

Физико-Технический Институт им. А. Ф. Иоффе
Российская Академия Наук

На правах рукописи

Мамедов Васиф Мамедович

УДК 536.24:536.3.548.55

**Исследование процессов выращивания оксидных кристаллов из
расплава методами Чохральского и Степанова с помощью
вычислительного эксперимента**

01.04.07 – физика конденсированного состояния

Диссертация
на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель: д.ф.-м. н. Юферев Валентин Степанович

Санкт-Петербург 2009

Оглавление

Основные обозначения	4
Введение	6
1. Основные проблемы виртуального выращивания оксидных кристаллов из расплава	11
1.1. Моделирование радиационного теплопереноса	14
1.2. Моделирование процесса выращивания и системы управления ростом кристалла	17
2. Численный метод решения задач радиационного теплопереноса	20
2.1. Постановка задачи радиационного переноса тепла	20
2.1.1. Краевые условия для уравнения переноса	22
2.1.1.1. Краевые условия на непрозрачных границах	22
2.1.1.2. Краевые условия на прозрачных границах	24
2.1.2. Задача переноса излучения в осесимметричном случае	26
2.2. Метод дискретного переноса (discrete transfer method)	29
2.2.1. Осесимметричный случай	30
2.2.1.1. Разбиение области	31
2.2.1.2. Дискретизация уравнения переноса	32
2.2.1.3. Дискретизация граничных условий	34
2.2.1.4. Вычисление $\int_{T_m} \text{div } \mathbf{q}^r d\mathbf{r}$	36
2.2.1.5. Итерационная схема решения задачи переноса излучения	39
2.2.1.6. Тестирование метода дискретного переноса	39
2.2.2. Трехмерный случай	44
2.2.2.1. Тестирование трехмерного варианта метода дискретного переноса	46
2.3. Выводы	48
3. Динамическая модель процесса Чохральского	51
3.1. Предварительные замечания	51
3.2. Моделирование эволюции формы кристалла	55
3.3. Модель управления нагревателем	59
3.4. Итерационный алгоритм нахождения тройной точки	61
3.4.1. Простой алгоритм	62
3.4.2. Улучшенный алгоритм	67
3.5. Корректировка сетки по мере роста кристалла	74
3.6. Выводы	76

4. Исследование явления инверсии фронта кристаллизации при выращивании кристаллов гадолиний-галлиевого граната ($Gd_3Ga_5O_{12}$)	77
4.1. Описание ростового процесса и теплового узла	78
4.2. Влияние радиационных свойств свободной поверхности кристалла и конвекции Марангони на форму межфазной границы	80
4.3. Влияние высоты мениска расплава на работу автоматической системы управления	83
4.4. Моделирование роста кристаллов ГГГ большого размера	84
4.3. Выводы	86
5. Управление многосекционным нагревателем в процессе выращивания кристаллов германата висмута в структуре силленита ($Bi_{12}GeO_{20}$) способом Чохральского с малыми температурными градиентами	87
5.1. Введение	87
5.2. Описание установки	88
5.3. Описание стандартного процесса роста	91
5.4. Условия получения качественных кристаллов	94
5.5. Теплофизические свойства германосилленита $Bi_{12}GeO_{20}$	98
5.6. Результаты моделирования процесса роста кристаллов германосилленита	100
5.6.1. Предварительные замечания	100
5.6.2. Результаты	102
5.6.2.1. Первый этап. Оптимизация	102
5.6.2.2. Второй этап. Динамическое моделирование	109
5.6.2.3. Выводы по результатам расчетов	115
5.7. Экспериментальная проверка	116
5.8. Выводы	118
6. Моделирование тепловых полей и оптимизация тепловой зоны при выращивании лент сапфира (Al_2O_3) методом Степанова	119
6.1. Постановка задачи и алгоритм численного решения	121
6.2. Результаты расчета для базисно ограненных лент шириной 30 мм	129
6.2.1. Экспериментальная проверка	132
6.3. Результаты расчета для базисно ограненных лент шириной 50 мм	135
Заключение	141
Список цитированных источников	143
Приложения	150
A. Эффективный алгоритм трассировки луча в осесимметричном случае	150
B. Условие постоянства формы фронта	154
C. Расчет распределения температуры резистивного нагревателя	156
D. Влияние ориентации ленты на термоупругие напряжения	157

Основные обозначения

I_ν	спектральная интенсивность излучения
$\mathbf{r}$	вектор координат
$I_{vb}(T)$	интенсивностью излучения абсолютно черного тела
n	показатель преломления среды
T_s	температура границы
q^{inc}	поток излучения, падающий на границу
I	интенсивность излучения
t	время
Δt	шаг по времени
T	температура
w_j	квадратурный вес
s	координата на характеристике (вдоль нее)
$\mathbf{q}^r$	вектор плотности потока теплового излучения
T_m	половина тора, полученного вращением полигональной ячейки t_m
D_{ij}	секториальная подобласть осесимметричной области
S_N	схема выбора дискретных направлений на единичной сфере
Q	мощность тепловыделения нагревателя
U	электрическое напряжение
M	масса
g	ускорение свободного падения, 9.812 м/с^2
V_{cr}	скорость кристаллизации
L	скрытая теплота плавления
e	сигнал ошибки
G	задаваемое изменение веса кристалла со временем
F	показание весового датчика
K_P, K_I, K_D	коэффициенты ПИД-регулятора
K_i^-, K_i^+	поправочные коэффициенты
$\mathbf{n}$	вектор нормали к поверхности
n	показатель преломления

Греческие символы

Ω	единичный вектор направления распространения излучения
ν	частота излучения
κ_ν	спектральный коэффициент поглощения
$\sigma_{s,\nu}$	спектральный коэффициент рассеяния
β_ν	спектральный коэффициент ослабления
σ	постоянная Стефана-Больцмана, $5.67 \cdot 10^{-8} \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К}^4)$
λ	длина волны излучения
ρ_s	коэффициент зеркального отражения непрозрачной поверхности
ρ_d	коэффициент диффузного отражения непрозрачной поверхности
ε	степень черноты поверхности
$\rho_{s,n}(\alpha)$	коэффициент зеркального отражения френелевской поверхности
α	угол падения (отражения) излучения на границу
ρ_{d1}, ρ_{d2}	коэффициенты диффузного отражения на прозрачной поверхности
ρ	плотность вещества
r, φ, z	цилиндрические координаты точки
φ_Ω	азимутальная угловая координата направления Ω
θ	полярная угловая координата направления Ω
Ω_j	вектор направления дискретной ординаты
τ	оптическое расстояние
τ_i	управляющий параметр ПИД-регулятора
γ	луч
γ	коэффициент поверхностного натяжения

Введение

Высококачественные кристаллы оксидных соединений широко используются при производстве различного рода оптических приборов, применяемых в медицине, науке и промышленности. Потребность в оксидных кристаллах непрерывно растет, ужесточаются требования к структурному качеству выходной продукции. При этом жесткая конкуренция вынуждает производителей стремиться к постоянному снижению себестоимости производства. Достигнуть этого можно только путем непрерывного совершенствования ростовых технологий. Однако практически любая попытка изменения ростового процесса, например, путем увеличения размеров оксидных кристаллов или модификацией их свойств за счет легирования, радикально меняет тепловые условия выращивания, что приводит к необходимости разработки нового технологического процесса и существенного изменения конструкции ростовой установки.

К сожалению, подобные задачи для оксидных кристаллов (в отличие от полупроводниковых соединений) все еще решаются методом проб и ошибок, что применительно к оксидным кристаллам оказывается, во-первых, чрезвычайно дорогостоящим, поскольку, как правило, используется оснастка из платины или иридия, стоимость которой может достигать сотен тысяч рублей, а также исходные оксиды высокой степени очистки, а, во-вторых, требует недопустимо длительного времени. Поэтому разработка адекватной математической модели ростового процесса является исключительно актуальной, так как оптимизация с активным использованием вычислительного аппарата требует меньшего количества экспериментов, является существенно более дешевой и может быть сделана в более сжатые сроки. Можно сказать, что в этом смысле оксидные кристаллы повторяют путь, пройденный полупроводниками. Однако в отличие от полупроводников, роль моделирования при проектировании и отработке процессов выращивания оксидных кристаллов до сих пор остается весьма и весьма скромной. Причина этого состоит в том, что процессы теплообмена при выращивании оксидов являются гораздо более сложными. Оксидные кристаллы, во-первых, имеют достаточно низкую теплопроводность, как в жидкой, так и в твердой фазе, а во-вторых, как правило, сохраняют достаточную прозрачность для инфракрасного излучения вплоть до температуры плавления. В тоже время расплавы их практически непрозрачны. В результате, при выращивании оксидов перенос тепла в расплаве определяется конвекцией, а в кристалле – излучением. Последнее означает, что кроме расчета радиационного теплообмена между кристаллом, свободной поверхностью расплава и элементами кристаллизационной установки, что обычно делается при любом моделировании роста кристаллов, используя метод угловых коэффициентов [1],

необходимо еще решать уравнение переноса излучения внутри кристалла, что существенно усложняет рассматриваемую задачу и требует применения совершенно других численных методов.

Одним из основных промышленных методов получения оксидных кристаллов является метод Чохральского. Хотя в настоящее время имеются пакеты программ, позволяющие моделировать процесс Чохральского, применительно к оксидным кристаллам, все эти пакеты могут рассчитывать лишь стационарные поля и стационарную форму фронта кристаллизации при заданной форме кристалла, то есть собственно процесс роста не рассматривается. С другой стороны, задача создания виртуального процесса Чохральского, позволяющего моделировать на компьютере весь процесс роста оксидного кристалла от момента затравления до окончания процесса вытягивания, является чрезвычайно заманчивой, поскольку ее решение позволило бы проектировать и отрабатывать процесс выращивания кристалла непосредственно на компьютере. При этом для оксидов потребность именно в таком нестационарном моделировании является существенно большей, чем для полупроводников, например, из-за явления инверсии фронта кристаллизации, когда прогиб фронта резко уменьшается за относительно небольшой промежуток времени.

Для создания виртуального процесса Чохральского необходимо решение двух основных задач: разработки динамической модели ростового процесса, позволяющей отслеживать эволюцию формы кристалла и формы межфазной границы во времени, и объединение этой модели с моделью системы автоматического управления ростом кристалла.

Помимо метода Чохральского получили распространение и другие технологии выращивания оксидных кристаллов. Для выращивания профилированных кристаллов широко используется способ Степанова, который позволяет получать монокристаллы с сечением практически любой формы. Наиболее актуальные профили – это стержни, трубки и ленты. Особый интерес представляют монокристаллические ленты лейкосапфира с базисной гранью параллельной широкой стороне ленты (базисноограненные ленты). Базисноограненные (БО) ленты сапфира являются чрезвычайно привлекательным материалом как для использования в качестве подложек при эпитаксии нитридных структур, так и при изготовлении различного рода оптических изделий. Такие ленты обладают зеркально-гладкой поверхностью, что снижает до минимума потребность в их дорогостоящей механической обработке. С другой стороны, указанные ленты являются чрезвычайно интересным модельным объектом для изучения как процессов возникновения дефектной структуры кристаллов, так и механизмов

формообразования кристаллов в случае выхода граней на их внешнюю поверхность. Отличительная особенность процесса выращивания БО лент сапфира состоит в том, что в таких лентах очень трудно предотвратить образование блоков, в то время как при выращивании лент сапфира другой ориентации подобная проблема не возникает. Основная причина образования блочной структуры в БО лентах - это термоупругие напряжения, возникающие в кристалле в процессе роста. Поэтому, чтобы бороться с образованием блоков, необходимо управлять температурным полем внутри установки. Для этого требуется качественно новый уровень в понимании процессов теплообмена внутри теплового узла. И в этом случае без помощи численного моделирования обойтись невозможно. Происходящие внутри кристаллизационной установки тепловые процессы слишком сложны, а возникающие эффекты слишком тонки для их понимания исключительно на основе экспериментальных измерений.

