_0$, $\alpha = r, \varphi, z$, где $V_0 = R_0/t_0$ — характер-

ная скорость движения жидкости. Давление $p = \tilde{p}/(2p_0)$, здесь $p_0 = \rho V_0^2/2$ — характерное динамическое давление, ρ — плотность жидкости. Безразмерные параметры, характеризующие процессы переноса в рассматриваемой системе, приведены в таблице 2.

Таблица 1. Временные масштабы

Величина	Определение	Значение
Характерное время вязкой диссипации, с	$t_\nu = R_0^2/\nu$	~ 10000
Характерное время температуропроводности, с	$t_\varkappa = R_0^2/\varkappa$	~ 1000
Характерные времена конвективных процессов, с	$t_{\text{nat}} = [R_0/(g\beta_T(T_{\text{cruc}} - T_{\text{ph}}))]^{\frac{1}{2}}$	~ 1
	$t_{\text{cryst}} = \Omega_{\text{cryst}}^{-1}$	~ 1
	$t_{\text{cruc}} = \Omega_{\text{cruc}}^{-1}$	~ 1

Таблица 2. Безразмерные параметры

Величина	Определение	Физический смысл	Значение
Число Грасгофа	$\text{Gr} = g\beta_T(T_{\text{cruc}} - T_{\text{ph}})R_0^3/\nu^2$	$\frac{\text{Подъемные силы}}{\text{Вязкие силы}}$	$\sim 10^7$
Число Рейнольдса	$\text{Re} = R_0 V_0/\nu$	$\frac{\text{Инерционные силы}}{\text{Вязкие силы}}$	~ 5000
Число Ричардсона	$\text{Ri} = \text{Gr}/\text{Re}^2$	$\frac{\text{Естественная конвекция}}{\text{Вынужденная конвекция}}$	~ 1
Число Прандтля	$\text{Pr} = \nu/\varkappa$	$\frac{\text{Диссипация импульса}}{\text{Диссипация внутренней энергии}}$	~ 0.08
Число Пекле	$\text{Pe} = \text{Re}\,\text{Pr}$	$\frac{\text{Перенос за счет движения}}{\text{Теплопроводность}}$	~ 500

Основные уравнения. Для описания движения жидкости используются уравнения Навье — Стокса в приближении Обербека — Буссинеска. В цилин-

дрической системе координат имеем

$$\frac{\partial V^r}{\partial t}+\frac{1}{r}\left[\frac{\partial(rV^rV^r)}{\partial r}+\frac{\partial(rV^zV^r)}{\partial z}-(V^\varphi)^2\right]=-\frac{\partial p}{\partial r}+\frac{1}{\mathrm{Re}}\left(\Delta V^r-\frac{V^r}{r^2}\right), \tag{1}$$

$$\frac{\partial V^\varphi}{\partial t}+\frac{1}{r}\left[\frac{\partial(rV^rV^\varphi)}{\partial r}+\frac{\partial(rV^zV^\varphi)}{\partial z}+V^rV^\varphi\right]=\frac{1}{\mathrm{Re}}\left(\Delta V^\varphi-\frac{V^\varphi}{r^2}\right), \tag{2}$$

$$\frac{\partial V^z}{\partial t}+\frac{1}{r}\left[\frac{\partial(rV^rV^z)}{\partial r}+\frac{\partial(rV^zV^z)}{\partial z}\right]=-\frac{\partial p}{\partial z}+\frac{1}{\mathrm{Re}}\Delta V^z-\frac{\mathrm{Gr}}{\mathrm{Re}^2}T, \tag{3}$$

$$\frac{1}{r}\left[\frac{\partial(rV^r)}{\partial r}+\frac{\partial(rV^z)}{\partial z}\right]=0. \tag{4}$$

Конвективный теплообмен в расплаве описывается уравнением

$$\frac{\partial T}{\partial t}+\frac{1}{r}\left[\frac{\partial(rV^rT)}{\partial r}+\frac{\partial(rV^zT)}{\partial z}\right]=\frac{1}{\mathrm{Re}\,\mathrm{Pr}}\Delta T. \tag{5}$$

Граничные условия. На оси тигля в силу симметрии

$$V^r|_{r=0}=0,\quad V^\varphi|_{r=0}=0,\quad \partial V^z/\partial r|_{r=0}=0.$$

На фронте кристаллизации и поверхности тигля выполнены условия прилипания и непротекания

$$V^r|_{\Gamma_1\cup\Gamma_3}=0,\quad V^\varphi|_{\Gamma_1}=r\Omega_{\mathrm{cryst}},\quad V^\varphi|_{\Gamma_3}=r\Omega_{\mathrm{cruc}},\quad V^z|_{\Gamma_1\cup\Gamma_3}=0. \tag{6}$$

Здесь $\Omega_{\mathrm{cryst}}=\tilde{\Omega}_{\mathrm{cryst}}t_0$, $\Omega_{\mathrm{cruc}}=\tilde{\Omega}_{\mathrm{cruc}}t_0$.

Условие Марангони на плоской свободной границе имеет вид

$$\partial V^r/\partial z|_{\Gamma_2}=\frac{1}{r}\frac{\mathrm{Mn}}{\mathrm{Pe}}\frac{\partial T}{\partial r},\quad \partial V^\varphi/\partial z|_{\Gamma_2}=0,\quad V^z|_{\Gamma_2}=0. \tag{7}$$

В том случае, когда свободная поверхность покрыта слоем вязкого флюса число Марангони изменяется в диапазоне $10^{-4}<\mathrm{Mn}<10^4$, и капиллярное течение, обусловленное перепадом температуры на свободной поверхности, имеет малую интенсивность [6, 9, 10]. Предварительные расчеты показали, что для $\mathrm{Gr}=10^5\div$

10^7 и $\mathrm{Mn} = 10^4$ интенсивность естественной конвекции увеличивается менее чем на 10 процентов по сравнению со случаем $\mathrm{Mn} = 0$. Поэтому положим число Марангони в условии (7) равным нулю:

$$\partial V^r/\partial z|_{\Gamma_2} = 0, \quad \partial V^\varphi/\partial z|_{\Gamma_2} = 0, \quad V^z|_{\Gamma_2} = 0. \tag{8}$$

Анализ экспериментальных данных показывает, что вблизи свободной поверхности жидкость движется только в азимутальном направлении [11, 12]. Поэтому в работе основные расчеты проводились с граничным условием

$$V^r|_{\Gamma_2} = 0, \quad \partial V^\varphi/\partial z|_{\Gamma_2} = 0, \quad V^z|_{\Gamma_2} = 0. \tag{9}$$

Граничные условия для уравнения конвективного теплопереноса имеют следующий вид. Из условий симметрии на оси

$$\partial T/\partial r|_{r=0} = 0.$$

На границе Γ_1 температура равна температуре фазового перехода

$$T|_{\Gamma_1} = 0.$$

На боковой поверхности тигля поддерживается постоянная температура

$$T|_{r=1} = 1.$$

Дно тигля теплоизолированно

$$\partial T/\partial z|_{z=0} = 0.$$

Для простоты предполагается, что на свободной поверхности жидкости температура изменяется линейно, т.е.

$$T|_{\Gamma_2} = (r - R_{\mathrm{cryst}}/R_{\mathrm{cruc}})/(1 - R_{\mathrm{cryst}}/R_{\mathrm{cruc}}).$$

3 Вычислительный алгоритм

Алгоритм для численного решения уравнений (1)–(4) построен на основе описанной в работе [13] полностью консервативной разностной схемы для трехмерных уравнений Навье — Стокса в цилиндрической системе координат. Эта схема гарантирует выполнение закона изменения импульса и закона сохранения массы. Уравнение, описывающее закон изменения кинетической энергии, является прямым следствием из разностных уравнений движения. Для расчета осесимметричных течений производные по φ в сеточных уравнениях для трехмерного случая нужно положить равными нулю.

В уравнении конвективного теплообмена диссипативные члены аппроксимируются стандартным образом. Для аппроксимации конвективных членов используется схема Аракавы, гарантирующая, что члены переноса не вносят вклад в баланс внутренней энергии и квадрата температуры [14].

Система сеточных уравнений, полученная в результате аппроксимации исходной дифференциальной задачи, решается методом расщепления по физическим процессам. На каждом шаге по времени совместно решаются сеточные уравнение неразрывности и уравнения движения для радиальной и осевой компонент вектора скорости, затем вычисляется распределение азимутальной компоненты скорости. На следующем этапе с использованием полученного распределения скоростей решается уравнение конвективной теплопроводности.

4 Результаты расчетов

Течение в расплаве формируется в результате нелинейного взаимодействия механизмов тепловой и вынужденной конвекции, связанной с вращением тигля и кристалла. Проиллюстрируем влияние каждого из указанных факторов на структуру течения и результат их совместного действия.

Физические и геометрические параметры расчетов соответствуют развитой стадии выращивания соединения GaAs методом Чохральского. Расплав заполняет область с отношением сторон $H/R_{\mathrm{cruc}} = 0.5$, отношение радиусов кристалла и тигля $R_{\mathrm{cryst}}/R_{\mathrm{cruc}} = 0.5$. В безразмерной форме перепад температуры между фронтом кристаллизации и боковой стенкой тигля определяет значение числа Грасгофа, а скорости вращения кристалла и тигля — значение числа Рейнольдса.

Численное моделирование осуществлялось на прямоугольной равномерной сетке, состоящей из 200 узлов в радиальном и 100 узлов в вертикальном направлении, шаг по времени $\tau = 0.1t_0$. Расчеты показали, что во всех рассмотренных случаях дальнейшее увеличение пространственного разрешения сетки не приводило к существенному уточнению результата.

Перенос тепла механизмом теплопроводности ($\Omega_{\mathrm{cruc}} = 0$, $\Omega_{\mathrm{cryst}} = 0$, $\boldsymbol{g} = 0$.)

