

РАЗРАБОТКА ГЛОБАЛЬНОЙ МОДЕЛИ ТЕПЛООБМЕНА ПО ВЫРАЩИВАНИЮ (ВГО) С УЧЕТОМ СЛОЖНОГО ТЕПЛООБМЕНА В КРИСТАЛЛЕ

Введение

Методы кристаллизации из расплава имеют большое значение в производстве традиционных и получении новых кристаллических материалов. Важную роль в повышении качества монокристаллов играют процессы тепло- и массообмена при их выращивании [1]. Исследование этих процессов до 70-х годов прошлого столетия проводилось в основном экспериментальными методами. В это время, благодаря развитию вычислительной техники, для исследования процессов кристаллизации все более широко начинают использовать компьютерное моделирование [2], преимущества которого по сравнению с физическим экспериментом связаны с длительностью процесса выращивания кристаллов, их высокой стоимостью, сложностью исследования влияния многих факторов. Моделирование процессов выращивания кристаллов становится глобальным, т.е. включает процессы тепломассообмена во всей кристаллизационной установке и дает эффективный инструмент для конструирования ростовых установок и отработки режимов и технологии выращивания новых кристаллов, в том числе создаются модели реального масштаба времени для управления с их помощью процессом выращивания кристаллов [3-5]. Появляется специализированное коммерческое программное обеспечение для расчета глобального теплообмена при росте кристаллов [6 - 9].

Многие кристаллические материалы, к которым относятся кристаллы оксидов, в частности германата висмута (ВГО), галогенидов и др., являются частично прозрачными в инфракрасной области спектра излучения при высоких температурах [10-12]. ВГО кристаллы используются в качестве синциляционных материалов в различных детекторных приборах, поэтому эти материалы нашли широкое применение во многих областях науки и техники, таких как физика высоких энергий, ядерная физика, космическая физика, ядерная медицина, геофизика, а также в различных отраслях

промышленности.

Теплообмен в системе кристалл-расплава в частично прозрачных материалах является сложным радиационно-кондуктивным (РКТ) или радиационно-кондуктивно-конвективным, и, следовательно, его математическое моделирование значительно усложняется [13]. В [14] показано существенное влияние радиационного теплового потока на положение и форму межфазной поверхности при росте кристаллов ВГО. Существующие специальные компьютерные программы, а также коммерческое программное обеспечение для расчета глобального теплообмена, не приспособлены для расчета радиационного теплообмена в поглощающих и излучающих средах [6 - 9, 15, 16].

Еще одним важным направлением развития моделирования процессов роста кристаллов является взаимодействие теплообмена и кинетических процессов на фронте кристаллизации [17]. В этой связи представляют интерес работы по экспериментальному определению *in situ* переохлаждения фронта при гранном росте кристаллов ВГО методом направленного осевого потока (ОТФ) [18] и исследованию на их основе кинетических характеристик [19]. Данные эксперимента по определению переохлаждения используются для расчета положения и скорости перемещения фронта. Для этих условий глобальные модели отсутствуют, хотя необходимость их использования для оптимизации условий эксперимента и определения расчетных характеристик очевидна.

В связи с этим целью настоящей работы является разработка глобальной модели выращивания кристаллов, учитывающей РКТ в системе кристалл-расплава и переохлаждение при гранном росте. Задачами работы являются разработка методов учета в глобальной модели РКТ в системе кристалл-расплава и переохлаждения при гранном росте. Реализация этой модели для двух вариантов установки для выращивания ВГО: тигельный вариант метода ОТФ и вариант

экспериментальной установки для определения переохлаждения [18].

Метод направленного осевого потока

Тигельный вариант является одним из перспективных методов получения монокристаллов. Его отличительной особенностью является создание и поддержание контролируемого тонкого слоя расплава, что к тому же позволяет избежать конвективной составляющей теплообмена, влияющей на формирование градиента температур в расплаве. Схематически кристаллизационная установка представлена на рис. 1. Рабочая область установки, ограниченная платиновым тиглем, состоит из двух частей, разделенных подвижным штоком. В верхней части за счет осевого и фоновых нагревателей осуществляется подготовка расплава для дальнейшей ее кристаллизации, а в нижней части - непосредственно процесс кристаллизации.

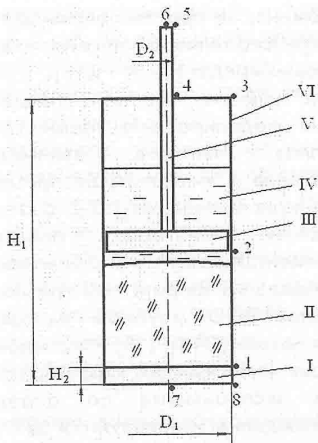


Рис. 1. Тигельный вариант:
 I - подставка;
 II - кристалл-расплав;
 III - поршень (ОТФ нагреватель);
 IV - расплав;
 V - шток (вертикальный нагреватель);
 VI - тигель

При движении штока вверх расплав под действием сил гравитации поступает в кристаллизационную часть через периферийные щели между ОТФ нагревателем и тиглем, заполняя над кристаллом всю свободную область.