Целью диссертационной работы являлось:

- 1) Разработка алгоритмического и численного инструментария для изучения на компьютере процесса роста оксидных кристаллов из расплава методами Чохральского и Степанова.
- 2) Использование этого инструментария для исследования глобального теплообмена в кристаллизационной установке, оптимизации тепловых условий выращивания и проведения численных экспериментов, моделирующих во времени реальный процесс роста кристалла.
- 3) Сопоставление результатов моделирования с реальными технологическими процессами и выработка на этой основе рекомендаций по изменению режимов выращивания кристаллов и модификации конструкции тепловой зоны ростовых установок.

Структура диссертации

Диссертация содержит введение, 6 глав и заключение. Ее условно можно разделить на две половины: «теоретическую» и «практическую». В первой из них описывается программный и алгоритмический инструментарий, а во второй - с помощью этого инструментария приводятся результаты вычислительных экспериментов по выращиванию оксидных кристаллов методами Чохральского и Степанова с целью оптимизации ростового процесса и выработки рекомендаций по его совершенствованию.

В первой главе диссертации описываются основные проблемы, рассматриваемые в данной работе, и дается обзор литературы.

Вторая глава посвящена решению проблемы моделирования радиационного теплообмена в областях сложной формы, заполненных поглощающей и излучающей средой с различными коэффициентами поглощения и преломления. Излагается численный метод решения уравнения переноса излучения, позволяющий, с одной стороны, эффективно решать задачи как с диффузно, так и с зеркально отражающими и преломляющими границами, а, с другой, - избежать численной диффузии*. Осесимметричный вариант метода применялся при моделировании процесса Чохральского, а трехмерный использовался для расчета теплообмена внутри кристаллизационной установки при выращивании лент сапфира методом Степанова.

Третья глава посвящена разработке динамической модели выращивания оксидных кристаллов методом Чохральского и модели автоматического управления ростом кристалла по датчику веса. Описывается комплекс программных инструментов, позволяющих исследователю после задания геометрии ростовой установки, размеров кристалла, теплофизических и радиационных свойств кристалла, расплава и элементов установки, а также параметров системы управления получить полную картину процесса выращивания оксидного кристалла, включающую изменение во времени формы и размеров кристалла, формы фронта кристаллизации, тепловыделения в нагревателе, распределения температуры и тепловых потоков во всей установке.

В четвертой главе выполнено тестирование динамической модели и модели управления на примере выращивания кристаллов гадолиний-галлиевого граната (ГГГ). Исследуется явление инверсии фронта кристаллизации на стадии разрачивания кристалла. Изучается влияние конвекции Марангони и радиационных свойств свободной поверхности кристалла на вариации формы межфазной границы.

В пятой главе исследуется рост кристаллов германата висмута в структуре силленита $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$ (в дальнейшем - BGO) способом Чохральского с малыми температурными градиентами. Рассмотрена задача оптимизации глобального теплообмена в кристаллизационной установке с целью выработки обоснованных алгоритмов управления тепловыделением в многосекционном нагревателе, который используется для достижения низких градиентов температуры в расплаве. Найденные алгоритмы были апробированы сначала «виртуально» с помощью динамической модели процесса Чохральского, а затем использованы в реальном технологическом процессе.

В главе 6 рассматривается проблема получения базисноограненных лент лейкосапфира методом Степанова. Исследовано влияние конструкции тепловых экранов на величину термоупругих напряжений в лентах шириной 30 и 50 мм. Объяснено, почему

* Численная диффузия – численный дефект, выражающийся в размытии и сглаживании решения.

в тепловой зоне с наклонными экранами удастся выращивать безблочные 30 мм ленты и не удастся выращивать ленты шириной 50 мм. Предложены конструкции тепловой зоны, позволяющие снизить почти до нуля уровень остаточных напряжений в 30 мм лентах и в два раза уменьшить уровень термоупругих напряжений в лентах шириной 50 мм.

В заключении приводятся новые результаты, полученные в диссертации.

1. Основные проблемы виртуального выращивания оксидных кристаллов из расплава

Изучение роста кристаллов из расплава на компьютере путем проведения вычислительного эксперимента требует использования моделей, которые максимально приближены к реальным процессам. Однако чем лучше модель отображает действительность, тем больше вычислительных ресурсов необходимо для проведения моделирования и, следовательно, тем более высокие требования предъявляются к используемым методам расчета.

Хотя моделированием процессов теплообмена при выращивании диэлектрических полупрозрачных кристаллов занимаются уже более 30 лет, количество работ, посвященных данной проблеме, сравнительно невелико, по крайней мере, по сравнению с полупроводниковыми кристаллами. Как уже отмечалось, причина этого лежит в существенно большей сложности указанных задач в случае выращивания диэлектрических кристаллов. В результате, с одной стороны, моделирование не могло дать адекватного ответа на запросы промышленности, а с другой – промышленность вполне обходилась без моделирования, пока размеры кристаллов были относительно небольшими. Однако сейчас ситуация изменилась. Во-первых, накоплен значительный опыт в моделировании роста полупрозрачных кристаллов и разработаны соответствующие методы расчета, а во-вторых, появилась потребность в кристаллах большого размера, для которых разработка технологии выращивания без помощи моделирования, причем такого моделирования, которое позволяет реализовать на компьютере виртуальный процесс роста кристаллов, оказывается проблематичной, либо вообще невозможной.

Изначально при моделировании роста оксидных кристаллов основное внимание уделялось изучению конвекции (см., например, [2], [3]). Это объясняется, во-первых, тем, что исторически моделирование выращивания кристаллов началось с процесса Чохральского, в котором роль конвекции чрезвычайно велика. Во-вторых, при выращивании оксидных кристаллов методом Чохральского сразу же столкнулись с явлением инверсии фронта кристаллизации, когда форма фронта быстро меняется от сильно прогнутой в расплав до почти плоской [4]. Детальные экспериментальные и численные исследования позволили выяснить, что причиной инверсии является смена режима течения в расплаве. Под влиянием либо увеличения диаметра кристалла в результате его разрачивания, либо из-за увеличения скорости вращения кристалла,

исходное свободно-конвективное течение заменяется течением, в котором доминирующую роль играет вынужденная конвекция, вызванная вращением кристалла [5].

Несмотря на важность конвекции, всегда существовало понимание того, что адекватное моделирование роста оксидных кристаллов из расплава является невозможным без корректного расчета радиационного теплообмена внутри кристалла, поскольку оксидные кристаллы, как правило, сохраняют достаточную прозрачность для инфракрасного излучения вплоть до температуры плавления, с одной стороны, и имеют низкую теплопроводность с другой. Однако поскольку моделирование радиационного теплопереноса в многомерных областях, заполненных поглощающей и излучающей средой, до сих пор остается весьма трудной задачей, в большинстве работ при моделировании оксидных кристаллов использовались достаточно сильные допущения и приближения. В работе [6] при решении уравнения переноса излучения применялось P_1 приближение [1], [7], которое, вообще говоря, применимо только к кристаллам с оптической толщиной существенно большей единицы. Наоборот, в работах [8], [9] в методе направленной кристаллизации использовалась двухполосная модель, когда весь спектр излучения разбивался на две области, в одной из которых кристалл считался полностью прозрачным, а в другой непрозрачным. При расчете радиационно-кондуктивного теплообмена в тонкостенных профилированных кристаллах, выращиваемых методом Степанова, использовалось световодное приближение [10], в котором при решении уравнения переноса излучения удерживались только те лучи, которые падают на боковую поверхность кристалла под углом большим угла полного внутреннего отражения. Корректное рассмотрение радиационного теплообмена было выполнено в [11] применительно к методу Бриджмена. Однако эта задача является существенно более простой, чем в случае процесса Чохральского, поскольку отсутствует боковая поверхность, на которой происходит отражение и преломление световых лучей. Использование аналогичного подхода для моделирования роста кристаллов ГГГ по Чохральскому, потребовало введения дополнительного предположения о наличии на поверхности кристалла непрозрачной пленки [12]. Такое же допущение было использовано в [13] и [14]. Решение уравнения переноса излучения в приближении оптически тонкого слоя было выполнено в [15] при моделировании процесса Чохральского для кристаллов ниобата лития. Строгое рассмотрение указанной проблемы было дано в работах [16] и [17]. При этом боковая поверхность кристалла считалась диффузно отражающей и преломляющей. Необходимо отметить, что указанное допущение использовалось во всех зарубежных работах. Вместе с тем, боковая

поверхность кристалла в методе Чохральского весьма часто является скорее зеркально, чем диффузно отражающей. Решение задач радиационного теплообмена в областях сложной формы с зеркальными (френелевскими) границами практически не рассматривалось. Первые работы в этом направлении применительно к выращиванию кристаллов германата висмута были выполнены в 90 годах [18]. Было обнаружено, что распределение тепловых потоков на фронте кристаллизации существенно зависит от характера отражения излучения на свободной поверхности кристалла. Это позволило объяснить вариацию формы межфазной границы при выращивании кристаллов германоэвлинита вариантом метода Чохральского с низкими градиентами температуры [19]. Вместе с тем, в этих работах для решения уравнения переноса излучения использовался метод характеристик [20], [21], который, как оказалось, обладает весьма сильной сеточной диффузией, что ограничивает применение этого метода случаям достаточно коротких кристаллов. Таким образом, возникла потребность в разработке метода, способного эффективно решать задачи радиационного переноса тепла в полупрозрачных кристаллах любого размера независимо от характера отражения и преломления излучения на боковой поверхности.

С другой стороны, в моделировании радиационного теплообмена существенную роль играют не только размеры кристаллов, но и их форма. До сих пор моделирование теплообмена в кристаллах проводилось в приближении осевой симметрии. Такой подход, однако, мало пригоден в случае выращивания профилированных кристаллов способом Степанова, поскольку применим лишь к простейшим профилям с сечением в виде круга или кольца, а уже такой «простой» профиль как лента требует трехмерного моделирования. Поскольку трехмерные модели радиационного теплообмена требуют существенно больших затрат вычислительных ресурсов, то практическое использование подобных моделей для изучения роста кристаллов возможно лишь при наличии эффективных методов их расчета.

Высокая сложность решения задач теплообмена при выращивании оксидных кристаллов является, по-видимому, основной причиной, почему до сих пор указанные задачи рассматривались только в статической постановке [22], когда форма кристалла считалась заданной и соответствовала некоторому мгновенному состоянию ростовой системы. Оправданием такого подхода служит обычно малая скорость вытягивания диэлектрических кристаллов, которая для метода Чохральского составляет порядка нескольких миллиметров в час, а для метода Степанова, хотя и является на порядок большей, тем не менее, остается весьма низкой. Предполагается, что при таких скоростях температурное поле в кристалле успевает подстроиться к изменению его размеров и

формы. Подобные аргументы более или менее пригодны для стадии роста кристалла постоянного диаметра и едва ли соответствуют реальности на стадиях затравления и разращивания, которые играют очень важную роль в технологическом процессе. Кроме того, при изучении роста кристаллов в автоматическом режиме, необходимо моделировать работу системы управления, что требует использование нестационарного подхода. И, наконец, система кристалл-расплав обладает достаточно большой инерционностью, что надо обязательно принимать во внимание, если мы хотим исследовать реальный процесс выращивания кристалла. Таким образом, для проведения виртуального роста кристаллов на компьютере необходимо использовать нестационарные, динамические модели, которые, во-первых, позволяют отслеживать эволюцию формы кристалла в процессе его выращивания, а, во-вторых, включают в себя систему управления ростом кристалла.

1.1. Моделирование радиационного теплопереноса

Для численного решения задач радиационного теплопереноса в излучающих, поглощающих и рассеивающих средах предложено немало методов (см. обзор [23]). Тем не менее, задачи расчета переноса теплового излучения в трехмерных областях нерегулярной формы с непрозрачными и прозрачными зеркальными границами, разделяющими среды с различными показателями преломления, остаются проблематичными. Подобные проблемы до сих пор практически не рассматривались, хотя они возникают не только при моделировании теплообмена при выращивании оптических кристаллов из расплава различными способами [24], [25], но и в других приложениях, например, при исследовании процессов охлаждения стекла [26].