Рассмотрим случай, когда теплоперенос в жидкости осуществляется исключительно механизмом теплопроводности. В этих расчетах в качестве масштаба времени выбран $t_0 = t_\varkappa$. Полученное в расчете стационарное распределение температуры приведено на рисунке 2. В покоящейся жидкости наблюдается перепад температуры между стенкой тигля и фронтом кристаллизации, который приводит к возникновению термогравитационной конвекции при $\boldsymbol{g} \neq 0$.

Для анализа влияния конвективного движения на теплопередачу в окрестности межфазной границы введем величину $\eta = Q/Q_\varkappa$, где Q — усредненный по

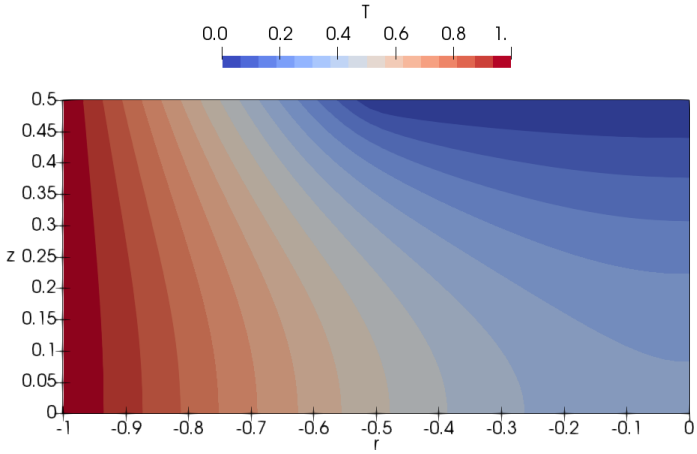


Рис. 2. Распределение температуры в области при $\Omega_{\text{cruc}} = \Omega_{\text{cryst}} = 0$ и $\boldsymbol{g} = 0$

радиусу тепловой поток на границе кристалл/расплав в движущейся жидкости:

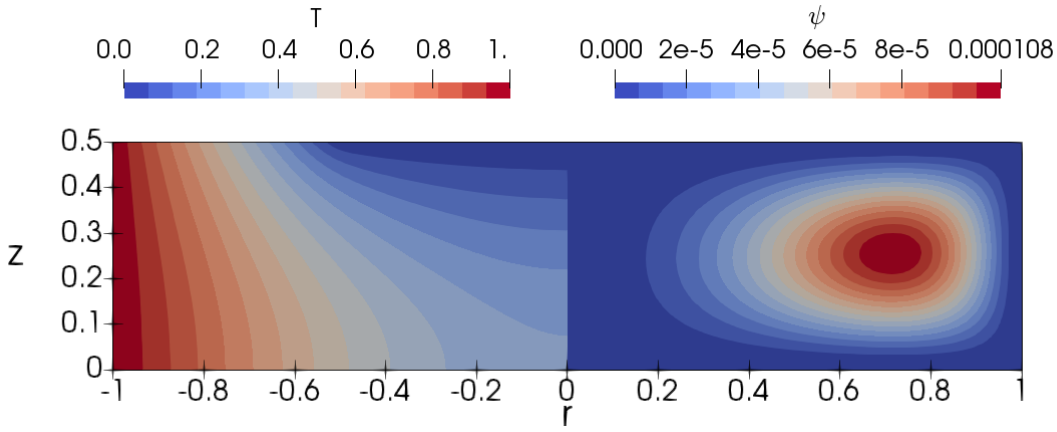
$$Q = \frac{2}{R_{\text{c}}^2} \int_0^{R_{\text{c}}} q^z(r)\, r dr, \quad q^z(r) = -k\, \partial T/\partial z,$$

$Q_{\varkappa}$ — поток, сформировавшийся механизмом теплопроводности в неподвижной среде.

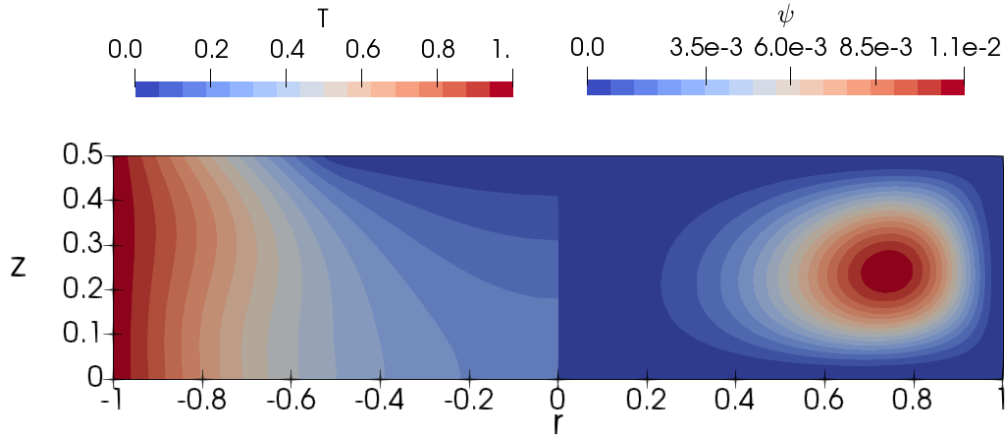
Естественная конвекция ($\Omega_{\text{cruc}} = 0$, $\Omega_{\text{cryst}} = 0$)

В этом случае в качестве масштаба времени используется $t_0 = t_\nu$, тогда $\text{Re} = R_0^2/(\nu t_\nu) = 1$ и уравнения (1)–(5) описывают термогравитационную конвекцию [15]. Под влиянием перепада температуры между фронтом и более горячей стенкой в расплаве возникает конвективное движение.

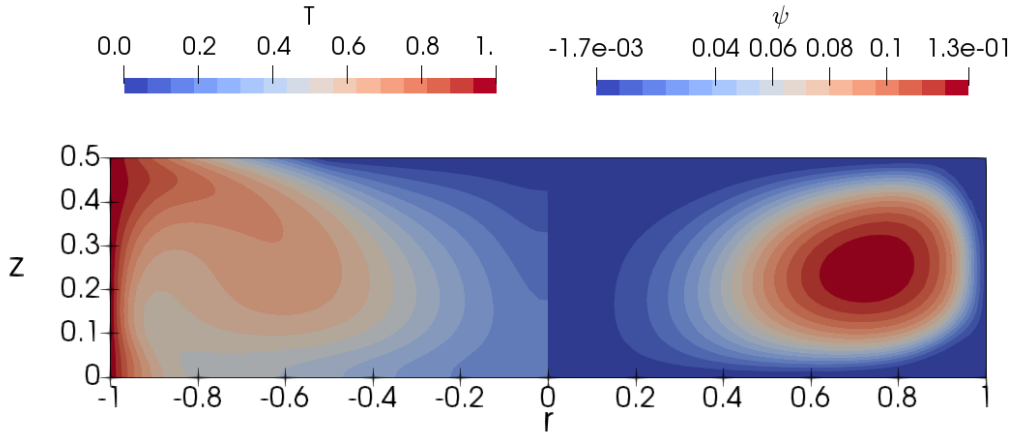
На рисунке 3 представлены стационарные распределения температуры и функции тока ψ, полученные в расчетах при $\text{Gr} = 10^3$, $\text{Gr} = 10^5$, $\text{Gr} = 10^7$. Компоненты вектора скорости и функция тока связаны соотношениями $rV^r = \partial\psi/\partial z$, $rV^z = -\partial\psi/\partial r$. Во всех рассмотренных случаях в расплаве формируется крупный тороидальный вихрь, локализованный в области под свободной поверхностью. Жидкость поднимается вдоль горячей стенки тигля, затем движется к центру контейнера и опускается у его оси.



(a)



(b)



(c)

Рис. 3. Естественная конвекция. Распределение температуры (слева) и функции тока (справа) при $\mathrm{Gr} = 10^3$ ($\eta \approx 1$) (a); при $\mathrm{Gr} = 10^5$ ($\eta \approx 0.87$) (b); при $\mathrm{Gr} = 10^7$ ($\eta \approx 1.85$) (c)

Интенсивность гидродинамических процессов при $\mathrm{Gr} = 10^3 \div 10^4$ мала, теплопередача в системе преимущественно осуществляется механизмом теплопроводности и $\eta = Q/Q_\varkappa \approx 1$. Развитие конвективного движения в расплаве приводит к уменьшению теплового потока в центре кристалла по сравнению со случаем чистой теплопроводности: $q^z(0)/q^z_\varkappa(0) \approx 0.68$ при $\mathrm{Gr} = 10^5$ и $q^z(0)/q^z_\varkappa(0) \approx 0.76$ для $\mathrm{Gr} = 10^7$. При умеренных значениях числа Грасгофа уменьшается и интегральный поток: $Q/Q_\varkappa \approx 0.87$ для $\mathrm{Gr} = 10^5$. С ростом интенсивности конвективного движения ($\mathrm{Gr} > 10^6$) увеличивается поступление тепла от горячей стенки тигля к фронту кристаллизации и интегральный поток превосходит соответствующий поток в покоящейся жидкости: для $\mathrm{Gr} = 10^7$ параметр $\eta \approx 1.85$. Вблизи значений числа Грасгофа $\mathrm{Gr} \approx 5 \cdot 10^7$ в расплаве развиваются нестационарные течения.

В расчетах, результаты которых представлены на рисунке 3, использовались граничные условия (9), полученные в предположении, что под флюсом отсутствует радиальное течение жидкости. Для сравнения была проведена серия расчетов с граничными условиями (7) и (8). Их результаты показали, что в случае плоской границы условия на свободной поверхности не оказывают существенного влияния на общую структуру течения и теплоперенос в системе. На рисунке 4 изображено стационарное распределение температуры и функции тока для $\mathrm{Gr} = 10^7$, полученное при $\mathrm{Mn} = 0$.