Холодильник, расположенный в нижней части установки, служит для отвода теплоты из кристалла, благодаря этому охладителю и

секционному фоновому нагревателю температура вдоль оси системы кристалл-расплав снижается, тем самым, создавая необходимый для выращивания кристалла температурный профиль.

Изменяя мощность ОТФ нагревателя, секций фонового нагревателя и скорость перемещения штока, можно управлять процессом кристаллизации, т.е. координировать положение и форму фронта кристаллизации в каждый момент времени. Для этого необходимо иметь математические модели, которые позволяют на основе контролируемых параметров (мощность, положение нагревателей, граничные температурные условия) определять температурные поля, положение и форму фронта кристаллизации.

Вариант экспериментальной установки

Для изучения кинетики гранного роста и, в частности, измерения переохлаждения фронта кристаллизации при его перемещении применяется кристаллизационная установка представленная на рис. 2. Отличительной особенностью такого варианта установки от предыдущей является отсутствие на нижнем торце кристалла тигельного дна. Это позволяет, благодаря прозрачности кристалла в инфракрасном диапазоне частот, измерять через диатермическую полость переохлаждение межфазной поверхности в процессе кристаллизации, как одного из факторов кинетики гранного роста.

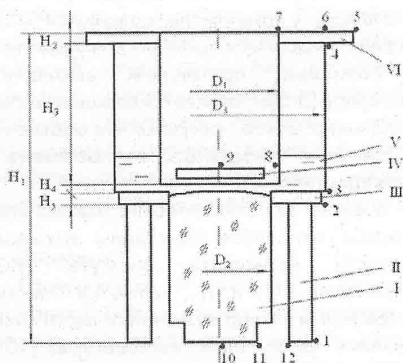


Рис. 2. Экспериментальная установка:
 I - кристалл;
 II - алундовая труба;
 III - кварцевое кольцо нижнее;
 IV - ОТФ нагреватель;
 V - расплав;
 VI - тигель;
 VII - кварцевое кольцо верхнее

Центральный (осевой) и боковые нагреватели предназначены для создания и поддержания необходимых тепловых технологических режимов на границах системы кристалл-расплав. Шихта с помощью осевого нагревателя плавится и через технологические щели поступает к растущему кристаллу. Тепловой поток от фронта кристаллизации через кристалл отводится в диатермическую полость. Пирометр, расположенный под диатермической полостью, измеряет тепловое излучение с фронта кристаллизации, определяя температуру и переохлаждение ее центральной части.

Учет в глобальной модели радиационного теплообмена в кристалле

При низких температурах в сильно поглощающих средах доля радиационной составляющей в теплообмене невелика, поэтому при расчетах теплообмена ее не учитывают. Глобальные модели теплообмена рассматривают системы, состоящие именно из теплопроводных элементов [6 - 9, 15, 16]. Однако в высокотемпературных технологических процессах, где среда является прозрачной или полупрозрачной для теплового излучения, основная доля приходится на лучистый теплообмен. Выращивание полупрозрачных монокристаллов является одним из таких технологических процессов. Наиболее очевидным способом моделирования глобального теплообмена при выращивании кристаллов частично прозрачных материалов было бы использование численных моделей, разработанных для систем с теплопроводными элементами.

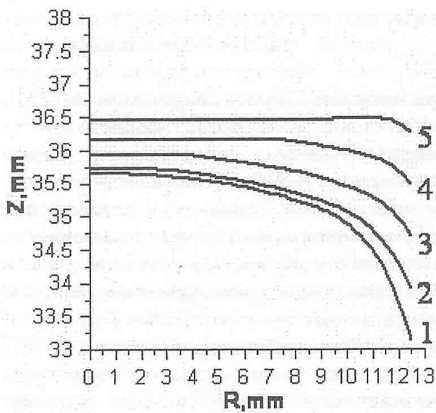
Одним из вариантов учета в модели глобального теплообмена радиационной составляющей является использование эффективной теплопроводности выращиваемого кристалла как некоторой расчетной константы, характеризующей свойства теплопереноса кристалла кондуктивностью и радиацией. Очевидно, эффективная теплопроводность является функцией многих факторов, влияющих на теплообмен как кондуктивностью, так и лучистым теплообменом. Так, факторами влияющими на радиационный теплообмен, являются геометрические размеры тигля, радиационные свойства его поверхностей, спектральный коэффициент поглощения кристалла и т.д. Использование эффективной теплопроводности оправдано для элементов с непрозрачными границами и с небольшими перепадами

температур.