Решение задач переноса излучения в многомерных областях с прозрачными зеркальными (френелевскими) границами, разделяющими области (среды) с различными показателями преломления сталкивается с двумя основными трудностями. Первая, традиционная, состоит в том, что интенсивность излучения в общем случае является функцией пяти переменных: трех пространственных координат и двух углов, определяющих направление луча. В результате, по-прежнему, несмотря на огромный прогресс вычислительной техники, решение уравнения переноса излучения требует внушительных затрат вычислительных ресурсов. Вторая проблема непосредственно связана с особенностями зеркального отражения на границах, разделяющих среды с различными показателями преломления. Коэффициент зеркального (френелевского) отражения в случае перехода луча из области с более высоким коэффициентом

преломления n_1 в среду с меньшим коэффициентом преломления n_2 испытывает очень резкие изменения в окрестности угла полного внутреннего отражения. Например, при $n_1 = 2$ и $n_2 = 1$ угол полного внутреннего отражения оказывается достаточно малым и равным 27 градусам, при этом коэффициент отражения изменяется в 6 раз от 0.15 до 1 в интервале углов падения от 24 до 27 градусов. Таким образом, коэффициент зеркального (френелевского) отражения оказывается практически разрывной функцией угла падения вблизи критического угла полного внутреннего отражения. Поэтому в задачах переноса излучения с зеркальными (френелевскими) границами интенсивность излучения имеет существенную нерегулярность в области угловых переменных (см. работы [27], [28]), даже если краевые условия описываются достаточно гладкими функциями, отсутствуют точечные источники излучения и пространственная область, в которой решается уравнение переноса, выпукла.

Эта особенность задачи приводит к следующим проблемам при ее численном решении. Прежде всего, для того, чтобы обеспечить достаточное количество лучей внутри телесного угла, равного углу полного внутреннего отражения, необходимо использовать очень мелкие разбиения по угловым переменным. В результате количество переменных существенно возрастает по сравнению с традиционными задачами с диффузными границами. Кроме того, фактическая «разрывность» интенсивности излучения по угловым переменным приводит при использовании методов типа метода дискретных ординат к появлению аномальной численной диффузии, которая может приводить к численным решениям, качественно отличающимся от точного. Метод дискретных ординат (МДО) – это метод численного решения многомерных задач переноса излучения, который интенсивно развивается в последнее время (см., например, [29], [30], [31], [32], [33]). К его основным достоинствам следует отнести потенциальную способность к довольно точным вычислениям, алгоритмическую простоту и легкость сопряжения с другими вычислительными методами, использующими конечные разности, конечные элементы или конечные объемы. Последнее особенно важно при моделировании сложного теплообмена, включающего, помимо радиационного, кондуктивный и конвективный теплоперенос. Однако существенным недостатком предложенных вариантов МДО является уже упоминавшаяся выше численная диффузия, присущая численным сеточным методам решения гиперболических уравнений. Уже в задачах переноса излучения с диффузными границами численная диффузия может приводить к значительным искажениям в получаемом численном решении. В задачах же переноса с френелевскими границами решение имеет существенно более нерегулярный характер, поэтому и искажение решения численной диффузией в таких задачах проявляется сильнее.

Известно, что численная диффузия спадает по мере дробления сетки и увеличения числа дискретных направлений. Однако трехмерные задачи переноса излучения в результате их дискретизации приводят к системам линейных алгебраических уравнений чрезвычайно большой размерности. Поэтому, из-за ограниченности вычислительных ресурсов в таких задачах весьма сложно, а порой нереально, добиться снижения численной диффузии до уровня, который бы позволял получить приемлемое численное решение. В некоторых случаях оказывается, что численное решение, которое удается получить с помощью МДО, качественно отличается от точного. Еще одним существенным недостатком МДО является так называемый лучевой эффект, связанный с заменой непрерывного поля направлений конечным дискретным набором. От этого недостатка свободны методы конечных элементов/объемов, основанные на преобразовании уравнения переноса излучения в параболические уравнения второго порядка [34]. Отличаясь умеренными требованиями к вычислительным ресурсам, эти методы также приводят к значительной численной диффузии. Кроме того, значительные сложности вызывает постановка граничных условий с произвольным законом отражения. Высокой точностью и универсальностью обладает метод Монте-Карло и его модификации [26], [35], [36], позволяющие моделировать практически все оптические явления в областях произвольной формы. Этот метод, однако, является наиболее трудоемким в вычислительном плане. Эффективная модификация метода, основанная на единообразном рассмотрении поверхностных и объемных излучающих элементов, предложена в работе [37]. К сожалению, использованная авторами модель испускания лучей применима только к средам с небольшим коэффициентом поглощения (и, как следствие, непригодна для моделирования переноса излучения в случае спектральной зависимости оптических свойств). Этот недостаток устраняет новая модель эмиссии лучей, предложенная в работах [38], [39]. Перспективным подходом может быть сочетание метода Монте-Карло с другими, менее требовательными к вычислительным ресурсам, методами: в [40] предложен гибридный метод расчета, сочетающий метод Монте-Карло для описания распространения излучения, испускаемого поверхностными элементами с методом конечных объемов для излучения от объемных элементов. При этом ни в одной из упомянутых выше работ не рассматривались задачи с зеркальными (френелевскими) границами. До сих пор подобные задачи решались, как правило, только в одномерном приближении, когда все описанные выше проблемы исчезают.

Таким образом, задача построения эффективного метода решения уравнения переноса теплового излучения в трехмерных областях сложной формы, заполненных излучающими, поглощающими и рассеивающими средами, при наличии непрозрачных и

прозрачных зеркальных границ, разделяющих среды с различными показателями преломления и коэффициентами поглощения, остается весьма актуальной и по сей день.

1.2. Моделирование процесса выращивания и системы управления ростом кристалла

Для проведения виртуального роста кристаллов на компьютере необходимо использовать нестационарные, динамические модели, которые, во-первых, позволяют отслеживать эволюцию формы кристалла в процессе его выращивания, а, во-вторых, включают в себя систему управления ростом кристалла.

Необходимо отметить, что для полупроводниковых кристаллов динамические модели рассматривались уже достаточно давно еще в конце 80х-90 годов. В работах [41], [42] была опубликована термо-капиллярная динамическая модель, которая была использована для моделирования роста кристаллов кремния методом Чохральского с целью исследования его устойчивости, динамического поведения и влияния систем управления. Позже, в работе [9] на основе все той же термо-капиллярной модели было проведено численное исследование роста арсенида галлия при наличии на поверхности расплава слоя полупрозрачного инкапсулянта и в присутствии осевого магнитного поля, с последующим сопоставлением полученных результатов с экспериментом. Несколько иной алгоритм динамического моделирования представлен в работе [43]. С его помощью в [44] было проведено исследование динамических особенностей роста кристаллов германия. Во всех указанных работах использовался упрощенный подход, в котором влияние конвекции расплава не учитывалось, а расчет теплообмена проводился в квазистационарном приближении. С другой стороны, в недавней статье [45] описано моделирование роста кристалла кремния с учетом трехмерной, турбулентной, анизотропной конвекции в расплаве. Однако изменение диаметра кристалла в процессе роста в этой работе отслеживается с довольно существенным ограничением – трехфазная линия в данной модели может перемещаться только в горизонтальном направлении. Поэтому данный вариант пока что еще нельзя считать полноценной динамической моделью.

Конечно, динамическое моделирование роста полупроводниковых кристаллов является значительно более простой задачей, чем моделирование роста оксидов, поскольку, как уже отмечалось, в случае полупроводников конвекция в расплаве играет существенно более слабую роль, а кристалл непрозрачен для теплового излучения. В результате межфазная граница имеет не столь изогнутую форму, вычисление скорости

кристаллизации в трехфазной точке, где пересекаются границы кристалл-расплав, кристалл-газ и расплав-газ, и расчет ее динамики упрощаются и становятся более надежными.

Впервые моделирование процесса вытягивания оксидного кристалла в нестационарной постановке была выполнено в [19] применительно к изучению явления инверсии межфазной границы на стадии разращивания кристаллов ГГГ. Однако эта задача была нестационарной лишь в смысле расчета эволюции формы кристалла и формы фронта кристаллизации, в то время как для расчета теплообмена, по-прежнему, использовался квазистационарный подход. Кроме того, форма конуса разращивания в этой работе задавалась и, следовательно, управление ростом не моделировалось.

Надо подчеркнуть, что даже для полупроводников динамическое моделирование роста кристаллов рассматривается отдельно независимо от моделирования системы управления ростом кристалла. Исключение составляют работы [41], [9] в которых моделировалось управление процессом роста кристаллов кремния и арсенида галлия. Однако в качестве «измеряемого» параметра на вход системы контроля поступал текущий радиус кристалла (радиус кристалла в тройной точке). Такой подход может рассматриваться только как чисто модельный, поскольку в реальности текущий радиус кристалла непосредственно измерить невозможно. В качестве оправдания такого подхода может служить то, что в цитируемой работе он использовался для изучения устойчивости роста кристалла, а не для моделирования реального процесса выращивания. В единственной коммерческой программе FEMAGSoft [43], в которой имеется блок динамического моделирования, предназначенный для более точного предсказания распределения точечных дефектов и кислорода в кремнии, форма кристалла считается заданной, а мощность нагревателя находится из решения обратной задачи.

Вместе с тем, совместное рассмотрение динамической модели и модели управления ростом кристалла является для оксидных кристаллов существенно более важным. Например, уже указывалось, что рост оксидных кристаллов часто сопровождается инверсией фронта кристаллизации, то есть быстрым изменением формы межфазной границы от сильно прогнутой в расплав до практически плоской и даже выгнутой вверх. Как правило, системы управления ростом оксидных кристаллов основаны на применении автоматического весового контроля. Быстрое уменьшение прогиба фронта в процессе инверсии сопровождается уменьшением веса кристалла. Если в этот момент в систему управления не вводятся специальные поправки, то она может неправильно трактовать показания весового датчика, что повлечет за собой ослабление и даже потерю контроля над процессом роста. Поэтому, операторы ростовых установок вынуждены внимательно

отслеживать начало инверсии с тем, чтобы при необходимости успеть перевести систему в ручной режим управления. Естественно, хотелось бы после затравления проходить весь процесс выращивания на автомате. Для этого нужно иметь какие-то удобные качественные и количественные критерии, с помощью которых система управления проходила бы сложные участки без вмешательства оператора. Учет природы происходящих внутри установки процессов путем привлечения аппарата динамического моделирования в комбинации с моделированием системы управления может послужить мощным подспорьем к выработке этих критериев.

Таким образом, моделирование на компьютере всего процесса Чохральского от стадии затравления до стадии окончания роста требует решения двух проблем: создания динамической модели и создания модели управления процессом выращивания. Очевидно, что указанная проблема является очень сложной и поэтому при ее решении естественно ограничиться рассмотрением систем, обладающих осевой симметрией. В реальности форма оксидных кристаллов может весьма сильно отклоняться от осесимметричной даже в тех установках, которые обладают цилиндрической симметрией, причиной чего могут быть, например, грани, возникающие на фронте кристаллизации и выходящие затем на боковую поверхность кристалла. Тем не менее, даже для ограненных кристаллов, чья форма не обладает цилиндрической симметрией, использование осесимметричного подхода может оказаться вполне приемлемым. В частности, как показано ниже, рассчитанная в такой модели динамика роста кристалла германата висмута оказывается весьма близка к той, что наблюдается в реальном технологическом процессе.

2. Численный метод решения задач радиационного теплопереноса

При выращивании оксидных кристаллов перенос тепла излучением играет особенно важную роль, поскольку многие оксидные кристаллы сохраняют достаточно высокую степень прозрачности в инфракрасной части спектра при температурах близких к температуре плавления. В результате кроме радиационного теплообмена между кристаллом, свободной поверхностью расплава и элементами кристаллизационной установки необходимо учитывать еще и перенос тепла излучением внутри кристалла. Более того, во многих случаях радиационный механизм переноса тепла в теле кристалла оказывается доминирующим над переносом тепла за счет теплопроводности.

Положение осложняется еще и тем, что, как было показано в работах [46], [47], [48], [49] и др., распределение тепловых потоков на фронте кристаллизации существенно зависит от характера отражения излучения на свободной поверхности кристалла. Таким образом, при моделировании радиационного теплообмена необходимо использовать такие подходы, которые позволяют при решении уравнения радиационного переноса корректно учитывать сложный характер поведения теплового излучения на границах различных сред, поглощение и рассеяние радиации внутри полупрозрачных тел (чаще всего это кристалл) и собственное тепловое излучение из внутренних областей таких тел.