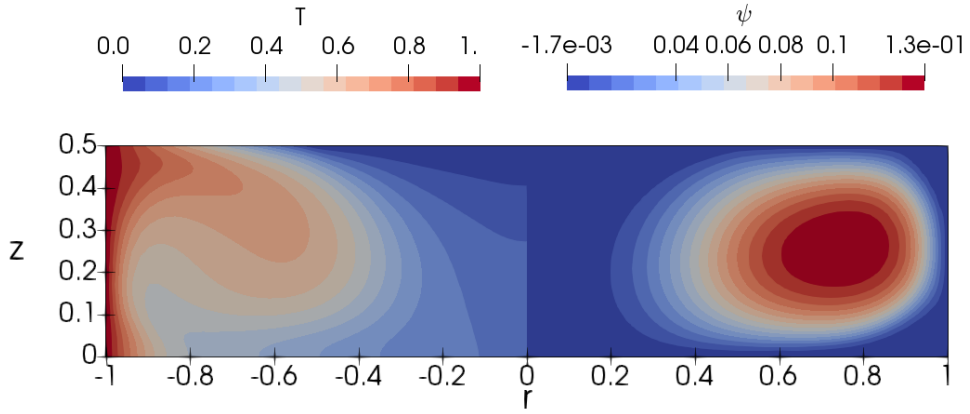


Рис. 4. Естественная конвекция. Распределение температуры (слева) и функции тока (справа) при $\mathrm{Gr} = 10^7$ и $\partial V^r/\partial z|_{\Gamma_2} = 0$ ($\eta \approx 1.7$)

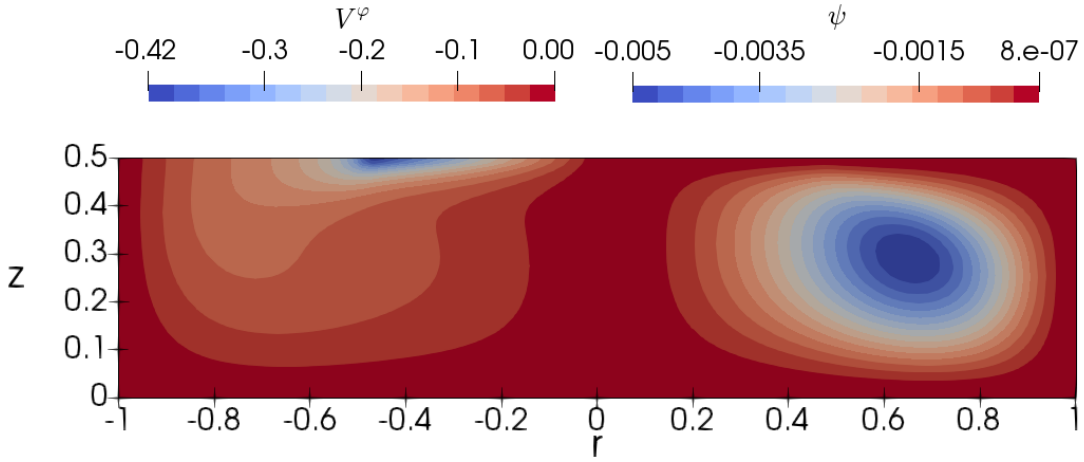
Вынужденная конвекция ($\boldsymbol{g} = 0$)

Изучим теперь течения, которые возникают в расплаве под влиянием вращения кристалла и тигля. Расчеты проводились при различных значениях чисел Рейнольдса $\mathrm{Re}_{\mathrm{cruc}} = R^2_{\mathrm{cruc}}\Omega_{\mathrm{cruc}}/\nu$, $\mathrm{Re}_{\mathrm{cr}} = R^2_{\mathrm{cryst}}\Omega_{\mathrm{cryst}}/\nu$ и Росби $\mathrm{Ro} = \Omega_{\mathrm{cryst}}/\Omega_{\mathrm{cruc}}$. Естественная конвекция в расплаве отсутствует.

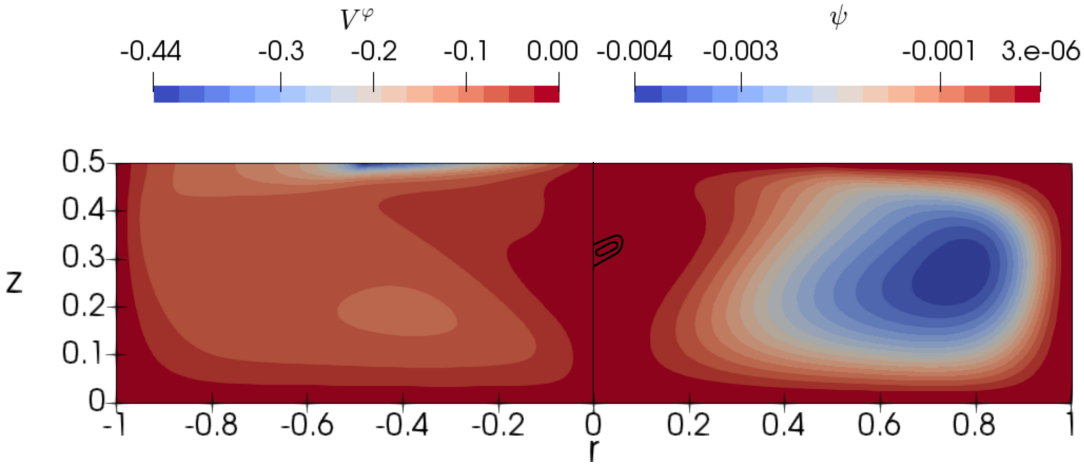
Вращение кристалла ($\Omega_{\mathrm{cruc}} = 0$). Структура течения в этом случае определяется только угловой скоростью вращения кристалла Ω_{cryst}. В качестве масштаба времени t_0 здесь выбирается $t_{\mathrm{cryst}} = \Omega^{-1}_{\mathrm{cryst}}$.

Результаты расчетов при различных значениях $\mathrm{Re}_{\mathrm{cr}}$ представлены на рисунке 5. В азимутальной плоскости движение жидкости сосредоточено в пограничном слое у поверхности кристалла. Наибольшее значение скорости вращения наблюдается вблизи точки контакта кристалла и свободной поверхности. Центробежная сила, возникающая в результате вращения, переносит жидкость вдоль свободной поверхности к боковой стенке тигля. Расплав опускается у стенки контейнера, а затем движется к центру области, где поднимается вдоль ее оси (рис. 5a). С увеличением скорости вращения пограничный слой вблизи поверхности кристалла становится тоньше, растет интенсивность течения в меридиональной плоскости, центр основного вихря смещается к боковой стенке тигля (рис. 5b, c). При $\mathrm{Re}_{\mathrm{cr}} = 1000$ у оси наблюдается слабый вторичный вихрь, характерный для течений жидкости в цилиндрических областях с неподвижной боковой поверхностью и вращающейся крышкой [16].

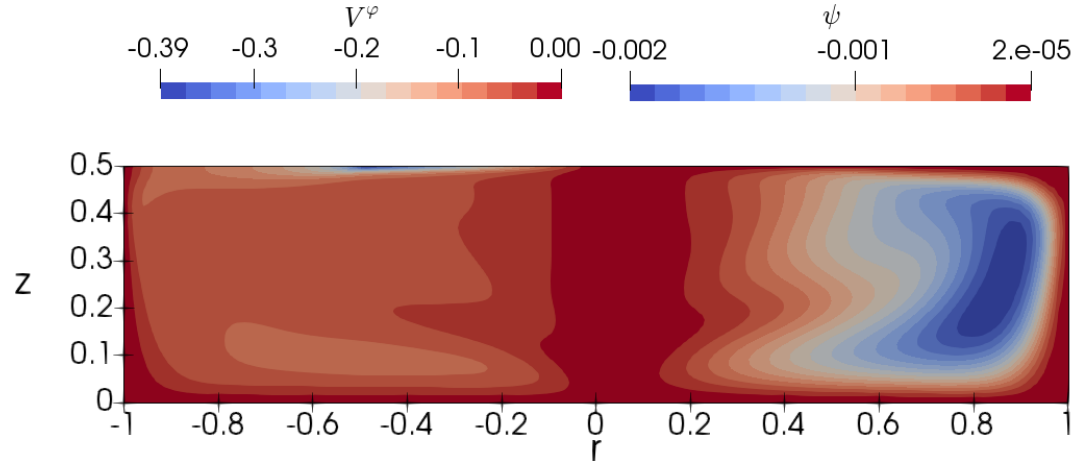
Во всех рассмотренных случаях движение расплава играет существенную роль в формировании поля температуры (Рис. 6). Для $\mathrm{Re}_{\mathrm{cr}} = 4000$ распределение температуры в области под кристаллом становится практически однородным по радиусу, параметр $\eta \approx 4.2$.



(a)



(b)



(c)

Рис. 5. Вращение кристалла. Распределение азимутальной скорости (слева) и функции тока (справа) при $\mathrm{Re}_{\mathrm{cr}} = 250$ (a); при $\mathrm{Re}_{\mathrm{cr}} = 1000$ (b); при $\mathrm{Re}_{\mathrm{cr}} = 4000$ (c)