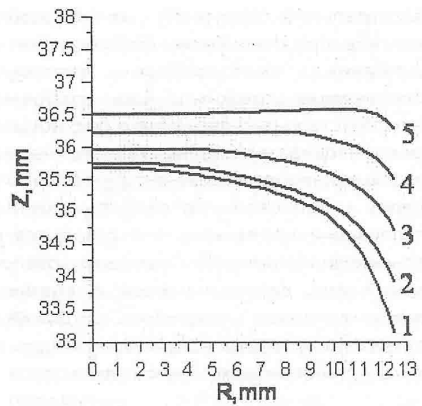
В данной работе для определения эффективной теплопроводности кристалла использована двумерная (2D) модель РКТ [20], с помощью которой определяются температурные поля, положение и форма фронта кристаллизации. Задавшись одинаковыми граничными условиями, подбиралось значение эффективной теплопроводности кристалла таким образом, чтобы положение и форма фронта кристаллизации, полученная по результатам расчета глобальной модели, соответствовала результатам модели 2D РКТ. На рис. 3 представлены результаты расчета перемещения и формы фронта кристаллизации с переохлаждением и образованием плоской грани, полученные для системы кристалл-расплав, с характеристиками как у глобальной модели без учета радиационного потока на границах кристалла. Для выделения плоской грани в модель 2D РКТ [20] введено переохлаждение на оси фронта по данным эксперимента [19], при этом его величина уменьшалась к краю грани по квадратичной зависимости от радиуса. Эти результаты показывают совпадение при эффективной теплопроводности $1,7 \text{ Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$.

Для моделирования глобального теплообмена в экспериментальной установке необходимо учитывать радиационный теплообмен на границах кристалла, т.к. на положение фронта сильно влияет его радиационное охлаждение через прозрачное дно кристалла [14]. Рассчитанное таким образом T -поле (рис. 5а) демонстрирует это влияние по сравнению с рис. 3а. В глобальной модели с использованием приближения непрозрачного кристалла радиационный поток с фронта кристаллизации можно учитывать эффективным коэффициентом теплоотдачи на нижнем торце кристалла. Его значение для данного T -поля оценивается в пределах $75...100 \text{ Вт}/(\text{м}^2\cdot\text{К})$ с учетом расчетной величины радиационного потока на нижнем торце кристалла и конвективной составляющей в диатермической полости. Значение эффективной теплопроводности кристалла ($400 \text{ Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$) также было получено по данным РКТ модели. Для этого использовались значения градиентов температуры в кристалле и расплаве и теплового потока вблизи межфазной границы.

Найденные таким образом значения эффективной теплопроводности кристалла и эффективного коэффициента теплоотдачи на



а)



б)

Рис. 3. Фронт кристаллизации:
 а - частично прозрачный кристалл BGO;
 б - непрозрачный с эффективной теплопроводностью 1,7 Вт/(м·К) для моментов времени:
 1 - 0 мин; 2 - 10 мин; 3 - 20 мин; 4 - 30 мин; 5 - 40 мин

нижнем торце показывают порядок величин, которые могут обеспечить соответствие T -полей по моделям РКТ и с чисто теплопроводным непрозрачным кристаллом. Для более точного определения условий этого соответствия была проведена серия расчетов на 2D модели с непрозрачным кристаллом при разных значениях эффективной теплопроводности и эффективного коэффициента теплоотдачи. Результаты, представленные на рис. 4, показывают, что такое же, как и в модели РКТ (см. рис. 5а), положение фронта может быть достигнуто при разных сочетаниях этих коэффициентов.

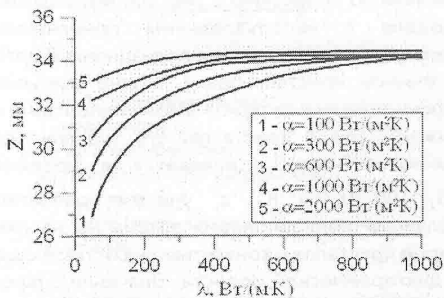


Рис.4. Анализ коэффициентов

Удовлетворительное соответствие 2D T -полей получено при значениях эффективной теплопроводности 200 Вт/(м·К) и эффективного коэффициента теплоотдачи 2000 Вт/(м²·К) (рис. 5а, б). Эти коэффициенты отличны от тех значений, которые получены

по данным расчета РКТ. Поэтому соответствие T -полей наблюдается при некотором отличии тепловых потоков на границах. На рис. 5в для сравнения представлены результаты расчета T -поля для модели с непрозрачным кристаллом при истинных значениях теплопроводности и теплоотдачи.

Эти результаты показывают, что специально подобранные значения эффективной теплопроводности, или они же совместно с эффективным коэффициентом теплоотдачи, существенно улучшают картину расчетов и могут быть использованы для учета РКТ в глобальных моделях теплообмена с теплопроводными элементами.

Математическая модель

Вариант экспериментальной установки.

3D модель. Для математического описания процессов теплообмена в экспериментальной установке (рис. 2), разобьем установку на 4 отдельных элемента: 1 - фасонный тигель; 2 - система кристалл-расплав; 3 - верхний тигель; 4 - нагреватель (рис. 6). Каждый из описанных элементов обладает своими теплофизическими свойствами, такими как теплопроводность, плотность, теплоемкость и т.д.