При этом метод не должен быть слишком требовательным к вычислительным ресурсам. В противном случае даже достаточно точный алгоритм может оказаться неприемлемым для практических расчетов из-за недопустимо высокой трудоемкости.

2.1. Постановка задачи радиационного переноса тепла

Рассмотрение задачи переноса излучения проводится в рамках приближения геометрической оптики. Предполагается, что

- 1) излучение является неполяризованным и описывается одной функцией - спектральной интенсивностью излучения $I_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, t)$, которая равна количеству энергии излучения, проходящего в момент времени t в направлении $\mathbf{\Omega}$ через единичную площадку, расположенную в точке $\mathbf{r}$ перпендикулярно направлению распространения $\mathbf{\Omega}$, внутри единичного телесного угла, осью которого является направление $\mathbf{\Omega}$, в единичном интервале частот, включающем частоту ν , и в единицу времени [1];
- 2) в каждой точке среды выполняется условие локального термодинамического равновесия;

- 3) выполняется закон Кирхгофа, который устанавливает, что интенсивность излучения $I_\nu(\mathbf{r})$, испускаемого в среде, находящейся в термодинамически равновесном состоянии, связана со спектральным коэффициентом поглощения $\kappa_\nu(\mathbf{r})$ и интенсивностью излучения абсолютно черного тела $I_{vb}(T)$ соотношением $J_\nu(\mathbf{r}) = \kappa_\nu(\mathbf{r}) I_{vb}(T(\mathbf{r}))$. Здесь $I_{vb}(T) = \frac{2h\nu^3}{c^2 [\exp(h\nu/kT) - 1]}$, h – постоянная Планка, c – скорость распространения излучения в среде, а k – постоянная Больцмана.
- 4) явной зависимостью интенсивности излучения от времени можно пренебречь;
- 5) рассеяние является изотропным.

Тогда уравнение переноса излучения принимает вид

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla I_\nu(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + \beta_\nu(\mathbf{r}) I_\nu(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \kappa_\nu(\mathbf{r}) I_{vb}(T) + \sigma_{s,\nu} \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} I_\nu(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') d\boldsymbol{\Omega}', \quad (2.1)$$

где $\sigma_{s,\nu}$ – это спектральный коэффициент рассеяния, а $\beta_\nu(\mathbf{r}) = \kappa_\nu(\mathbf{r}) + \sigma_{s,\nu}(\mathbf{r})$ – спектральный коэффициент ослабления.

Важным частным случаем радиационного теплопереноса является так называемое серое или односкоростное приближение, когда полагается, что радиационные свойства среды не зависят от частоты. Тогда интегрирование уравнения (1) по всему спектру дает

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + \beta(s) I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \kappa(\mathbf{r}) \frac{n^2 \sigma T^4}{\pi} + \sigma_s(\mathbf{r}) \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') d\boldsymbol{\Omega}', \quad (2.2)$$

где

$$I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \int_{\nu=0}^{\infty} I_\nu(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) d\nu, \quad (2.3)$$

$$\int_{\nu=0}^{\infty} I_{vb}(T) d\nu \equiv I_b(T) = \frac{n^2 \sigma T^4}{\pi}. \quad (2.4)$$

В последней формуле n – показатель преломления среды, а $\sigma = 5.67 \cdot 10^{-12}$ Вт/см²К⁴ – постоянная Стефана-Больцмана.

Замечание. Уравнение переноса типа (2.1) возникает не только при решении задач теплообмена, но и в других областях физики, например в теории переноса нейтронов (см. [50]). И в принципе, излагаемый в данной главе подход можно, при необходимости, приспособить и для решения других, не только тепловых, задач переноса.

Помимо односкоростного приближения широко применяется многополосная модель, которая позволяет учитывать спектральную зависимость радиационных свойств среды

(это особенно актуально для оксидных кристаллов, коэффициенты поглощений которых, как правило, имеют сильную зависимость от длины волны излучения λ). В основе многополосного приближения лежит положение о том, что в пределах каждой полосы $\Delta_i = [\lambda_{i-1}, \lambda_i]$ радиационные свойства среды не меняются. Тогда интегрирование (2.1) по полосе Δ_i дает

$$\Omega \cdot \nabla I_i(\mathbf{r}, \Omega) + \beta_i(s) I_i(\mathbf{r}, \Omega) = \kappa_i(\mathbf{r}) I_{bi}(T) + \sigma_{s,i}(\mathbf{r}) \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} I_i(\mathbf{r}, \Omega') d\Omega', \quad (2.5)$$

где

$$I_i(\mathbf{r}, \Omega) = \int_{\lambda_{i-1}}^{\lambda_i} I_\lambda(\mathbf{r}, \Omega) d\lambda, \quad (2.6)$$

$$I_{bi}(T) = \int_{\lambda_{i-1}}^{\lambda_i} I_{\lambda b}(T) d\lambda. \quad (2.7)$$

Здесь $I_{\lambda b} \equiv I_{\nu b}$, $I_\lambda \equiv I_\nu$, где $\lambda = \frac{c_0}{\nu}$, а c_0 - скорость света в вакууме.

Замечание. Для вычисления величин $I_{bi}(T)$ удобно использовать следующее соотношение с хорошо сходящимся рядом [51]:

$$\int_0^{\lambda T} \frac{I_{\lambda b}(T)}{\sigma T^4} d(\lambda T) = \frac{15}{\pi^4} \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{e^{-nx}}{n} \left(x^3 + \frac{3x^2}{n} + \frac{6x}{n^2} + \frac{6}{n^3} \right) \right], \text{ где } x = \frac{hc_0}{\lambda k T}.$$

2.1.1. Краевые условия для уравнения переноса

Уравнение переноса задает изменение интенсивности теплового излучения, распространяющегося в прозрачной среде. Однако этого недостаточно для определения всего поля интенсивностей, поскольку излучение претерпевает изменения не только внутри объема, но и на его границах. Поведение излучения на границах области учитывается с помощью соответствующих краевых условий. В этом разделе будут рассмотрены их основные варианты, которые используются при практических расчетах. При этом краевые условия будут записаны для постановки задачи в сером приближении для уравнения радиационного теплопереноса (2.2). Краевые условия для уравнения переноса в более общем виде (2.1) (или (2.6)) выглядят совершенно аналогично, с той лишь разницей, что все интегральные величины следует заменить соответствующими спектральными: то есть вместо I , должно стоять $I_\nu(I_i)$, вместо I_b - $I_{\nu b}(I_{bi})$ и т.д..

2.1.1.1. Краевые условия на непрозрачных границах. На границе с непрозрачной средой радиационный тепловой поток, приходящий из прозрачной области, частично

поглощается, а частично отражается. Поэтому исходящее от такой стенки излучение формируется, с одной стороны, ее собственным тепловым излучением, а с другой стороны, той частью падающего радиационного потока, которая отразилась от границы. Рассмотрим два наиболее часто используемых при моделировании варианта.

Зеркальная граница. На такой границе предполагается, что падающее излучение зеркально отражается от непрозрачной поверхности по законам геометрической оптики. Тогда краевое условие на непрозрачной зеркальной границе для уравнения (2.2) имеет вид

$$I^{out}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = \rho_s I^{inc}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}') + (1 - \rho_s) I_{b,s}, \quad \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n} < 0. \quad (2.8)$$

Здесь $\mathbf{n}$ – внешняя нормаль к граничной поверхности в точке $\mathbf{r}$; $\mathbf{\Omega}' = \mathbf{\Omega} - 2(\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}$ – направление луча, падающего на границу в точке $\mathbf{r}$ и зеркально отраженного в направлении $\mathbf{\Omega}$ (рис. 2.1a), $I_{b,s} = n^2 \sigma T_s^4 / \pi$, T_s – температура границы. Предполагается, что коэффициент зеркального отражения ρ_s не зависит от угла падения. Верхние индексы *inc* и *out* введены специально для того, чтобы подчеркнуть, что соответствующие величины относятся либо к приходящему, либо к уходящему от границы излучению.

Диффузная граница. В отличие от зеркальной границы интенсивность излучения, уходящего от диффузной границы, не зависит от направления, и интенсивность отраженного излучения равномерно распределена по всей полусфере для каждого падающего луча (рис. 2.1b). В результате получаем соотношение

$$I^{out}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = \rho_d \frac{q^{inc}(\mathbf{r})}{\pi} + (1 - \rho_d) I_{b,s}, \quad \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n} < 0, \quad (2.9)$$

где ρ_d – коэффициент диффузного отражения стенки, $(1 - \rho_d) I_{b,s}$ – собственное тепловое излучение непрозрачной стенки, а $q^{inc}(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{n} > 0} |\mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{n}| I(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}') d\mathbf{\Omega}'$ – поток излучения, падающий на границу. Вместо коэффициента отражения ρ (как для диффузного случая, так и для зеркального) часто используется степень черноты поверхности ε (emissivity), которая связана с ρ соотношением $\varepsilon = 1 - \rho$.

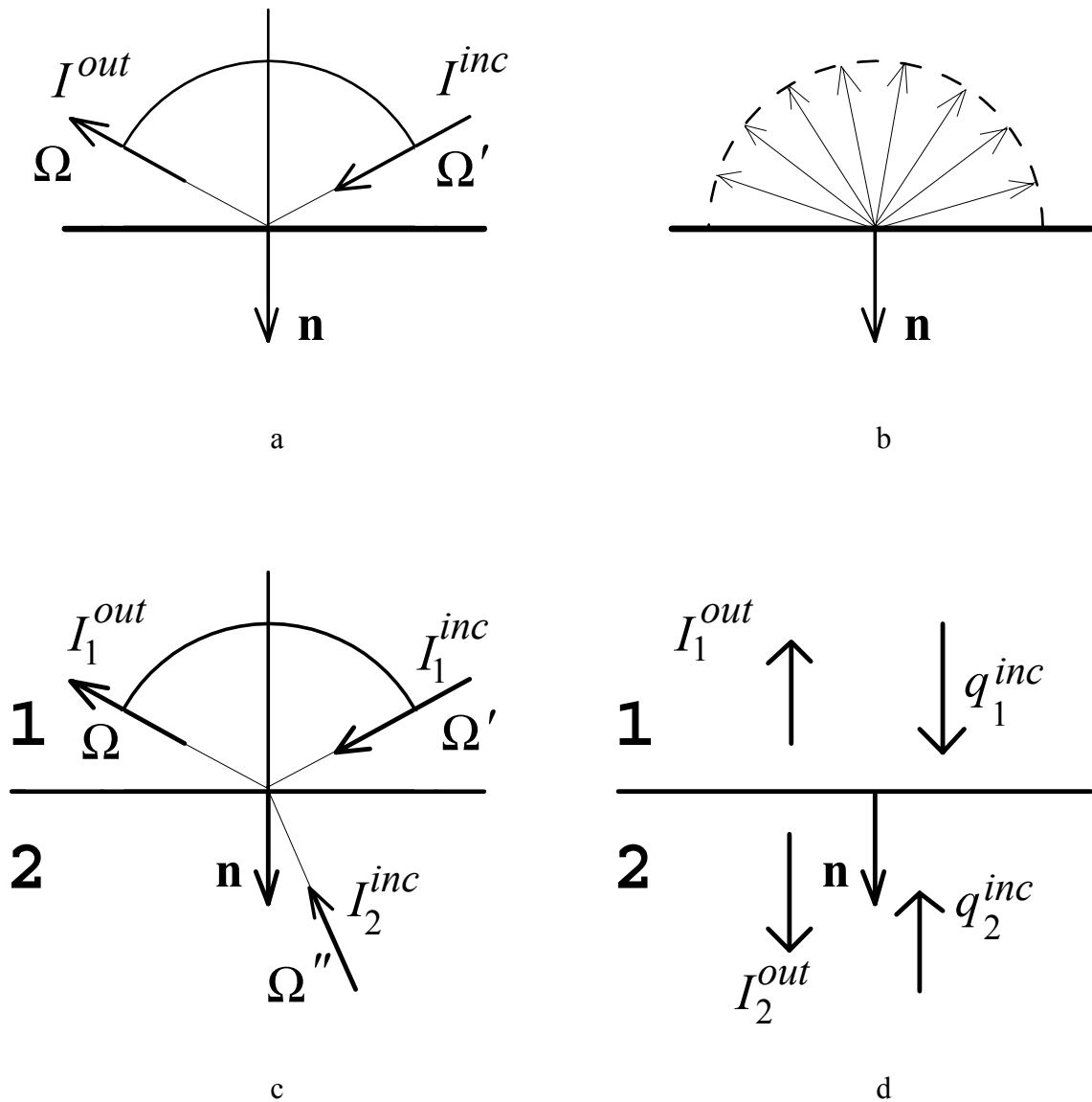


Рис. 2.1. К постановке краевых условий для уравнения переноса

2.1.1.2. Краевые условия на прозрачных границах. На границе двух прозрачных сред с различными показателями преломления n_1 , n_2 часть падающего радиационного потока претерпевает отражение, а оставшаяся часть проходит в соседнюю область. При этом собственное излучение границы отсутствует. В результате, исходящее с такой границы излучение есть сумма отраженного излучения и излучения прошедшего сквозь границу с противоположной стороны.