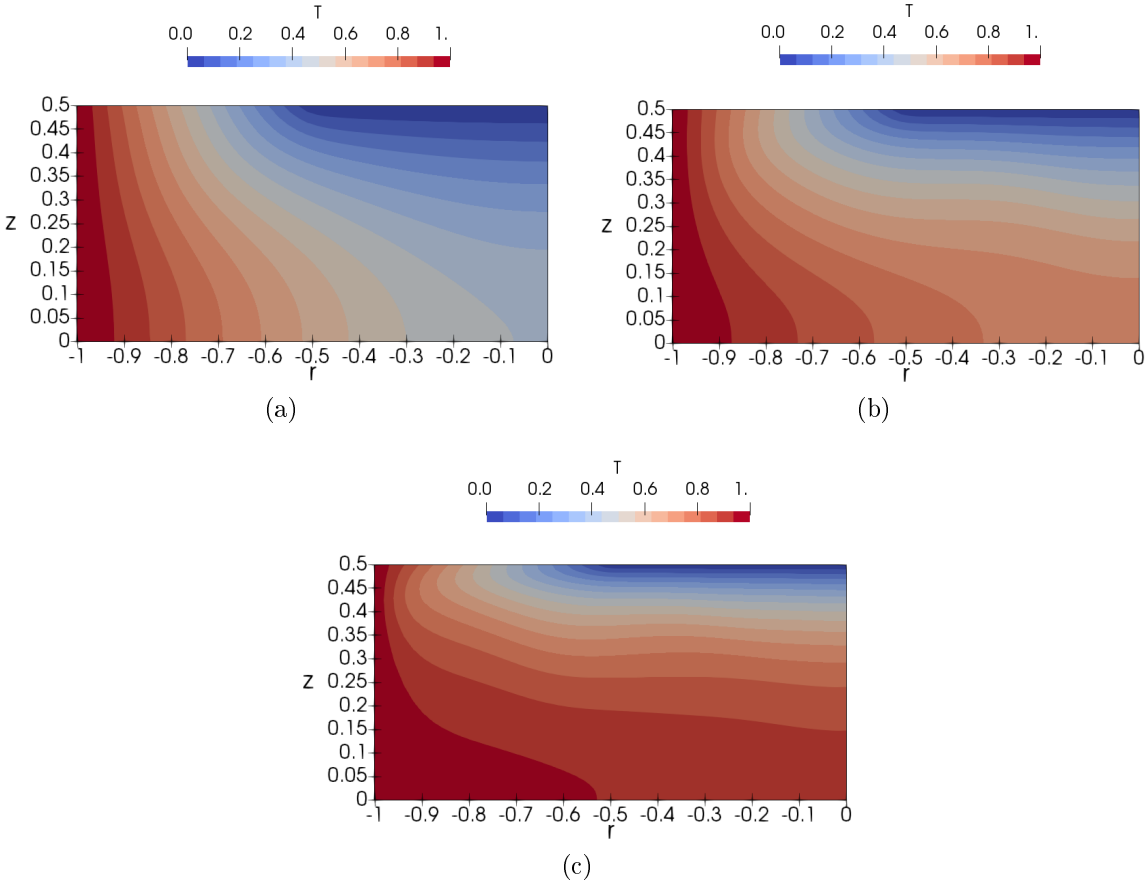
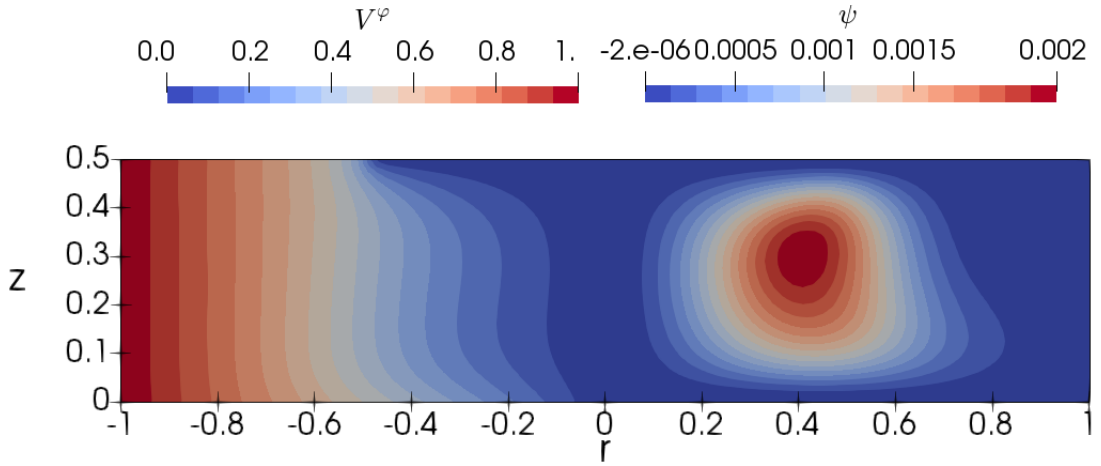
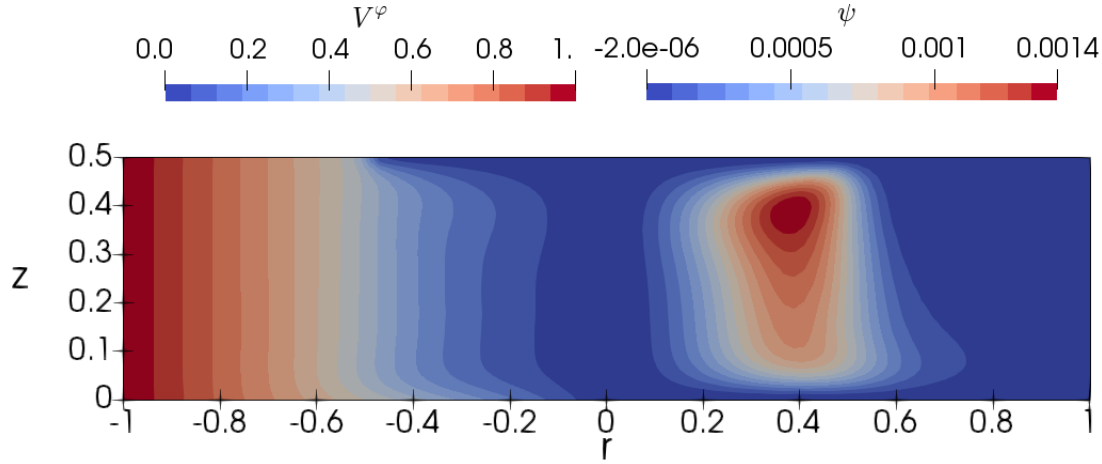


Рис. 6. Вращение кристалла. Распределение температуры при $\mathrm{Re}_{\mathrm{cr}} = 250$ ($\eta \approx 1.3$) (a); при $\mathrm{Re}_{\mathrm{cr}} = 1000$ ($\eta \approx 2.3$) (b); при $\mathrm{Re}_{\mathrm{cr}} = 4000$ ($\eta \approx 4.2$) (c)

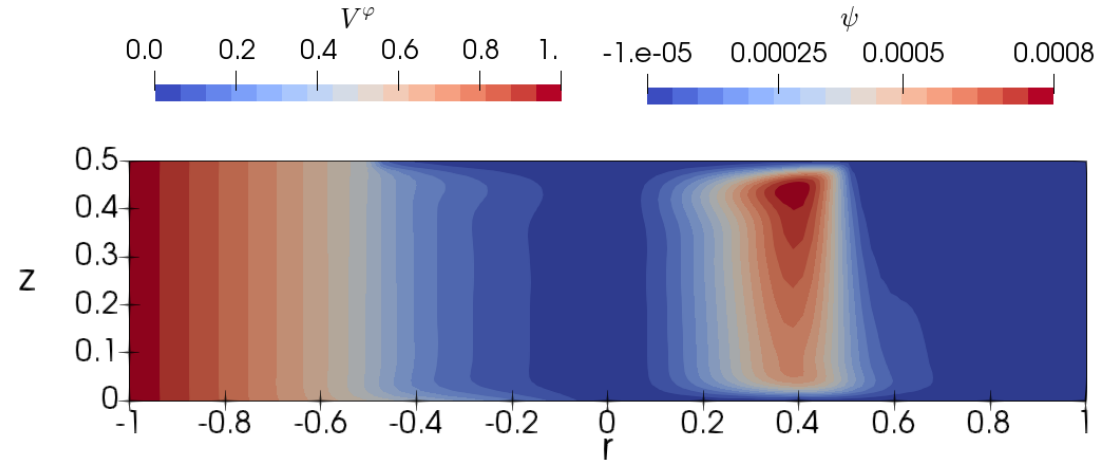
Вращение тигля ($\Omega_{\mathrm{cryst}} = 0$). Рассмотрим вращение тигля при неподвижном кристалле. В этом случае $t_0 = t_{\mathrm{cruc}}$. На рисунке 7 представлены установившиеся распределения азимутальной скорости и функции тока при различных значениях Re. Расчеты показывают, что вблизи боковой стенки тигля расплав вращается как твердое тело. В меридиональной плоскости под неподвижным кристаллом формируется течение, сходное по структуре со столбиком Тейлора — Праудмена [17], в котором жидкость практически с постоянной скоростью поднимается к фронту кристаллизации, движется вдоль него к центру тигля и затем опускается у оси. Увеличение скорости вращения приводит к уменьшению радиуса столбика. При $\mathrm{Re} \geq 4000$ его ширина практически совпадает с радиусом кристалла, а в слое между свободной поверхностью и дном тигля жидкость вращается с постоянной угловой скоростью, равной Ω_{cruc} (рис. 7c).



(a)



(b)



(c)

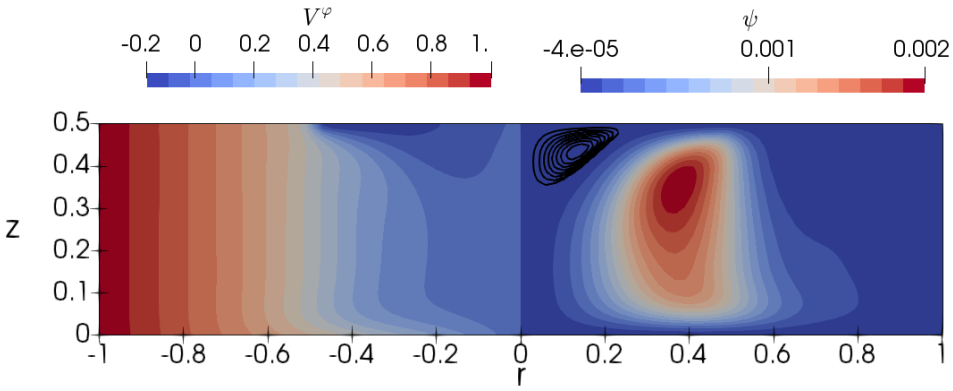
Рис. 7. Вращение тигля. Распределение азимутальной компоненты вектора скорости (слева) и функции тока (справа) при $\mathrm{Re} = 250$ ($\eta \approx 0.98$) (a); при $\mathrm{Re} = 1000$ ($\eta \approx 0.96$) (b); при $\mathrm{Re} = 4000$ ($\eta \approx 0.94$) (c)