Стационарное поле температур экспериментальной установки можно описать нелинейным уравнением теплопроводности, в котором в обобщенной постановке учитывается скачок теплопроводности в системе кристалл-расплав:

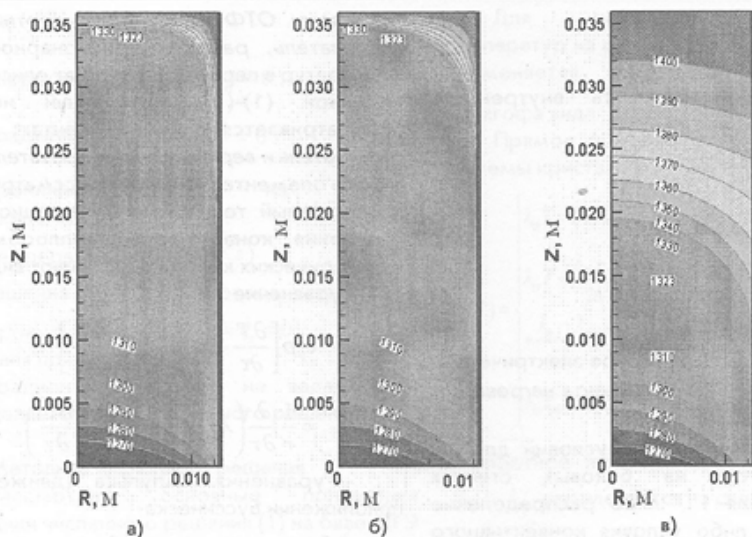


Рис. 5. T-поля:

- а) РКТ; б) кондуктивный с $\lambda_{эф} = 200 \text{ Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$ и $\alpha_{эф} = 2000 \text{ Вт}/(\text{м}^2\cdot\text{К})$;
 в) кондуктивный с $\lambda = 1,2 \text{ Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$ и $\alpha = 16 \text{ Вт}/(\text{м}^2\cdot\text{К})$

$$\text{div}[\lambda_x(T)\nabla T(X)] + q_{vk}(X) = 0,$$

$$X(x, y, z) \in \Omega = R^3, \quad (1)$$

где k - индекс элемента;
 λ - теплопроводность;
 T - температура;
 q_v - объемная плотность внутреннего источника теплоты;

$X(x, y, z)$ - вектор координат;
 Ω - расчетная область установки.

Параметры отдельных элементов представляются в следующем виде:

- теплопроводность при $k=2$:

$$\lambda_x(T) = \begin{cases} \lambda_{cr}, & T < T_m - \Delta T/2 \\ \frac{\lambda_{cr} - \lambda_m}{\Delta T} (T - T_{cr}) + \\ + \frac{\lambda_{cr} + \lambda_m}{2}, & T \in \left[T_m - \frac{\Delta T}{2}; T_m + \frac{\Delta T}{2} \right], \\ \lambda_m, & T > T_m + \Delta T/2 \end{cases}, \quad (2)$$

где T_m - температура кристаллизации;

ΔT - интервал сглаживания; индексы cr и m - относятся к кристаллу и расплаву соответственно;

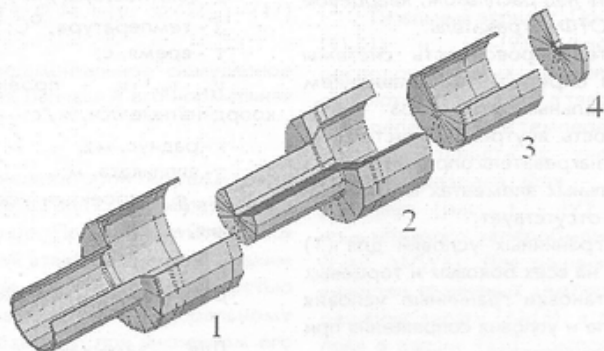


Рис. 6. Элементы (расчетные области) 3D модели установки:

- 1 - фасонный тигель;
 2 - система кристалл-расплав;
 3 - верхний тигель;
 4 - нагреватель

при $k=1,3,4$:

$$\lambda_k(T) = const; \tag{3}$$

- объемная плотность внутреннего источника теплоты

при $k=1,2,3$:

$$q_{вк}(X) = 0; \tag{4}$$

при $k=4$:

$$q_{вк}(X) = \frac{(IR_h^2)_k}{V_k}, \tag{5}$$

где I, R_{h1}, V - сила тока, полное электрическое сопротивление и объем элемента нагревателя Ω_4 .

В качестве граничных условий для (1) рассматриваются: на боковых стенках фасонного тигля 1 - либо распределение температуры, либо условия конвективного типа; на торце - условия конвективного типа, в которых с помощью эффективных коэффициентов теплоотдачи учитывается конвективная и радиационная составляющие теплообмена; на верхнем торце ОТФ нагревателя 4 - граничные условия конвективного типа; на границах контакта элементов установки - условия сопряжения при абсолютном контакте.