Зеркальная (френелевская) граница. На прозрачной зеркальной границе соотношение между интенсивностями падающего и уходящего излучения (рис. 2.1с) определяется формулами [23]

$$I_1^{out}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = \rho_{s,n}(\alpha) I_1^{inc}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}') + (1 - \rho_{s,n}(\alpha)) n^2 I_2^{inc}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}''), \quad \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n} < 0, \quad (2.10a)$$

$$I_2^{out}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = \rho_{s,1/n}(\alpha) I_2^{inc}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}') + (1 - \rho_{s,1/n}(\alpha)) n^{-2} I_1^{inc}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}''), \quad \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n} > 0. \quad (2.10b)$$

Здесь $\mathbf{n}$ – нормаль к граничной поверхности в точке $\mathbf{r}$, направленная из среды 1 в среду 2; $n = n_1 / n_2$ – относительный показатель преломления среды 1; $\mathbf{\Omega}'$ ($\mathbf{\Omega}''$) – направление луча, падающего на границу в точке $\mathbf{r}$ и зеркально отраженного (преломленного) в направлении $\mathbf{\Omega}$. Направление $\mathbf{\Omega}$ связано с $\mathbf{\Omega}'$ законом зеркального отражения $\mathbf{\Omega}' = \mathbf{\Omega} - 2(\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}$, а с направлением $\mathbf{\Omega}''$ законом Снеллиуса $\mathbf{n} \times (n_1 \mathbf{\Omega} - n_2 \mathbf{\Omega}'') = 0$. Зависимость коэффициента зеркального отражения $\rho_{s,n}$ для неполяризованного излучения от угла $\alpha = \arccos(|\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n}|)$ определяется формулой Френеля [1]

$$\rho_{s,n}(\alpha) = \begin{cases} \frac{1}{2} \left[\left(\frac{n \cos \alpha - \delta}{n \cos \alpha + \delta} \right)^2 + \left(\frac{n \delta - \cos \alpha}{n \delta + \cos \alpha} \right)^2 \right], & \delta = \sqrt{1 - (n \sin \alpha)^2}, \quad \alpha < \alpha_c, \\ 1, & \alpha \geq \alpha_c, \end{cases} \quad (2.11)$$

где α_c – критический угол полного внутреннего отражения:

$$\alpha_c = \begin{cases} \pi / 2, & n \leq 1, \\ \arcsin(1 / n), & n > 1. \end{cases} \quad (2.12)$$

В качестве примера на рис. 2.2 приведена зависимость $\rho_{s,n}$ от угла α для $n = 2$ и $n = 0.5$.

Диффузная граница. На диффузной границе отраженное и прошедшее излучение равномерно рассеиваются по полупространству. В результате получаем (рис. 2.1d):

$$I_1^{out}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = \rho_{d1} \frac{q_1^{inc}(\mathbf{r})}{\pi} + (1 - \rho_{d2}) \frac{q_2^{inc}(\mathbf{r})}{\pi}, \quad \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n} < 0, \quad (2.13a)$$

$$I_2^{out}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = \rho_{d2} \frac{q_2^{inc}(\mathbf{r})}{\pi} + (1 - \rho_{d1}) \frac{q_1^{inc}(\mathbf{r})}{\pi}, \quad \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n} > 0, \quad (2.13b)$$

где $q_1^{inc}(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{n} > 0} |\mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{n}| I(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}') d\mathbf{\Omega}'$ и $q_2^{inc}(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{n} < 0} |\mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{n}| I(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}') d\mathbf{\Omega}'$ – это плотности потоков падающего излучения, а ρ_{d1} и ρ_{d2} коэффициенты диффузного отражения для излучения, падающего на границу со стороны среды 1 и 2, соответственно.

При этом, исходя из законов термодинамики, коэффициенты ρ_{d1} и ρ_{d2} связаны между собой соотношением:

$$(1 - \rho_{d1}) n_1^2 = (1 - \rho_{d2}) n_2^2. \quad (2.14)$$

Важно отметить, что обычно в качестве величины коэффициента диффузного отражения ρ_{d1} для излучения, падающего из среды с показателем преломления n_1 , на границу с более оптически плотной средой с показателем преломления $n_2 > n_1$,

используется спектральная полусферическая отражательная способность* идеальной поверхности диэлектрика, которая зависит от относительной оптической плотности двух сред $n = n_2 / n_1$ следующим образом [1]:

$$\begin{aligned} \rho(n) = & \frac{1}{2} + \frac{(n-1)(3n+1)}{6(n+1)^2} - \frac{2n^3(n^2+2n-1)}{(n^2+1)(n^4-1)} + \\ & + \frac{8n^4(n^4+1)}{(n^2+1)(n^4-1)^2} \ln(n) + \frac{n^2(n^2-1)^2}{(n^2+1)^3} \ln \frac{n-1}{n+1}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

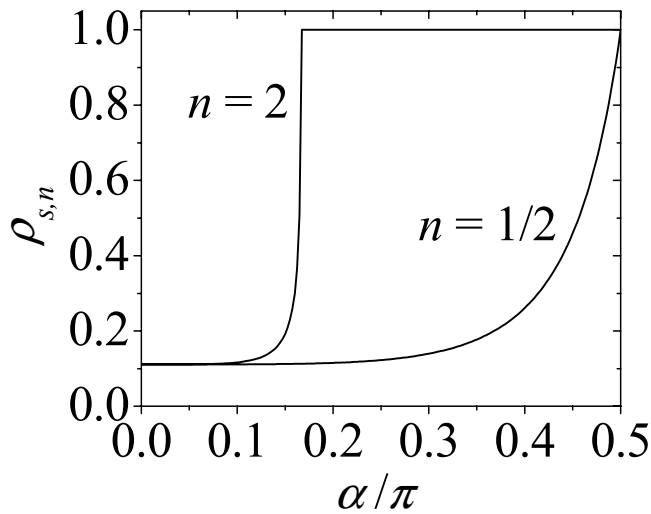


Рис. 2.2. Зависимость френелевского коэффициента зеркального отражения от угла падения для показателей преломления $n = 2$ и $1/2$.

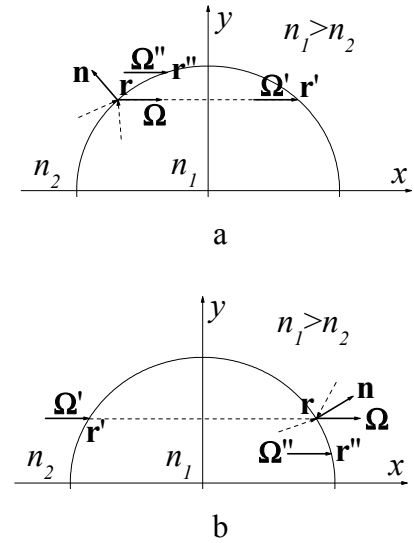


Рис. 2.3. Иллюстрация краевых условий (2.21) для вертикальной зеркальной границы

2.1.2. Задача переноса излучения в осесимметричном случае

Рассмотрение радиационного теплопереноса в осесимметричном приближении имеет очень важное практическое значение, так как большинство прикладных задач решаются именно в такой постановке (в первую очередь потому, что моделирование реальных ростовых процессов в чисто трехмерном приближении на сегодняшний день, в подавляющем большинстве случаев, требует неприемлемо высоких затрат вычислительных ресурсов).

Уравнение переноса. В цилиндрических координатах интенсивность излучения $I(\mathbf{r}, \Omega)$ можно записать как $I(\mathbf{r}, \theta, \varphi_\Omega)$ – интенсивность излучения в точке

* Полусферическая отражательная способность равна доле отраженного излучения по отношению к падающему. Причем предполагается, что падающее излучение неполяризовано и его интенсивность не зависит от направления.

$\mathbf{r} = (x, y, z) = (r \cos \varphi, r \sin \varphi, z)$ в направлении $\mathbf{\Omega} = (\Omega_x, \Omega_y, \Omega_z) = (\sin \theta \cos \varphi_\Omega, \sin \theta \sin \varphi_\Omega, \cos \theta)$, $\theta \in [0, \pi]$, $\varphi_\Omega \in [0, 2\pi)$. При наличии осевой симметрии (вокруг оси z) интенсивность I зависит лишь от переменных r, z, θ и $\phi = |\varphi - \varphi_\Omega|$, где r, φ, z - цилиндрические координаты точки $\mathbf{r}$. В этом случае, достаточно искать интенсивность I в точках $(\mathbf{r}, \theta, \varphi_\Omega = 0) = (r \cos \varphi, r \sin \varphi, z, \theta, \varphi_\Omega = 0)$, $\varphi \in [0, \pi]$ (углы $\varphi \in (\pi, 2\pi)$ исключены из соображений симметрии), то есть, решать уравнение (2.2) в половине ($y > 0$) исходной трехмерной цилиндрической области, и лишь для направлений $\mathbf{\Omega} = (\sin \theta, 0, \cos \theta)$. При этом необходимо с помощью условия симметрии привести интеграл рассеяния $S(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = (4\pi)^{-1} \int_{4\pi} I(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}') d\mathbf{\Omega}'$ к интегралу от функции $I(\mathbf{r}, \theta, 0)$.

Таким образом, полагая в уравнении переноса $\varphi_\Omega = 0$, получаем

$$\mathbf{\Omega} \cdot \nabla I + \beta I \equiv \Omega_x \frac{\partial I}{\partial x} + \Omega_z \frac{\partial I}{\partial z} + \beta I \equiv \sin \theta \frac{\partial I}{\partial x} + \cos \theta \frac{\partial I}{\partial z} + \beta I = \sigma_s S + \kappa I_b, \quad (2.16)$$

где $I = I(\mathbf{r}, \theta)$, $\mathbf{\Omega} = (\sin \theta, 0, \cos \theta)$, $S(\mathbf{r}, \theta) = (2\pi)^{-1} \int_0^\pi \int_0^\pi I(\mathbf{r}', \theta') \sin \theta' d\theta' d\varphi'$, $\mathbf{r}' = (r \cos \varphi', r \sin \varphi', z)$. Уравнение (2.16) решается в области $D = D_{xyz} \times [0, \pi]$ пространства (x, y, z, θ) , где $D_{xyz} = \{(x, y, z) : (r, z) \in D_{rz}, y > 0\} = \{\mathbf{r} : (r, z) \in D_{rz}, \varphi \in [0, \pi]\}$, D_{rz} - сечение исходной трехмерной (осесимметричной) области в координатах r, z .

Отметим, что уравнение (2.16) записано в декартовых координатах, в то время как при обычном рассмотрении осесимметричной задачи уравнение переноса записывается в цилиндрических координатах. Последнее можно интерпретировать таким образом, что интенсивность I из соображений симметрии ищется, лишь в точках пространства $(r, \varphi = 0, z)$, но уже для всех направлений $\mathbf{\Omega}$. Принимая r, φ, z за цилиндрические координаты, и переходя обратно к декартовым координатам, получаем уравнение (2.16). Следует также упомянуть, что в работах [52] и [53] такой переход был фактически проделан, однако уравнение и краевые условия получены не были.

Краевые условия. Краевые условия для уравнения (2.16) выводятся из таковых для уравнения (2.2) с учетом того, что задача обладает цилиндрической симметрией.