Во всех рассмотренных случаях распределение температуры в области незначительности отличается от полученного в рамках модели чистой теплопроводности: $0.94 < Q/Q_{\varkappa} < 0.98$

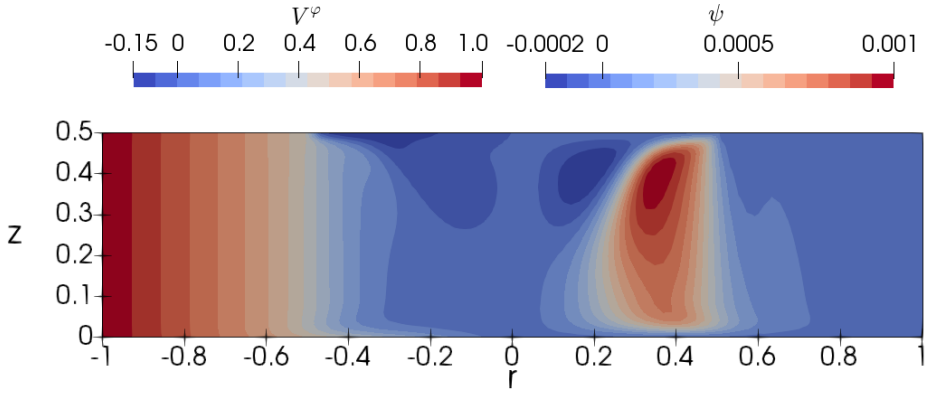
Результаты моделирования, представленные выше, показывают, что в вихрях, образующихся под влиянием кристалла и тигля, жидкость движется в противоположных направлениях.

Вращение кристалла и тигля в противоположных направлениях. Рассмотрим движение жидкости, вызванное противовращением кристалла и тигля при различных значениях отношения угловых скоростей $\mathrm{Ro} = \Omega_{\mathrm{cryst}}/\Omega_{\mathrm{cruc}}$. В качестве масштаба времени выберем $t_0 = t_{\mathrm{cruc}}$.

Медленное вращение кристалла ($\mathrm{Ro} = -0.5$) при $\mathrm{Re} = 250$ практически не влияет на структуру течения — как и в случае $\Omega_{\mathrm{cryst}} = 0$, в расплаве формируется стационарный столбик Тейлора и $\eta \approx 1$.



(a)



(b)

Рис. 8. Вращение тигля и кристалла при $\mathrm{Ro} = -0.5$. Распределение V^{φ} (слева) и ψ (справа) при $\mathrm{Re} = 1000$ ($\eta \approx 0.96$) (a); при $\mathrm{Re} = 4000$ ($\eta \approx 0.95$) (b)

Увеличение числа Рейнольдса приводит к тому, что рядом со столбиком в центре области под кристаллом образуется небольшой вихрь «треугольного» сечения, в котором жидкость поднимается вдоль оси к межфазной границе (рис. 8 a, b). Под свободной поверхностью распределение азимутальной скорости линейно по радиусу, жидкость вращается с постоянной угловой скоростью. Такой характер движения обусловлен существенно большей площадью контакта расплава с тиглем по сравнению с кристаллом.

Распределение температуры в расплаве для $\mathrm{Re} = 4000$ представлено на рисунке 9a. Расчеты показали, что противовращение тигля и кристалла приводит к увеличению теплового потока в центре кристалла по сравнению со случаем неподвижного кристалла: при $\mathrm{Ro} = 0$ параметр $q^z(0)/q^z_\varkappa(0) \approx 0.6$, при $\mathrm{Ro} = -0.5$ отношение потоков $q^z(0)/q^z_\varkappa(0) \approx 0.86$.

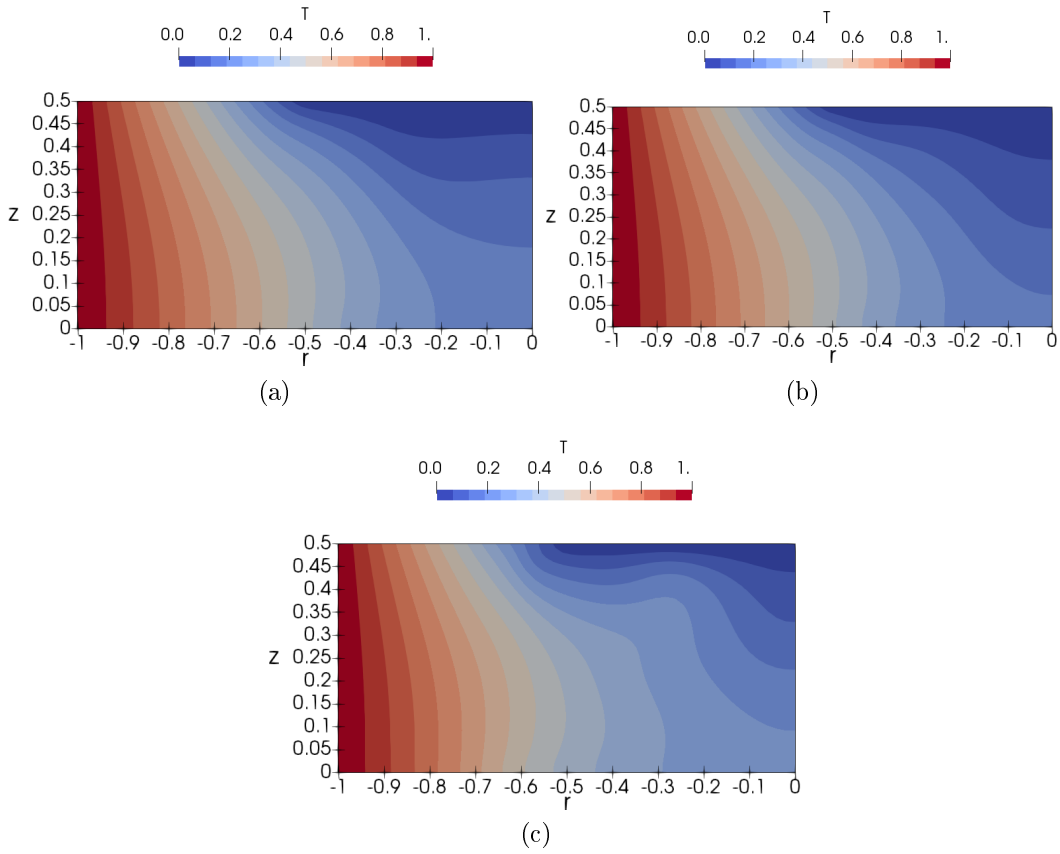


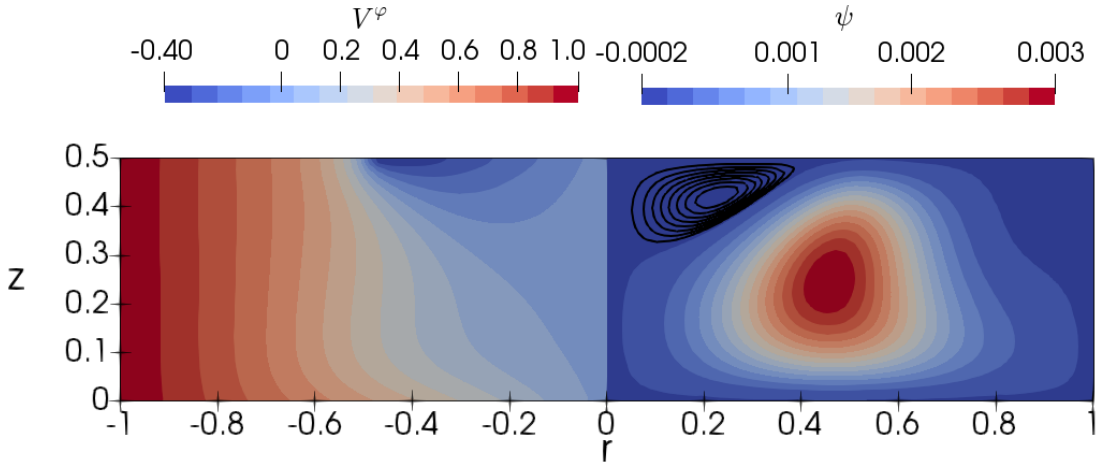
Рис. 9. Вращение кристалла и тигля при $\mathrm{Re} = 4000$. Распределение температуры: $\mathrm{Ro} = -0.5$ ($\eta \approx 0.95$) (a); $\mathrm{Ro} = -1.0$ ($\eta \approx 0.97$) (b); при $\mathrm{Ro} = -2.0$ ($\eta \approx 1.58$) (c)

Если кристалл и тигель вращаются с равными угловыми скоростями, интенсивность течения увеличивается по сравнению со случаем $\mathrm{Ro} = -0.5$ (рис. 10). «Треугольный» вихрь в подкристальной области наблюдается уже при $\mathrm{Re} = 250$. Для $\mathrm{Re} = 4000$ распределение азимутальной скорости вблизи фронта кристаллизации имеет структуру пограничного слоя; вихрь, обусловленный вращением кристалла, смещается от оси контейнера к свободной поверхности и не влияет на перенос тепла в центре области (рис. 10c). В этом случае, как и при $\mathrm{Ro} = 0$, отношение потоков $q^z(0)/q^z_\varkappa(0) \approx 0.6$ (см. рис. 9b).