Вариант экспериментальной установки.

2D модель. Стационарное поле температур экспериментальной установки (рис. 2) можно описать уравнением (1). При этом экспериментальная установка разбивается на 8 элементов: *фасонный тигель, система кристалл-расплав, воздушный объем, алуноводная труба, кварцевое кольцо нижнее, воздушная полость над расплавом, кварцевое кольцо верхнее, ОТФ нагреватель.*

При этом теплопроводность системы кристалл-расплав определяется уравнением (2), а всех остальных элементов - (3). Объемная плотность внутреннего источника теплоты для ОТФ нагревателя определяется из (5), во всех остальных элементах внутренний источник теплоты отсутствует.

В качестве граничных условий для (1) рассматриваются на всех боковых и торцевых поверхностях установки граничные условия конвективного типа и условия сопряжения при контакте элементов установки.

Тигельный вариант. В этом варианте установка (см. рис. 1) разбивается на 6 элементов: *система кристалл-расплав, тигель,*

подставка, ОТФ нагреватель, вертикальный нагреватель, расплав. Стационарное поле температур в первых 5 элементах описывается системой (1)-(3). Внутренний источник рассматривается в элементах: *ОТФ нагреватель и вертикальный нагреватель.*

В элементе расплав рассматривается конвективный теплообмен. Нестационарные уравнения конвективного теплообмена в цилиндрических координатах имеют вид:

- уравнение энергии

$$c_p \rho \left[\frac{\partial T}{\partial \tau} + v_r \frac{\partial T}{\partial r} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right] = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right), \tag{6}$$

- уравнения импульса (движения) в приближении Буссинеска

$$\rho \left[\frac{\partial v_r}{\partial \tau} + v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} + v_z \frac{\partial v_r}{\partial z} \right] = \rho g_r - \frac{\partial p}{\partial r} + \mu \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v_r}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial v_r}{\partial z} \right) \right]; \tag{7}$$

$$\rho \left[\frac{\partial v_z}{\partial \tau} + v_r \frac{\partial v_z}{\partial r} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right] = \rho g_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial v_z}{\partial z} \right) \right]; \tag{8}$$

- уравнение неразрывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial \tau} + \frac{1}{r} \frac{\partial (\rho r v_r)}{\partial r} + \frac{\partial (\rho v_z)}{\partial z} = 0, \tag{9}$$

где c_p - удельная изобарная теплоемкость, Дж/(кг·К);

ρ - плотность, кг/м³;

T - температура, °С;

τ - время, с;

v_r, v_θ, v_z - проекции скорости на координатные оси, м/с;

r - радиус, м;

z - аппликата, м;

g_r, g_z - проекции ускорения свободного падения, м/с²;

p - давление, Па;

μ - динамическая вязкость, Па·с.

Для замыкания системы (6)-(9) необходимо записать соответствующие начальные и граничные условия.

Начальные условия:

распределение температуры -

$$T|_{r=0} = f_0(r, z), \quad (10)$$

$$\text{скорости } v_r|_{r=0} = 0, v_z|_{r=0} = 0, \quad (11)$$

$$\text{градиент давления } -\frac{\partial p}{\partial n} = 0. \quad (12)$$

Граничные условия на твердых поверхностях Γ , $\tau > 0$:

$$\text{температура } T|_{\Gamma} = f(r, z) \quad (13)$$

- из решения задачи теплопроводности;

$$\text{проекция скорости } v_r = v_z = 0 \quad (14)$$

- условия прилипания;

градиент давления - не задается, а определяется из итерационного решения.

Методика численного решения

Рассмотрим основные положения методики численного решения (1) на базе МГЭ [21]. Важной особенностью используемой методики является преобразование исходного нелинейного уравнения (1) в линейное при крайних условиях Дирихле и Неймана. Для этого применяется прямое преобразование Кирхгофа

$$\varphi = \Lambda(T) = \int_0^T \lambda(T) dT, \quad (15)$$

где φ - потенциал.

С учетом (15) (1) превращается в уравнение Пуассона

$$\Delta \varphi + b = 0, \quad (16)$$

где Δ - оператор Лапласа;

$$b = q_{\text{эк}}(X).$$

Граничное интегральное уравнение для (16) имеет вид:

$$\psi \varphi + \int_{\Gamma} \varphi \cdot q^* d\Gamma = \int_{\Gamma} q \cdot \varphi^* d\Gamma + \int_{\Omega} q_n \cdot \varphi^* d\Omega, \quad (17)$$

где φ^* и q^* - фундаментальное сингулярное решение уравнения Лапласа и его нормальная производная;

ψ - константа.