Тогда в точке $\mathbf{r}$ непрозрачной диффузной границы краевое условие для уравнения (2.16) принимает вид

$$I(\mathbf{r}, \theta) = \rho_d \frac{q^{inc}(r, z)}{\pi} + (1 - \rho_d) I_{b,s}, \quad \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n} < 0, \quad (2.17)$$

где $\mathbf{\Omega} = (\sin \theta, 0, \cos \theta)$, а

$$q^{inc}(r, z) = 2 \int_{\mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{n}' > 0} |\mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{n}'| I(\mathbf{r}', \theta') \sin \theta' d\theta' d\varphi' \quad (2.18)$$

- радиационный тепловой поток, падающий на границу. Здесь интегрирование осуществляется по области $\{(\theta', \varphi') \in (0, \pi) \times (0, \pi) : \mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{n}' > 0\}$, где $\mathbf{\Omega}' = (\sin \theta', 0, \cos \theta')$, $\mathbf{n} = (\sin \theta_n \cos \varphi, \sin \theta_n \sin \varphi, \cos \theta_n)$ и $\mathbf{n}' = (\sin \theta_n \cos \varphi', \sin \theta_n \sin \varphi', \cos \theta_n)$ - внешние нормали к граничной поверхности в точках $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}'$, соответственно, $\mathbf{r} = (r \cos \varphi, r \sin \varphi, z)$, $\mathbf{r}' = (r \cos \varphi', r \sin \varphi', z)$. Следует отметить, что угол φ в уравнениях (2.16) и (2.17) определяет местоположение точки $\mathbf{r}$, в то время как в уравнении (2.2) этот угол задает направление $\mathbf{\Omega}$.

Аналогичным образом краевые условия (2.13) на прозрачной диффузной границе в осесимметричном случае приводятся к виду:

$$I_1^{out}(\mathbf{r}, \theta) = \rho_{d1} \frac{q_1^{inc}(r, z)}{\pi} + (1 - \rho_{d2}) \frac{q_2^{inc}(r, z)}{\pi}, \quad \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n} < 0, \quad (2.19a)$$

$$I_2^{out}(\mathbf{r}, \theta) = \rho_{d2} \frac{q_2^{inc}(r, z)}{\pi} + (1 - \rho_{d1}) \frac{q_1^{inc}(r, z)}{\pi}, \quad \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n} > 0, \quad (2.19b)$$

где $\mathbf{n}$ - нормаль к граничной поверхности в точке $\mathbf{r}$, направленная из среды 1 в среду 2, а падающие потоки q_1^{inc} и q_2^{inc} выражаются через следующие интегралы:

$$q_1^{inc}(r, z) = 2 \int_{\mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{n}' > 0} |\mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{n}'| I(\mathbf{r}', \theta') \sin \theta' d\theta' d\varphi', \quad (2.20a)$$

$$q_2^{inc}(r, z) = 2 \int_{\mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{n}' < 0} |\mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{n}'| I(\mathbf{r}', \theta') \sin \theta' d\theta' d\varphi'. \quad (2.20b)$$

Рассмотрим теперь, как преобразуются в осесимметричном случае краевые условия (2.8) и (2.10), соответствующие зеркальным границам, в осесимметричном случае.

Представим интенсивность $I(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$ в виде $I(\mathbf{r}, \theta', \varphi'_\Omega)$. При наличии осевой симметрии $I(\mathbf{r}, \theta', \varphi'_\Omega) = I(\mathbf{r}', \theta', 0)$, где $\mathbf{r} = (r \cos \varphi, r \sin \varphi, z)$, $\mathbf{r}' = (r \cos \varphi', r \sin \varphi', z)$, а $\varphi' = |\varphi' - \varphi'_\Omega|$. Аналогично, для интенсивности $I(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}'')$ получим, что $I(\mathbf{r}, \theta'', \varphi''_\Omega) = I(\mathbf{r}'', \theta'', 0)$, где $\mathbf{r}'' = (r \cos \varphi'', r \sin \varphi'', z)$, а $\varphi'' = |\varphi - \varphi''_\Omega|$.

Таким образом, на прозрачной зеркальной границе краевые условия для уравнения (2.16) принимают вид

$$I^{out}(\mathbf{r}, \theta) = \rho_{s,n}(\alpha) I^{inc}(\mathbf{r}', \theta') + (1 - \rho_{s,n}(\alpha)) n^2 I^{inc}(\mathbf{r}'', \theta''), \quad \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n} < 0, \quad (2.21a)$$

$$I^{out}(\mathbf{r}, \theta) = \rho_{s,1/n}(\alpha) I^{inc}(\mathbf{r}', \theta') + (1 - \rho_{s,1/n}(\alpha)) n^{-2} I^{inc}(\mathbf{r}'', \theta''), \quad \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n} > 0, \quad (2.21b)$$

где полярный угол θ' определяет направление $\mathbf{\Omega}' = (\sin \theta', 0, \cos \theta')$ луча, падающего на границу в точке $\mathbf{r}'$ и «зеркально отражающегося» в точке $\mathbf{r}$ в направлении $\mathbf{\Omega}$. В свою

очередь, полярный угол θ'' определяет направление $\mathbf{\Omega}'' = (\sin \theta'', 0, \cos \theta'')$ луча, падающего на границу в точке $\mathbf{r}''$ и «преломляющегося» в точке $\mathbf{r}$ в направлении $\mathbf{\Omega}$. Точка $\mathbf{r}'$ и угол θ' связаны с точкой $\mathbf{r}$ и углом θ следующими соотношениями: $\varphi' = |\varphi - \varphi'_\Omega|$, $\tilde{\mathbf{\Omega}}' \equiv (\sin \theta' \cos \varphi'_\Omega, \sin \theta' \sin \varphi'_\Omega, \cos \theta') = \mathbf{\Omega} - 2(\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}$. Аналогично, точка $\mathbf{r}''$ и угол θ'' связаны с $\mathbf{r}$ и θ соотношениями: $\varphi'' = |\varphi - \varphi''_\Omega|$, $\tilde{\mathbf{\Omega}}'' \equiv (\sin \theta'' \cos \varphi''_\Omega, \sin \theta'' \sin \varphi''_\Omega, \cos \theta'')$, $\mathbf{n} \times (n_1 \mathbf{\Omega} - n_2 \mathbf{\Omega}'') = 0$. В некоторых случаях соотношения упрощаются. Например, если граница в точке $\mathbf{r}$ вертикальна, т.е., $\theta_n = \pi/2$, тогда $\mathbf{r}' = (-r \cos \varphi, r \sin \varphi, z)$, т.е., $\varphi' = \pi - \varphi$, и $\theta' = \theta$. Если граница горизонтальна, то есть, $\theta_n = 0$ или π , тогда $\mathbf{r}' = \mathbf{r}$ и $\theta' = \pi - \theta$. Иллюстрация краевых условий (2.21) для вертикальной границы дана на рис. 2.3.

Сходным образом со случаем прозрачной зеркальной границы выводится краевое условие на непрозрачной зеркальной границе. И для уравнения радиационного переноса (2.16) в осесимметричном приближении оно имеет вид:

$$I(\mathbf{r}, \theta) = \rho_s I(\mathbf{r}', \theta') + (1 - \rho_s) I_{b,s}, \quad \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n} < 0. \quad (2.22)$$

*Замечание. Строго говоря, при решении задач радиационного теплопереноса в областях с френелевскими границами следует учитывать поляризацию излучения при отражении и преломлении и, как следствие, рассматривать интенсивность излучения не как скаляр, а как вектор $\mathbf{s}$, как минимум, двумя компонентами. Заметим, что это не внесет **принципиального** усложнения в процесс решения. Однако можно ожидать, что в большинстве случаев эффект поляризации излучения не играет существенной роли. Действительно, с одной стороны, при полном внутреннем отражении поляризации не происходит. С другой стороны, влияние поляризации проявится только после второго зеркального отражения, но в этом случае исходное радиационное излучение будет уже достаточно слабым [1].*

2.2. Метод дискретного переноса (discrete transfer method)

Решение уравнения радиационного переноса в многомерных областях сложной формы, заполненных поглощающей и излучающей средой, до сих пор остается весьма сложной задачей. Поэтому при решении этого уравнения применительно к моделированию теплообмена при выращивании оксидных кристаллов обычно использовались различного рода допущения и приближения (см. главу 1 «**Основные проблемы виртуального выращивания оксидных кристаллов из расплава**»).

Дополнительные проблемы создает специфика прохождения излучения через прозрачную границу кристалл-газ, поскольку в зависимости от условий выращивания боковая поверхность оксидных кристаллов может быть как диффузно, так и зеркально отражающей. Расчет радиационного переноса в областях с зеркальными границами, разделяющими среды с разной оптической плотностью, является существенно более сложным делом. Именно поэтому подобные задачи до последнего времени практически не рассматривались. Впервые моделирование переноса излучения в оксидных кристаллах, боковая поверхность которых является прозрачной и зеркальной, было выполнено в работе [46]. Использован метод характеристик, который был специально приспособлен для решения подобных задач в осесимметричной геометрии [20].

Это позволило обнаружить новый эффект, связанный с влиянием переноса излучения на форму фронта кристаллизации. Тем не менее, оказалось, что метод характеристик обладает, по крайней мере, двумя существенными недостатками, которые препятствуют его использованию для моделирования процессов теплообмена при выращивании оксидных кристаллов. Это, во-первых, очень большая численная диффузия, которая приводит к пространственному размазыванию плотности потоков излучения, а, во-вторых, большой объем требуемой памяти.

Поэтому в настоящей работе для решения задач радиационного теплопереноса в областях нерегулярной формы с френелевскими и диффузно-отражающими границами был развит метод, который является комбинацией метода дискретных ординат и метода трассировки лучей ("ray tracing") и который можно рассматривать как вариант метода дискретного переноса (discrete transfer method). Этот метод требует умеренных вычислительных затрат как по времени так и по памяти и практически не страдает численной диффузией. Предлагаемый метод корректно работает и с диффузными, и с зеркальными границами (причем как с непрозрачными, так и с прозрачными), способен учитывать рассеяние (в изотропном приближении), поглощение и испускание излучения веществом. Метод был реализован в двух вариантах для осесимметричного и трехмерного случаев.

2.2.1. Осесимметричный случай

2.2.1.1. Разбиение области. Решение задачи для уравнения (2.16) с краевыми условиями (2.17), (2.19), (2.21) или (2.22) ищется в области $D = D_{xyz} \times [0, \pi]$ пространства x, y, z, θ (см. раздел 2.1.2). Угол θ входит в уравнение и краевые условия как параметр и переменная интегрирования, поэтому сначала выбирается дискретное множество углов $\theta_j \in (0, \pi)$, $j = 1, \dots, N_\theta$, которые определяют направления $\Omega_j = (\sin \theta_j, 0, \cos \theta_j)$. Затем

область D_{xyz} разбивается на трехмерные ячейки (для разных направлений разбиения, вообще говоря, различны). Такое разбиение удобно описать в пространстве (r, z, φ) , где область D_{xyz} имеет вид $D_{rz} \times [0, \pi]$. Разбиение основано на 2D-разбиении общего вида области D_{rz} полигональной сеткой (это разбиение одинаково для всех направлений). Пример такого разбиения дан на рис. 2.4, где использована треугольная сетка. В пространстве (r, z, φ) ячейки имеют вид $V_n = t_{rz} \times (\varphi_{i-1,j}, \varphi_{i,j}) = \{ \mathbf{r} : (r, z) \in t_m, \varphi \in (\varphi_{i-1,j}, \varphi_{i,j}) \}$, где t_{rz} – полигональная ячейка 2D-разбиения, $\varphi_{i,j} = \pi i / N_{\varphi,j}$, $i = 1, \dots, N_{\varphi,j}$ ($N_{\varphi,j}$, вообще говоря, зависит от направления). Таким образом, в пространстве (x, y, z) трехмерные ячейки ограничены коническими и цилиндрическими поверхностями, соответствующими сторонам многоугольников t_{rz} , и плоскими поверхностями $\varphi = \varphi_{i,j}$. Сечение типичного разбиения в плоскости (x, y) показано на рис. 2.5, а типичная ячейка, полученная вращением треугольника, – на рис. 2.6.