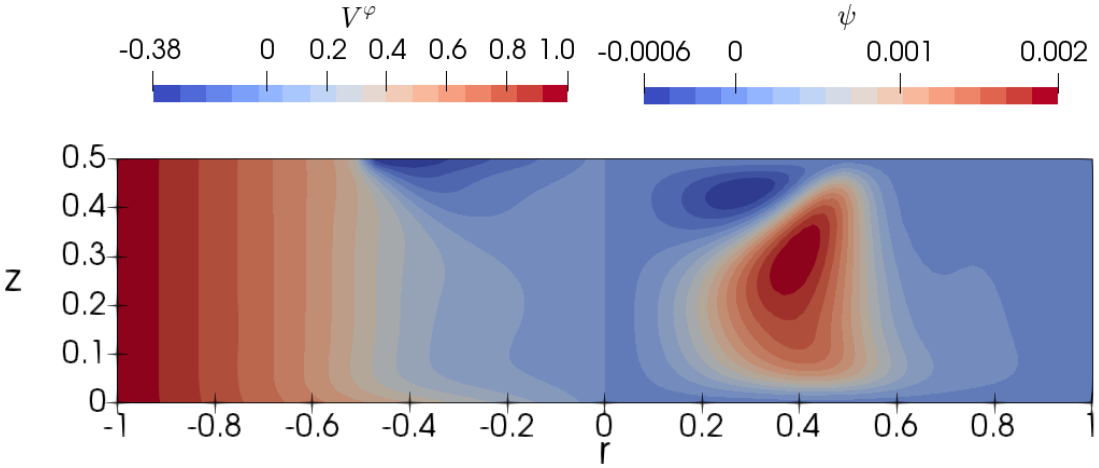
Дальнейшее увеличение числа Росби приводит к тому, что интенсивности течений, вызванных вращением кристалла и тигля, становятся сопоставимыми (рис. 11). Верхний вихрь деформирует столбик Тейлора, вытесняя его из области под кристаллом. При $\mathrm{Re} = 4000$ размер подкристаллического вихря значительно увеличивается по сравнению со случаем $\mathrm{Ro} = -1$, его интенсивность превосходит интенсивность вихря, обусловленного вращением тигля (рис. 11c). Распределение температуры вблизи оси становится существенно неоднородным (рис. 9c).

Естественная и вынужденная конвекция

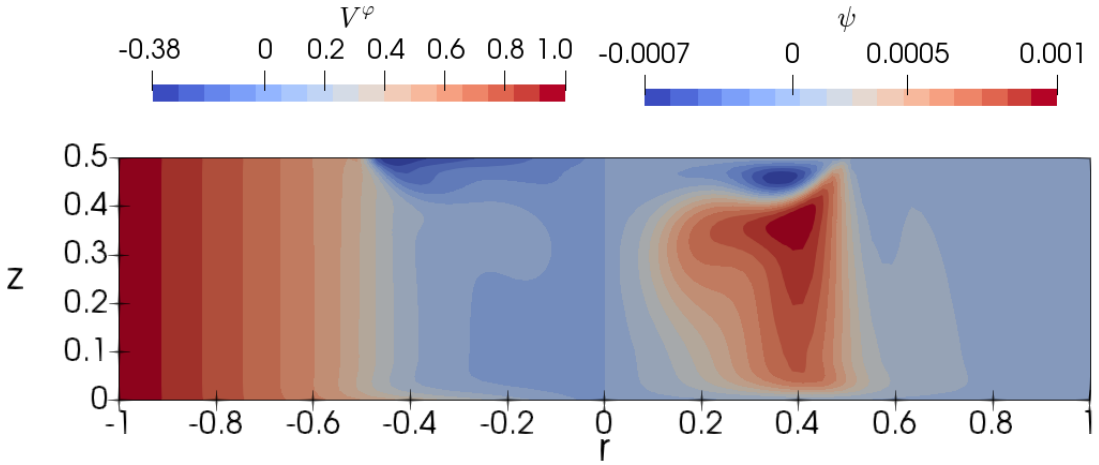
Относительный вклад естественной и вынужденной конвекции в формирование структуры течения определяется значением числа Ричардсона $\mathrm{Ri} = \mathrm{Gr}/\mathrm{Re}^2$. Для определенности зафиксируем значение числа Грасгофа и изучим влияние числа Рейнольдса на характер течения в расплаве. Известно, что в задачах кристаллизации характерное значение числа Грасгофа велико ($\mathrm{Gr} > 10^6$.) В наших расчетах использовалось значение $\mathrm{Gr} = 10^7$.



(a)



(b)



(c)

Рис. 10. Вращение тигля и кристалла при $\mathrm{Ro} = -1.0$. Распределение азимутальной скорости (слева) и функции тока (справа) при $\mathrm{Re} = 250$ ($\eta \approx 0.98$) (a); при $\mathrm{Re} = 1000$ ($\eta \approx 0.96$) (b); при $\mathrm{Re} = 4000$ ($\eta \approx 0.97$) (c)

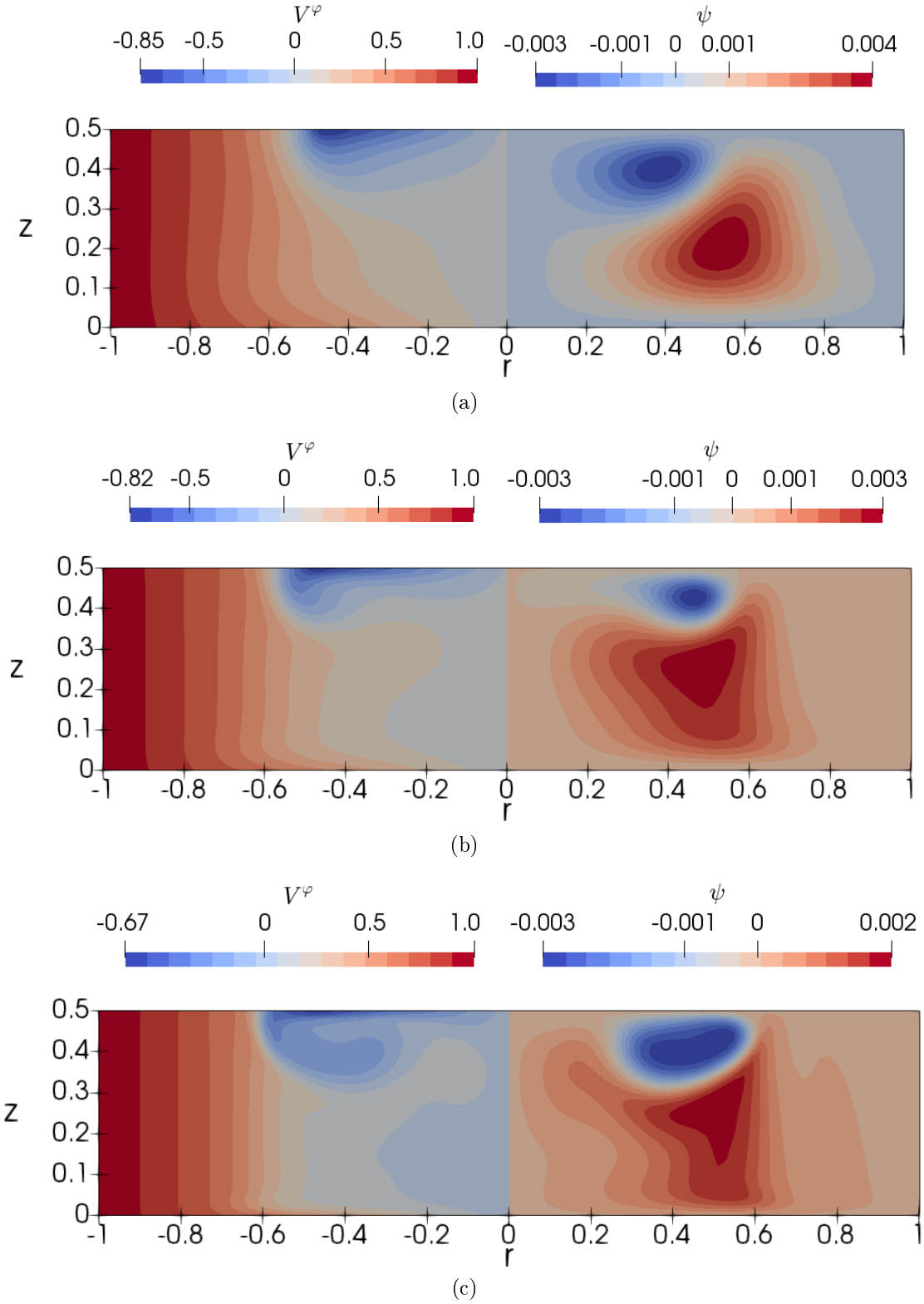


Рис. 11. Вращение тигля и кристалла при $\mathrm{Ro} = -2.0$. Распределение азимутальной скорости (слева) и функции тока (справа) при $\mathrm{Re} = 250$ ($\eta \approx 0.99$) (a); при $\mathrm{Re} = 1000$ ($\eta \approx 1.05$) (b); при $\mathrm{Re} = 4000$ ($\eta \approx 1.58$) (c)

Естественная конвекция и вращение кристалла. Результаты моделирования для неподвижного тигля ($\Omega_{\text{cruc}} = 0$) и различных значений скорости вращения кристалла приведены на рисунке 12. При больших значениях числа Ричардсона ($\text{Ri} \sim 100$ при $\text{Re}_{\text{cryst}} = 250$) структура течения определяется преимущественно естественной конвекцией (рис. 12a). Увеличение скорости вращения (рис. 12b) приводит к тому, что у оси контейнера формируется еще один вихрь [18]. Течение, обусловленное естественной конвекцией, смещается к боковой стенке тигля, его интенсивность уменьшается. В центре области движение жидкости практически не влияет на распределение температуры. При $\text{Re}_{\text{cryst}} = 4000$ число Ричардсона близко к единице, и в расплаве образуется пара вихрей близкой интенсивности, вращающихся в противоположных направлениях (рис. 12c); в области под кристаллом горячая жидкость поступает со дна контейнера к межфазной границе, $\eta \approx 2.7$. Дальнейшее увеличение Re_{cryst} позволяет подавить естественную конвекцию практически во всей области. При $\text{Re}_{\text{cryst}} = 16000$ параметр $\eta \approx 4$, и картина течения близка к представленной на рисунке 5c (расчет с $\text{Gr} = 0$ и $\text{Re}_{\text{cryst}} = 4000$).