Путем применения второй теоремы Грина интеграл по области Ω в (17) преобразуется к интегралу по границе. При этом используется метод двойственной взаимности (DRM). Таким образом, исходное уравнение (1) полностью сводится к граничному интегральному уравнению, что позволяет при численном его решении ограничиться только дискретизацией поверхности расчетных областей (элементов ячейки). При этом объем Ω вообще не разбивается на элементы.

Для получения распределения температур из решения граничного уравнения применяется обратное преобразование Кирхгофа вида $T = \Lambda^{-1}(\varphi)$.

Прямое преобразование Кирхгофа для системы кристалл-расплав имеет вид:

$$\Lambda(T) = \begin{cases} \lambda_{\text{cr}} T, & T < T_m - \frac{\Delta T}{2} \\ \lambda_{\text{cr}} T + \frac{\lambda_m - \lambda_{\text{cr}}}{2\Delta T} (T - T_m)^2 + \frac{\lambda_m - \lambda_{\text{cr}}}{2} (T - T_m) + \\ + \frac{\lambda_m - \lambda_{\text{cr}} \Delta T}{8}, & T \in \left[T_m - \frac{\Delta T}{2}; T_m + \frac{\Delta T}{2} \right] \\ \lambda_{\text{cr}} T_m + \lambda_m (T - T_m), & T > T_m + \frac{\Delta T}{2} \end{cases}, \quad (18)$$

а обратное преобразование Кирхгофа при $\lambda_{\text{cr}} > \lambda_m$ определяется из следующей системы

$$T = \begin{cases} \frac{\varphi}{\lambda_{\text{cr}}}, & \varphi < \lambda_{\text{cr}} T_m - \lambda_{\text{cr}} \frac{\Delta T}{2} \\ \frac{\lambda_{\text{cr}} \lambda_m \Delta T^2 - 2(\lambda_{\text{cr}} T_m - \varphi) \Delta T}{\sqrt{(\lambda_m - \lambda_{\text{cr}})^2} \lambda_m - \lambda_{\text{cr}}} - \\ - \frac{(\lambda_m + \lambda_{\text{cr}}) \Delta T}{2(\lambda_m - \lambda_{\text{cr}})} + T_m, & \varphi \in \left[\lambda_{\text{cr}} T_m - \lambda_{\text{cr}} \frac{\Delta T}{2}; \lambda_{\text{cr}} T_m + \lambda_m \frac{\Delta T}{2} \right] \\ \frac{\varphi - \lambda_{\text{cr}} T_m}{\lambda_m} + T_m, & \varphi > \lambda_{\text{cr}} T_m + \lambda_m \frac{\Delta T}{2} \end{cases}. \quad (19)$$

При наличии граничных условий сопряжения и конвективного типа преобразование Кирхгофа не приводит к полностью линейному уравнению, поэтому поле температур определяется с помощью итерационной процедуры метода Ньютона. Для расчета T -поля с погрешностью $0,001^\circ\text{C}$ требуется не более 4-5 итераций.

Тигельный вариант. При решении 2D задач (1)-(3) и (6)-(9) используется метод последовательных приближений. Отдельно решаются две задачи: в твердых частях (рис. 1) определяется поле температур в приближении теплопроводности с учетом условия на границе раздела фаз - методом МГЭ; в расплаве (рис. 1 - IV) решается задача конвективного теплообмена - методом МКЭ (CAE ANSYS). Для решения задачи (6)-(9) в качестве граничных температур используется решение задачи (1)-(3), а для определения T -поля в задаче (1)-(3) используется плотность теплового потока, полученная при решении (6)-(9). На первой итерации задачи (1)-(3) на границе твердое тело-расплав в элементе IV (рис. 1) используются адиабатные условия.

Критерием окончания расчетов является разность температур между итерациями. Подобный метод может быть использован, если в области II решается задача РКТ в строгой постановке.

Результаты расчета

Данные расчетов полей температур с использованием глобальных моделей представлены на рис. 7, 8.

Использованы глобальные модели с теплопроводными элементами и предложенные схемы учета сложного теплообмена в кристалле с помощью эффективных коэффициентов теплопроводности и теплоотдачи. При выполнении расчетов T -полей по глобальной 2D модели экспериментальной установки (рис. 7,а) за исходные параметры брались данные из табл.1. При этом температурные краевые условия брались из эксперимента, поэтому в расчетах использовались эффективные коэффициенты как теплопроводности в кристалле, так и теплоотдачи на холодном торце кристалла, рассчитанные при этих условиях.