В проводившихся расчетах значения углов θ_j задавались как $\theta_j = \arccos((\cos \theta_{j-1}^* + \cos \theta_j^*)/2)$, $\theta_j^* = \pi j / N_\theta$, $j = 1, \dots, N_\theta$, N_θ – четное. Значения $\cos \theta_j$ играют роль узловых точек на интервале $(-1; 1)$; соответствующие квадратурные веса $w_j = \cos \theta_{j-1}^* - \cos \theta_j^*$, при этом $\sum_{j=1}^{N_\theta} w_j = 2$. Значения $N_{\varphi,j}$ определяются как $N_{\varphi,j} = 2j$, $j \leq N_\theta / 2$, и $N_{\varphi,j} = 2(N_\theta - j + 1)$, $N_\theta / 2 < j$. Такой выбор $N_{\varphi,j}$ аналогичен S_N угловой аппроксимации в методе дискретных ординат, где $N = N_\theta$.

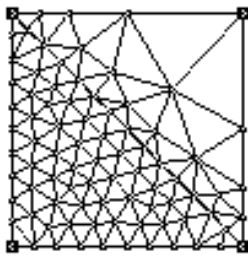


Рис. 2.4. Пример триангуляции в координатах r, z .

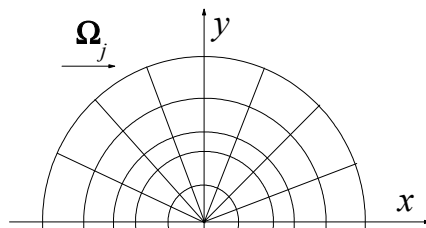


Рис. 2.5. Сечение разбиения в плоскости x, y .

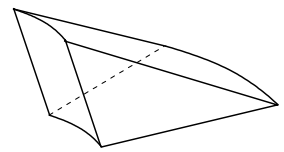


Рис. 2.6. Типичная ячейка.

2.2.1.2. Дискретизация уравнения переноса. В предлагаемом методе учет рассеяния производится итерационно. При этом раз за разом решается задача радиационного теплопереноса во всей расчетной области и на каждой итерации в правую часть уравнение переноса (2.16) подставляется интеграл рассеяния

$$S(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = (4\pi)^{-1} \int_{4\pi} I(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}') d\mathbf{\Omega}',$$

вычисленный по интенсивностям излучения I на

предыдущем шаге. Таким образом, общее решение сводится к решению ряда задач без рассеяния и уравнение переноса (2.16) может быть представлено в следующей форме

$$\sin \theta \frac{\partial I}{\partial x} + \cos \theta \frac{\partial I}{\partial z} + \beta I = F, \quad F \equiv \sigma_s S + \kappa I_b, \quad (2.16')$$

где правая часть уравнения F полагается известной.

Характеристики уравнения радиационного переноса – это лучи, вдоль которых распространяется излучение. Они представляют собой прямые линии

$$\begin{aligned} y &= y_0 \\ z - z_0 &= \operatorname{ctg} \theta \cdot (x - x_0) \end{aligned} \quad (2.23)$$

Вдоль характеристики уравнение переноса имеет следующий простой вид (см. рис. 2.7):

$$\frac{dI}{ds} + \beta I = F, \quad (2.24)$$

где s – координата на характеристике (длина вдоль нее).

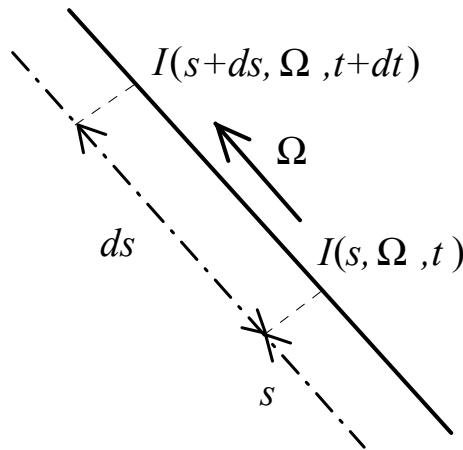


Рис. 2.7. Иллюстрация к уравнению (2.25). Сплошная линия – характеристика уравнения переноса излучения (луч)

В предлагаемом методе интенсивность излучения задается постоянными значениями только на тех гранях ячеек, которые лежат на внешних границах или границах раздела сред. При этом для дискретизации задачи уравнение переноса в виде (2.24) интегрируется вдоль характеристик, параллельных дискретным направлениям Ω_j , внутри каждой подобласти, ограниченной внешними границами или границами раздела сред. Таким образом, интенсивности излучения на границах связываются друг с другом. Например, для того, чтобы выразить интенсивность излучения I_{kj}^{inc} , падающего на принадлежащую границе грань k с направления Ω_j , из середины этой грани $\mathbf{r}_k$ испускается луч (характеристика) в направлении, **обратном** Ω_j . Этот луч ведется (трассируется) до тех

пор, пока он не достигнет какой-либо из границ (внешней или внутренней). Пусть l - это номер грани, которой принадлежит эта точка пересечения $\mathbf{r}'_l$. Тогда проинтегрировав уравнение (2.24) вдоль луча (характеристики) от грани l до грани k (напомним, что F кусочно-постоянна) получим соотношение между интенсивностями на границах:

$$I_{kj}^{inc} = e^{-\tau_0} I_{l_{kj}}^{out} + \int_0^{s_0} F(\mathbf{r}_k - s \boldsymbol{\Omega}_j) e^{-\tau} ds \equiv c_{kj} I_{l_{kj}}^{out} + f_{kj}. \quad (2.25)$$

Здесь $\tau \equiv \tau(\mathbf{r}_k - s \boldsymbol{\Omega}_j, \mathbf{r}_k) = \int_0^s \beta(\mathbf{r}_k - s' \boldsymbol{\Omega}_j) ds'$ - это оптическое расстояние от точки $\mathbf{r}_k - s \boldsymbol{\Omega}_j$ до точки $\mathbf{r}_k$, $\tau_0 = \tau(\mathbf{r}_k - s_0 \boldsymbol{\Omega}_j, \mathbf{r}_k) \equiv \tau(\mathbf{r}'_l, \mathbf{r}_k)$, $s_0 = |\mathbf{r}_k - \mathbf{r}'_l|$, а обозначение l_{kj} используется для того, чтобы дополнительно подчеркнуть зависимость l от k и j . Поскольку в рассматриваемом случае β и F это кусочно-постоянные функции, значения c_{kj} и f_{kj} могут быть легко вычислены. Заметим, что c_{kj} и f_{kj} зависят от величины коэффициента ослабления β в тех ячейках, через которые прошел луч, а f_{kj} зависит еще и от величины F в этих ячейках.

Замечание. Отметим, что в осесимметричном случае индекс каждой грани (k или l) можно представить как пару чисел s, i , где s - индекс соответствующего ребра 2D-разбиения в плоскости r, z , а i - номер сектора при разбиении по углу φ , $1 \leq i \leq N_{\varphi, j}$ (см. раздел 2.2.1.1).

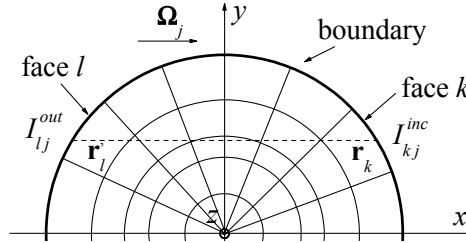


Рис. 2.8. К выводу уравнения (2.25), вид сверху (с оси симметрии z).

Замечание. Необходимо отметить, что при большом количестве рассматриваемых лучей, их трассировка может занимать существенную долю в общем времени расчета. И в этом случае очень важно использовать быстрые алгоритмы, построение которых в осесимметричном случае оказывается более сложным, чем в трехмерном. Пример такого быстрого алгоритма приведен в Приложении А. Эффективный алгоритм трассировки луча в осесимметричном случае.

Дополнительные соотношения для системы уравнений (2.25) дают «дискретизованные» краевые условия.

2.2.1.3. Дискретизация граничных условий. На непрозрачной диффузной границе «дискретизованное» краевое условие имеет вид

$$I_{kj}^{out} = \rho_d \frac{q^{inc}}{p} + (1 - \rho_d) I_{b,s}, \quad \mathbf{\Omega}_j \cdot \mathbf{n}_k < 0, \quad (2.26)$$

где

$$q^{inc} = \sum_{i=1}^{N_\theta} w_i \sum_{l \in \Gamma_k, \mathbf{\Omega}_i \cdot \mathbf{n}_l > 0} |\mathbf{\Omega}_i \cdot \mathbf{n}_l| S_l I_{li}^{inc}, \quad (2.27a)$$

$$p = \sum_{i=1}^{N_\theta} w_i \sum_{l \in \Gamma_k, \mathbf{\Omega}_i \cdot \mathbf{n}_l > 0} |\mathbf{\Omega}_i \cdot \mathbf{n}_l| S_l, \quad (2.27b)$$

Γ_k – множество граней, которые можно совместить с гранью k вращением вокруг оси симметрии z , $\mathbf{n}_l$ – «усредненная» внешняя нормаль к грани l , а S_l – площадь этой грани.

Сходным образом дискретизовав краевые условия на прозрачной диффузной границе, получаем соотношения:

$$I_{kj}^{out} = \rho_{d1} \frac{q_1^{inc}}{p_1} + (1 - \rho_{d2}) \frac{q_2^{inc}}{p_2}, \quad \mathbf{\Omega}_j \cdot \mathbf{n}_k < 0, \quad (2.28a)$$

$$I_{kj}^{out} = \rho_{d2} \frac{q_2^{inc}}{p_2} + (1 - \rho_{d1}) \frac{q_1^{inc}}{p_1}, \quad \mathbf{\Omega}_j \cdot \mathbf{n}_k > 0, \quad (2.28b)$$

где

$$q_1^{inc} = \sum_{i=1}^{N_\theta} w_i \sum_{l \in \Gamma_k, \mathbf{\Omega}_i \cdot \mathbf{n}_l > 0} |\mathbf{\Omega}_i \cdot \mathbf{n}_l| S_l I_{li}^{inc}, \quad (2.29a)$$

$$p_1 = \sum_{i=1}^{N_\theta} w_i \sum_{l \in \Gamma_k, \mathbf{\Omega}_i \cdot \mathbf{n}_l > 0} |\mathbf{\Omega}_i \cdot \mathbf{n}_l| S_l, \quad (2.29b)$$

$$q_2^{inc} = \sum_{i=1}^{N_\theta} w_i \sum_{l \in \Gamma_k, \mathbf{\Omega}_i \cdot \mathbf{n}_l < 0} |\mathbf{\Omega}_i \cdot \mathbf{n}_l| S_l I_{li}^{inc}, \quad (2.29c)$$

$$p_2 = \sum_{i=1}^{N_\theta} w_i \sum_{l \in \Gamma_k, \mathbf{\Omega}_i \cdot \mathbf{n}_l < 0} |\mathbf{\Omega}_i \cdot \mathbf{n}_l| S_l. \quad (2.29d)$$

Построение «дискретизованных» краевых условий на прозрачных и непрозрачных зеркальных границах встречается с определенными затруднениями. Действительно, ведь если угол θ в формуле (2.18) и принадлежит выбранному дискретному набору θ_j , то углы θ' и θ'' , вообще говоря, нет.