Естественная конвекция и вращение тигля. Структуры течений, полученных при различных значениях числа Ri, приведены на рисунке 13. Расчеты показывают, что медленное вращение тигля увеличивает скорость движения жидкости вблизи оси (рис. 13a), в этом случае $q^z(0)/q^z_\varkappa(0) \approx 0.5$ и $\eta \approx 1.95$. С ростом Ω_{cruc} вращение тигля создает в расплаве центробежную силу, снижающую интенсивность естественной конвекции, вихрь, обусловленный радиальным градиентом температуры, смещается к боковой стенке (рис. 13b). При $\text{Re} = 4000$, как и ранее, под неподвижным кристаллом формируется течение, по структуре сходное со столбиком Тейлора (рис. 13c), тепловая конвекция наблюдается лишь в тонком слое вблизи стенки тигля. Вторичное течение между пристеночным вихрем и стационарным столбиком имеет низкую интенсивность. При $\text{Re} \geq 8000$ термогравитационная конвекция практически не влияет на перенос тепла в расплаве, $\eta \approx 0.95$.

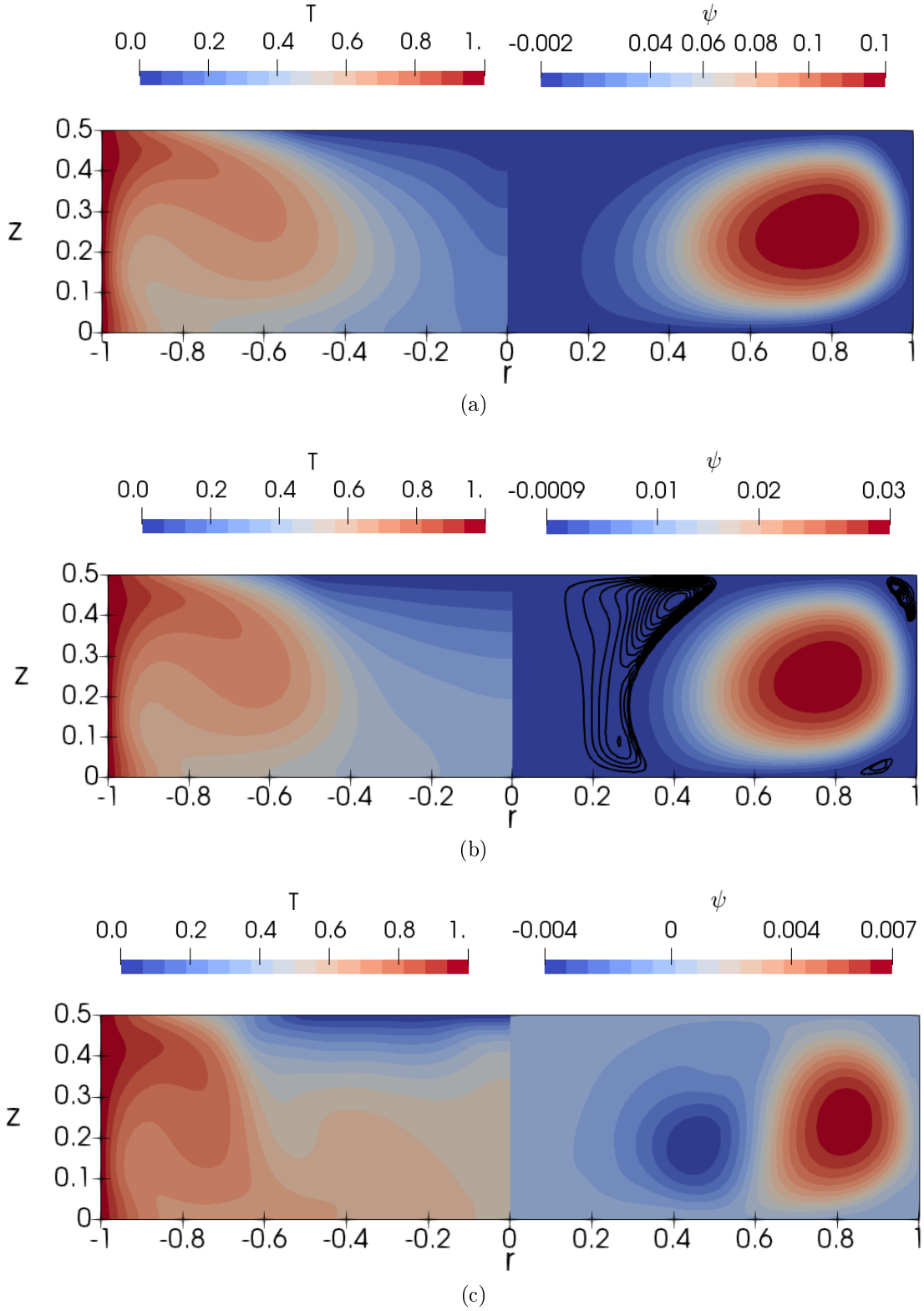


Рис. 12. Вращение кристалла при $\mathrm{Gr} = 10^7$. Распределение температуры (слева) и функции тока (справа) при $\mathrm{Re}_{\mathrm{cr}} = 250$ ($\eta \approx 1.8$) (a); при $\mathrm{Re}_{\mathrm{cr}} = 1000$ ($\eta \approx 1.5$) (b); при $\mathrm{Re}_{\mathrm{cr}} = 4000$ ($\eta \approx 2.7$) (c)

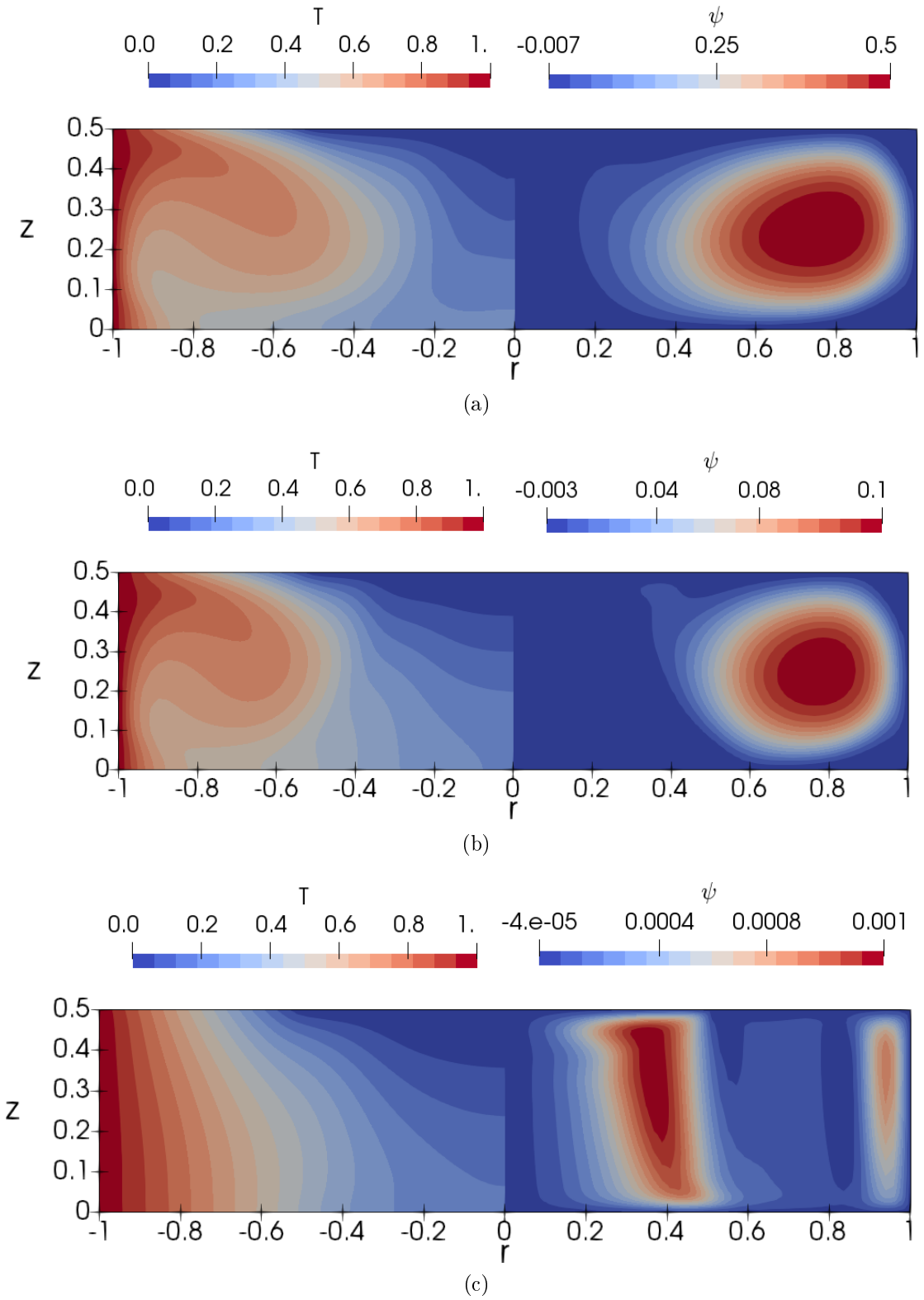


Рис. 13. Вращение тигля при $\mathrm{Gr} = 10^7$. Распределение температуры (слева) и функции тока (справа) при $\mathrm{Re} = 250$ ($\eta \approx 1.95$) (a); при $\mathrm{Re} = 1000$ ($\eta \approx 1.48$) (b); при $\mathrm{Re} = 4000$ ($\eta \approx 0.96$) (c)

Естественная конвекция, вращение тигля и кристалла. Рассмотрим теперь случай $\mathrm{Ri} \sim 1$, когда естественная и вынужденная конвекция в равной степени определяют структуру течения. Для этого положим $\mathrm{Re} = 4000$, $\mathrm{Gr} = 10^7$ и изучим влияние числа Росби на теплоперенос в расплаве. Медленное вращение кристалла ($\mathrm{Ro} = -0.5$) создает дополнительный отвод тепла от центра межфазной границы: $q^z(0)/q^z_\varkappa(0) \approx 0.15$. (рис. 14a). Среднее значение теплового потока Q в этом случае практически не отличается от $Q_\varkappa$, полученного в рамках модели теплопроводности, $\eta \approx 1$.