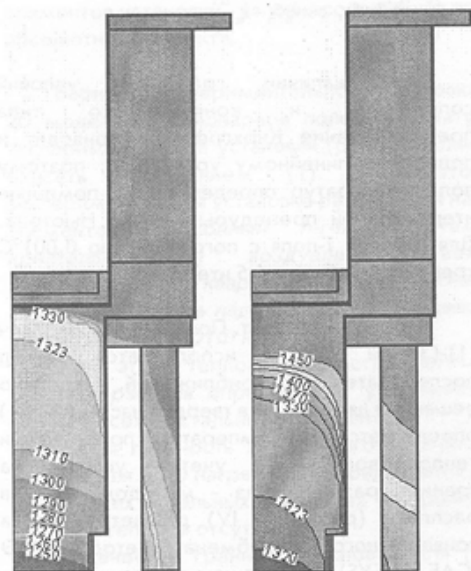


Рис. 7. T -поля глобальной модели теплообмена:

- а) экспериментальная установка, 2D модель с эффективной теплопроводностью;
- б) экспериментальная установка, 2D модель

Полученная в результате расчета конфигурация T -поля в системе кристалл-

расплав аналогична результатам, полученным с учетом РКТ (см. рис. 5,а). При этом не удалось добиться одновременно полного соответствия T -полей и тепловых потоков на границах. Если радиационный теплообмен в кристалле не учитывать, т.е. вместо эффективных использовать истинные коэффициенты теплопроводности и теплоотдачи, тогда T -поле в системе кристалл-расплав будет существенно отлично и будет аналогично рис. 5,в, также будет иметь место существенное отличие в картине теплообмена и T -полей в прилегающих к системе кристалл-расплав элементах (рис. 7,б). В тигельном методе на холодном торце кристалла имеет место непрозрачная граница, поэтому при выполнении расчетов (рис. 8,а) использовано только эффективное значение теплопроводности. Результаты расчета T -поля экспериментальной установки по 3D модели приведены на рис. 8,б.

Выводы

Для учета в глобальных моделях лучистого теплообмена рассматривался подход введения эффективной теплопроводности и эффективного коэффициента теплоотдачи на холодной границе кристалла. Проведенный вычислительный эксперимент и анализ значений теплопроводности и коэффициентов теплоотдачи показывает, что использование эффективной теплопроводности и даже эффективного коэффициента теплоотдачи не всегда позволяет достаточно точно описывать РКТ. Поэтому для задач, требующих точного решения, такой подход не всегда пригоден.

Введение эффективных коэффициентов может быть предложено для глобальных моделей с теплопроводными элементами, рассматривающих процессы теплообмена в кристаллизационных установках с точки зрения управления технологическим процессом и проектирования установки: определение времени процесса кристаллизации, мощности фоновых и осевых нагревателей, скорости подачи шихты, приблизительное положение фронта кристаллизации, его формы и т.д. Для более точного расчета можно использовать вариант сопряжения двух моделей: глобальной - для всей установки и точной РКТ - для элемента системы кристалл-расплав. Сопряжение двух решений при этом осуществляется в итерационном цикле по температуре и плотности теплового потока.

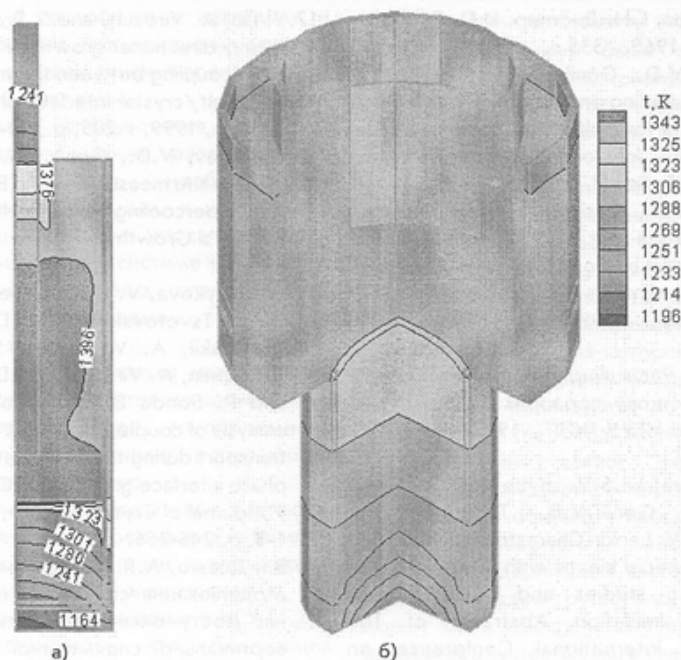


Рис. 8. Т-поля глобальной модели теплообмена:
 а) тигельный метод, 2D модель; б) экспериментальная установка, 3D модель

Благодарность

Исследования проведены при поддержке проекта INTAS Project No. 2000-263.