При увеличении Ω_{cryst} структура течения усложняется: вблизи оси контейнера образуется вихрь, который переносит горячую жидкость со дна области к фронту кристаллизации (рис. 14b). В результате интегральный тепловой поток через фронт кристаллизации увеличивается, и параметр η становится больше единицы: $\eta \approx 1.1$ и $\eta \approx 1.5$ при $\mathrm{Ro} = -1$ и $\mathrm{Ro} = -2$ соответственно. В случае быстрого вращения кристалла ($\mathrm{Ro} = -2$) горячая жидкость под действием центробежной силы движется вдоль межфазной границы (рис. 14c) и вблизи границы кристалл/свободная поверхность формируется вихрь, ранее наблюдавшийся в расчетах без естественной конвекции. Вторичное течение между пристеночным вихрем и столбиком Тейлора — Праудмена имеет низкую интенсивность.

Дальнейшее увеличение скорости вращения кристалла приводит к тому, что течение становится существенно нестационарным.

5 Заключение

В модельной системе, отражающей характерные особенности процесса выращивания монокристаллов методом Чохральского, изучено влияние естественной и вынужденной конвекции на формирование структуры течения и условий теплопереноса в расплаве. Расчеты проведены в диапазоне физических и геометрических параметров, соответствующем процессу выращивания монокристаллов GaAs. Полученные результаты позволяют выявить некоторые общие закономерности формирования структур течения и их эволюции в зависимости от параметров технологического процесса.

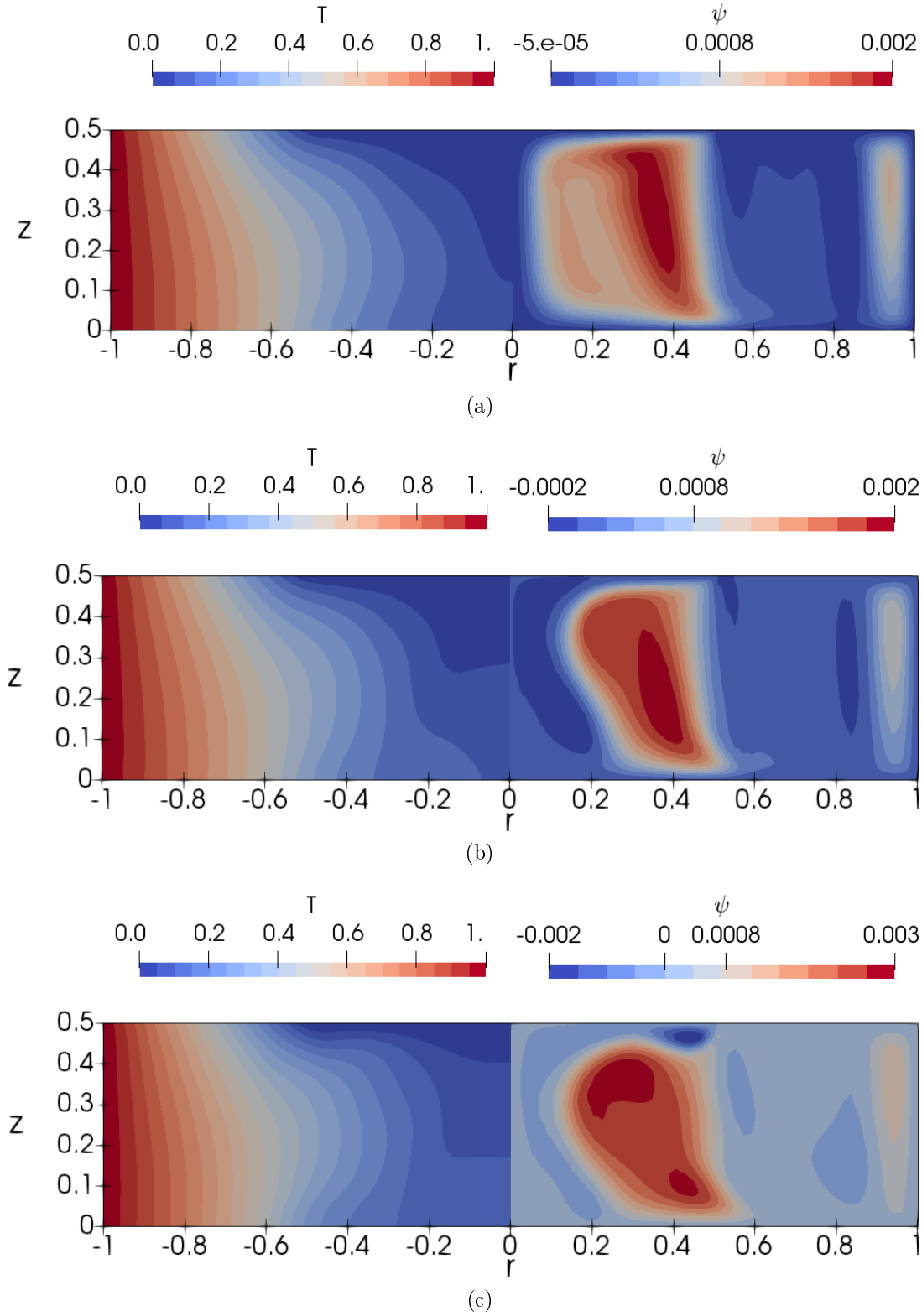


Рис. 14. Вращение тигля и кристалла при $\mathrm{Re} = 4000$ и $\mathrm{Gr} = 10^7$. Распределение температуры (слева) и функции тока (справа) при $\mathrm{Ro} = -0.5$ ($\eta \approx 1.03$) (a); при $\mathrm{Ro} = -1.0$ ($\eta \approx 1.1$) (b); при $\mathrm{Ro} = -2.0$ ($\eta \approx 1.58$) (c)

Список литературы

1. Langlois W.E. Digital simulation of Czochralski bulk flow in a parameter range appropriate liquid semiconductors // J. Crystal Growth. 1977. Vol. 42. Pp. 386–399. https://doi.org/10.1016/0022-0248(77)90222-6.

2. Chan Y.T., Gibeling H. J., Grubin H. L. Numerical simulations of Czochralski silicon growth // Journal of Applied Physics. 1988. Vol. 64. P. 1425. https://doi.org/10.1063/1.341815.

3. Xiao Q., Derby J. Bulk-flow versus thermal-capillary models for Czochralski growth of semiconductors // J. Crystal Growth. 1993. Vol. 129. Pp. 593–609. https://doi.org/10.1016/0022-0248(93)90495-I.

4. 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, no. 1. Pp. 40–47. https://doi.org/10.1016/S0022-0248(01)01317-3.

5. Смирнов В.А., Старшинова И.В., Фрязинов И.В. Математическое моделирование процессов выращивания монокристаллов по Чохральскому. // Математическое моделирование. Получение металлов и полупроводниковых структур. Москва: Наука, 1986. С. 142–158.

6. Geng X., Wu X.B., Guo Z.Y. Numerical simulation of combined flow in Czochralski crystal growth // J. Crystal Growth. 1997. Vol. 179, no. 1. Pp. 309–319. https://doi.org/10.1016/S0022-0248(97)00109-7.

7. Бессонов О.А., Полежаев В.И. Карта режимов и пространственные эффекты конвективных взаимодействий в гидродинамической модели метода Чохральского // Изв. РАН. МЖГ. 2014. № 2. С. 16–28.

8. Бессонов О.А. Влияние вращения кристалла и тигля на устойчивость течения в модели метода Чохральского при низких числах Прандтля // Изв. РАН. МЖГ. 2016. № 4. С. 33–43.

9. Li M., Hu W., Chen N., et. al. Numerical analysis of LEC growth of GaAs with an axial magnetic field // Int. J. Heat and Mass Transfer. 2002. Vol. 45, no. 13. Pp. 2843–2851. https://doi.org/10.1016/S0017-9310(01)00355-6.

10. Faiez R., Najafi F., Rezaei Y. Convection interaction in GaAs/LEC growth model // Int. J. Computational Engineering Research. 2015. Vol. 5. Pp. 12–23.

11. Kakimoto K., Eguchi M., Watanabe H., et. al. Direct observation by X-ray radiography of convection of boric oxide in the GaAs liquid encapsulated czochralski growth // J. Crystal Growth. 1989. Vol. 94, no. 2. Pp. 405–411. https://doi.org/10.1016/0022-0248(89)90015-8.

12. Биберин В.И., Освенский В.Б., Смирнов В.А. Исследование гидродинамики расплава в процессе выращивания арсенида галлия по Чохральскому из-под слоя флюса // Кристаллография. 1985. Т. 30. С. 980–985.

13. Гусев А.О., Мажорова О.С. Полностью консервативная разностная схема для трехмерных уравнений Навье–Стокса в цилиндрической системе координат // Дифференциальные уравнения. 2025. Т. 61, № 7. С. 919–940. https://doi.org/10.31857/S0374064125070057.

14. Arakawa A. Computational design for long-term numerical integration of the equation of fluid motion: Two dimensional incompressible flow // J. Comput. Phys. 1966. Vol. 1. Pp. 119–143.

15. Гершуни Г.З., Жуховицкий Е.М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. Москва: Наука, 1972. 392 стр.

16. Tan B., Liow K., Mununga L., et. al. Simulation of the control of vortex breakdown in a closed cylinder using a small rotating disk // Phys. Fluids. 2009. Vol. 21. P. 24104. http://dx.doi.org/10.1063/1.3073747.

17. Гринспен Х. Теория вращающихся жидкостей. Л.: Гидрометеоиздат, 1975. 304 стр.

18. Langlois W.E. Buoancy-driven flows in crystal-growth melts // Annual Review of Fluid Mechanics. 1985. Vol. 17. Pp. 191–215. http://dx.doi.org/10.1146/annurev.fl.17.010185.001203.

Содержание

1 Введение **3**

2 Постановка задачи **4**

3 Вычислительный алгоритм **8**

4 Результаты расчетов **9**

5 Заключение **25**

Список литературы **27**