Литература

1. Чернов А.А. Гиваргизов Е.И. Багдасаров Х.С. и др. Современная кристаллография. Т. 3. Образование кристаллов. - М.: Наука, 1980. - 408 с.
2. Математическое моделирование. Получение монокристаллов и полупроводниковых структур. - М.: Наука, 1986.
3. Смирнов В.А., Старшинова И.В., Фрязинов И.В. Математическое моделирование процессов выращивания монокристаллов по Чохральскому. - В кн.: Математическое моделирование. Получение монокристаллов и полупроводниковых структур. - М.: Наука, 1986. - С. 40 - 58.
4. Yu. Evstratov, V.V. Kalaeв, A.I. Zhmakin, Yu. N. Makarov, A.G. Abramov, N.G. Ivanov, E.M. Smirnov, E. Dornberger, J. Virbulis, E. Tomzig and W.v. Ammon. Modeling analysis of unsteady three-dimensional turbulent melt flow during Czochralski growth of Si crystals. J. Crystal Growth, 2001, v.230, p.22-31.
5. Yeckel, J. Derby Feasibility study of cadmium zinc telluride growth using a submerged heater in a vertical Bridgman system. J. Electronic Materials, 2004, v. 33, № 6, p.1-10.
6. F. Dupret, P. Nicodeme, Y. Ryckmans, P. Wouters and M.J. Crochet. Global modeling of heat transfer in crystal growth furnaces. Int. J. Heat Mass Transfer, 1990, v. 33, p.1849-1862.
7. M. Kurz, A. Pusztai and G. Muller. Development of a new powerful computer code CrysVUN++ especially designed for fast simulation of bulk crystal growth process. J. Crystal Growth, 1999, v. 198, p.101-109.
8. R. Backofen, M. Kurz and G. Muller. Process modeling of the industrial VGF crystal growth process using the software package CrysVUN++. J. Crystal Growth, 2000, v. 199, p.210-217.
9. Yeckel, A. Pandey and J.J. Derby. Representing realistic complexity in numerical models of crystal growth: Coupling of global furnace modeling to three-dimensional flows. In G. De Vahl Davis and E. Leonardi, editors, Advances in Computational Heat Transfer II, New York Academy of Sciences, 2001, p.1193 - 1200.
10. Оптические материалы для инфракрасной техники/ Е.М. Воронова, Б.Н.

- Гричушников, Г.Н. Дистлер, И.П. Петров. - М.: Наука, 1965. - 335 с.
11. Golyshev, V.D., Gonik, M.A., Tsvetovsky, V.B., Supercooling and interface morphology of Bi₄Ge₃O₁₂ for melt crystal growth: experimental results, *Int. Journal of Modern Physics B*, 2002, v. 16, №1-2, p. 34-41.
 12. Varlamov G.B., Vasilchenko G.N., Deshko V.I., Karvatskii A. Ya., Khlebnikov O.E. Thermophysical and optical properties of fluoride crystals and melts // *High Temperatures - High Pressures*. - 1989. v.21, №6, p. 647 - 656.
 13. В.І. Дешко Радіаційно-кондуктивний теплообмін в частково прозорих матеріалах // *Наукові вісті НТУУ "КПІ"*. -1999.-№1.-С.76-82.
 14. А.Я. Карватський, С.В. Быкова, В.Д. Голышев, М.А. Гоник, В.В. Тsvetovsky, В.І. Дешко, А. В. Ленкин Characterization of BGO type of interfacial kinetic with in situ interface supercooling studies and complex heat exchange simulation Abstracts of The Fourteenth International Conference on Crystal Growth, 9-13 August 2004, Alpes Congress, Grenoble, France, p.357.
 15. L. J. Atherton, J.J. Derby and R.A. Brown. Radiative heat exchange in Czochralski crystal growth. *J. Crystal Growth*, 1987, v.84, p.57-70.
 16. S. Kuppuraao and J.J. Derby. Finite element formulations for accurate calculation of radiant heat transfer in diffuse-gray enclosures. *Numer. Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 1993, v.24, p.431-437.
 17. Y. Liu, A. Virozub, and S. Brandon. Facetting during directional growth of oxides from the melt: coupling between thermal fields, kinetics and melt/crystal interface shapes. *J. Crystal Growth*, 1999, v.205, p.333-345.
 18. Golyshev, V.D., Gonik, M.A., Tsvetovsky, V.B., In situ measurement of Bi₄Ge₃O₁₂ interface supercooling during melt crystal growth, *J. Crystal Growth*, 2002, v. 237-239, p. 735-739.
 19. S. V. Bykova, V. D. Golyshev, M. A. Gonik, V. B. Tsvetovsky, V. I. Deshko, A. Ya. Karvatskii, A. V. Lenkin, S. Brandon, O. Weinstein, A. Virozub, J. J. Derby, A. Yeckel and P. Sonda Experimental and numerical analysis of coupled interfacial kinetics and heat transport during the axial heat flux close to the phase interface growth of BGO single crystals // *Journal of Crystal Growth*, 2004, v.266, № 1-3, p. 246-256.
 20. В.І. Дешко, А.Я. Карвацький, О.В. Ленькин Модельювання складного теплообміну під час росту оксидних кристалів методами вертикальної спрямованої кристалізації // *Наукові вісті НТУУ "КПІ"*, 2003р., №3, с.20 - 28.
 21. Карвацький А.Я. Використання методу граничних елементів для розв'язання осесиметричних стаціонарних задач теплопровідності // *Наукові вісті НТУУ "КПІ"*. -1999.-№1.-С.83-87.