В описываемом методе эта проблема была решена следующим образом. Предполагалось, что для каждого дискретного направления $\mathbf{\Omega}_j$ интенсивности на гранях ячеек заданы своими значениями в центрах этих граней, то есть в точках $(\mathbf{r}_k, \theta_j) = (r_k \cos \varphi_k, r_k \sin \varphi_k, z_k, \theta_j)$. Тогда рассматривая дискретный набор направлений $\tilde{\mathbf{\Omega}}_{m,n} = (\sin \theta_n \cos \varphi_m, \sin \theta_n \sin \varphi_m, \cos \theta_n)$ в качестве узлов сетки на единичной сфере, где

каждому направлению $\tilde{\Omega}_{m,n}$ соответствует узловое значение $I(r_k \cos \varphi_m, r_k \sin \varphi_m, z_k, \theta_n)$, значения интенсивностей $I^{inc}(\mathbf{r}'_k, \theta'_j)$ и $I^{inc}(\mathbf{r}''_k, \theta''_j)$ находятся путем кусочно-постоянной интерполяции и экстраполяции на этой сетке. При этом значения $I^{inc}(\mathbf{r}'_k, \theta'_j)$ либо $I^{inc}(\mathbf{r}''_k, \theta''_j)$ вычисляются не по всем узлам, а только по тем, которые удовлетворяют соответствующему условию на знак $\Omega_j \cdot \mathbf{n}_k$. Таким образом, на прозрачной зеркальной границе «дискретизованное» краевое условие принимает следующую форму

$$I_{kj}^{out} = \rho_{s,n}(\alpha) \tilde{I}^{inc}(\mathbf{r}'_k, \theta'_j) + (1 - \rho_{s,n}(\alpha)) n^2 \tilde{I}^{inc}(\mathbf{r}''_k, \theta''_j), \quad \Omega_j \cdot \mathbf{n}_k < 0, \quad (2.30a)$$

$$I_{kj}^{out} = \rho_{s,l/n}(\alpha) \tilde{I}^{inc}(\mathbf{r}'_k, \theta'_j) + (1 - \rho_{s,l/n}(\alpha)) n^{-2} \tilde{I}^{inc}(\mathbf{r}''_k, \theta''_j), \quad \Omega_j \cdot \mathbf{n}_k > 0, \quad (2.30b)$$

где $\alpha = \arccos(|\Omega_j \cdot \mathbf{n}_k|)$, а значения $\tilde{I}^{inc}(\mathbf{r}'_k, \theta'_j)$ и $\tilde{I}^{inc}(\mathbf{r}''_k, \theta''_j)$ найдены либо путем интерполяции, либо с помощью экстраполяции.

Замечание. В работах [54] и [27] вместо кусочно-постоянной интерполяции используется кусочно-квазилинейная, построенная на основе триангуляции на сфере. Однако подобное усложнение выглядит неоправданным, поскольку непрерывная кусочно-квазилинейная интерполяция разрывной функции, каковой, в общем случае, является распределение интенсивности излучения по направлениям, не приводит к увеличению точности вычислений.

Подобные же рассуждения позволяют следующим образом записать «дискретизованные» краевые условия на непрозрачной зеркальной границе:

$$I_{kj}^{out} = \rho_s \tilde{I}^{inc}(\mathbf{r}'_k, \theta'_j) + (1 - \rho_s) I_{b,s}, \quad \Omega_j \cdot \mathbf{n}_k < 0. \quad (2.31)$$

Приведенный выше подход позволяет решать задачи в отсутствии рассеяния. В задачах с рассеянием правая часть F уравнения переноса зависит от неизвестной интенсивности, и решение оказывается неполным. Кроме того, при наличии поглощения (испускания) излучения ($\kappa > 0$) в уравнении теплопроводности появляется дополнительное слагаемое - объемная плотность поглощенной радиации^{*}, которая есть ни что иное, как $-\text{div} \mathbf{q}^r$, где

$$\mathbf{q}^r(\mathbf{r}) = \int_{4\pi} \Omega I(\mathbf{r}, \Omega) d\Omega \quad (2.32)$$

^{*} В таком случае решается совместная задача радиационно-кондуктивного теплообмена. Закон сохранения тепловой энергии при одновременном переносе тепла излучением и теплопроводностью записывается в виде уравнения теплопроводности [Оуисик], которое в осесимметричном случае имеет вид

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(k r \frac{\partial T}{\partial r} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) = Q_C - \text{div} \mathbf{q}^r,$$

где T – температура среды, ρ , c_p и k – плотность, удельная теплоемкость и коэффициент теплопроводности среды, соответственно, а Q_C – мощность внутренних источников тепла. Уравнения переноса и теплопроводности взаимосвязаны: напомним, что интенсивность излучения I в свою очередь зависит от температуры среды (см. раздел 2.1).

– вектор плотности потока теплового излучения.

Оказывается, что эти две задачи (учет рассеяния и поглощения излучения) сводятся к одной, так как интеграл рассеяния можно выразить через $\text{div } \mathbf{q}^r$. Действительно, в случае изотропного рассеяния справедливо следующее выражение для дивергенции радиационного потока [1]:

$$\text{div } \mathbf{q}^r = 4\pi \kappa (I_b - S). \quad (2.33)$$

При наличии осевой симметрии $\text{div } \mathbf{q}^r$ зависит только r, z и имеет вид

$$\text{div } \mathbf{q}^r = 2 \int_0^\pi \int_0^\pi \boldsymbol{\Omega}' \cdot \nabla I(\mathbf{r}', \theta') \sin \theta' d\theta' d\phi', \quad (2.34)$$

где $\boldsymbol{\Omega}' = (\sin \theta', 0, \cos \theta')$, $\mathbf{r}' = (r \cos \phi', r \sin \phi', z)$. Оценим значение $\text{div } \mathbf{q}^r$ внутри полигональной ячейки t_m двумерного разбиения области $D_{r,z}$ в координатах r, z .

Проинтегрировав уравнение (2.33) по области $T_m = \{\mathbf{r} : (r, z) \in t_m, \phi \in (0, \pi)\}$ (это половина тора с сечением t_m , лежащая в области $y > 0$) приходим к соотношению

$$\int_{T_m} \text{div } \mathbf{q}^r d\mathbf{r} = 4\pi \kappa V_{T_m} (\bar{I}_b - \bar{S}), \quad (2.35)$$

где V_{T_m} это объем области T_m , $\bar{I}_b$ и $\bar{S}$ это средние значения I_b и S по объему данной области. Если $\kappa \neq 0$, это соотношение может быть использовано для вычисления $\bar{S}$ и правой части F уравнения радиационного переноса:

$$F = \sigma_s \bar{S} + \kappa \bar{I}_b. \quad (2.36)$$

2.2.1.4. Вычисление $\int_{T_m} \text{div } \mathbf{q}^r d\mathbf{r}$. Заменяя в (2.34) интеграл по θ квадратурной суммой и представив интеграл по T_m в виде суммы интегралов по составляющим эту область ячейкам, получим, что

$$\begin{aligned} \int_{T_m} \text{div } \mathbf{q}^r d\mathbf{r} &= 2\pi \int_0^\pi \int_{T_m} \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla I(\mathbf{r}, \theta) d\mathbf{r} \sin \theta d\theta \approx \\ &\approx 2\pi \sum_{j=1}^{N_\theta} w_j \sum_{V_n \subset T_m} \int_{V_n} \boldsymbol{\Omega}_j \cdot \nabla I(\mathbf{r}, \theta_j) d\mathbf{r} \end{aligned} \quad (2.37)$$

Для приближенного вычисления интеграла

$$\int_{V_n} \boldsymbol{\Omega}_j \cdot \nabla I(\mathbf{r}, \theta_j) d\mathbf{r}, \quad (2.38)$$

входящего в правую часть (2.37), необходимо оценить среднее значение $\boldsymbol{\Omega}_j \cdot \nabla I(\mathbf{r}, \theta_j)$ внутри каждой ячейки V_n . На некотором луче γ , параллельном направлению $\boldsymbol{\Omega}_j$ и пересекающим ячейку V_n , можно положить эту величину равной

$(I(\mathbf{r}_{\gamma_2}, \theta_j) - I(\mathbf{r}_{\gamma_1}, \theta_j)) / |\mathbf{r}_{\gamma_2} - \mathbf{r}_{\gamma_1}|$, где $\mathbf{r}_{\gamma_1}$ и $\mathbf{r}_{\gamma_2}$ – точки, в которых луч γ входит в ячейку V_n и выходит из нее, соответственно. Если сквозь ячейку V_n проходит несколько лучей, то можно оценить $\mathbf{\Omega}_j \cdot \nabla I(\mathbf{r}, \theta_j)$, как среднее по всем таким лучам γ с весами равными $|\mathbf{r}_{\gamma_2} - \mathbf{r}_{\gamma_1}|$. Таким образом,

$$\int_{V_n} \mathbf{\Omega}_j \cdot \nabla I(\mathbf{r}, \theta_j) d\mathbf{r} \approx V_n \sum_{\gamma} (I(\mathbf{r}_{\gamma_2}, \theta_j) - I(\mathbf{r}_{\gamma_1}, \theta_j)) / \sum_{\gamma} |\mathbf{r}_{\gamma_2} - \mathbf{r}_{\gamma_1}|, \quad (2.39)$$

где символом V_n обозначается как сама ячейка, так и ее объем, суммирование ведется по всем тем лучам γ в направлении $\mathbf{\Omega}_j$, которые пересекают ячейку V_n . Формула (2.39) точна, если $\mathbf{\Omega}_j \cdot \nabla I(\mathbf{r}, \theta_j) = \text{const}$.

Если для дискретного направления $\mathbf{\Omega}_j$ ни один из лучей не пересекает ячейку V_n , то значение выражения в правой части уравнения (2.39) не определено. Будем называть эти ячейки «незатронутыми». Значения интегралов (2.38) для «незатронутых» ячеек могут быть вычислены с помощью интерполяции. Если интерполяции не проводить (положив, например, величину интеграла (2.38) для «незатронутых» ячеек V_n равной нулю), то можно получить существенную ошибку при вычислении интеграла (2.38) (см. тестовую задачу 3 из раздела 2.2.1.6). Заметим, что данная ошибка обусловлена тем, что с каждого граничного элемента испускается только один луч γ в заданном дискретном направлении. В принципе, чтобы бороться с этой проблемой, можно было бы испускать с каждого граничного элемента несколько лучей в заданном направлении, но это не слишком удачное решение, поскольку оно не гарантирует отсутствия «незатронутых» ячеек, а вот к существенному замедлению алгоритма, несомненно, приведет.

Можно предложить разные варианты алгоритма интерполяции для приближенного вычисления интеграла (2.38) для «незатронутых» ячеек. В настоящей работе был использован следующий подход, являющийся с одной стороны простым и быстрым, а с другой стороны, достаточно эффективным.

Для заданных значений i и j рассмотрим все ячейки V_n , которые образуют сектор $D_{ij} = \{\mathbf{r} : (r, z) \in D_{rz}, \varphi \in (\varphi_{i-1,j}, \varphi_{i,j})\}$. Введем последовательность множеств U^k , $k = 0, 1, 2, \dots$. U^0 – это множество всех «затронутых» ячеек из сектора D_{ij} (т.е. для каждой из них имеется хотя бы один луч, испущенный в направлении $\mathbf{\Omega}_j$, который их пересекает). Для $k > 0$ U^k – множество всех «незатронутых» ячеек из сектора D_{ij} , которые не принадлежат никакому из множеств U^l , $l < k$, и, кроме того, каждая из них смежна

(имеет общую грань) хотя бы с одной ячейкой из U^{k-1} . Построение множеств U^k проиллюстрировано на рис. 2.9.

Для ячеек V_n множества U^0 введем вспомогательные величины $d_n^0 = \sum_{\gamma} (I(\mathbf{r}_{\gamma 2}, \theta_j) - I(\mathbf{r}_{\gamma 1}, \theta_j))$ и $v_n^0 = \sum_{\gamma} |\mathbf{r}_{\gamma 2} - \mathbf{r}_{\gamma 1}|$. Тогда формула (2.39) для всех $V_n \subset U^0$ примет вид

$$\int_{V_n} \boldsymbol{\Omega}_j \cdot \nabla I(\mathbf{r}, \theta_j) d\mathbf{r} \approx V_n d_n^0 / v_n^0 \quad (2.39')$$

После определения d_n^0 и v_n^0 полагаем $k=1$ и переходим к основному циклу алгоритма интерполяции:

Если множество U^k пусто (не содержит ни одной ячейки), то это означает, что интерполяция проведена по всем ячейкам, то есть окончание алгоритма. В противном случае, вычисляем значения вспомогательных переменных на k -ом шаге по значениям найденным на предыдущем шаге:

$$d_n^k = \sum_{V_m \in Adj(V_n) \cap U^{k-1}} d_m^{k-1} \quad (2.40a)$$

и

$$v_n^k = \sum_{V_m \in Adj(V_n) \cap U^{k-1}} v_m^{k-1} \quad (2.40b)$$

для всех $V_n \subset U^k$, где $Adj(V_n)$ – множество всех ячеек из сектора D_{ij} , смежных с V_n . (отметим, что в заданном секторе каждой ячейке V_n однозначно соответствует t_m – многоугольник из 2D-разбиения области D_{rz} , и, поэтому, множество $Adj(V_n)$ соответствует тем полигонам 2D-разбиения, которые имеют общее ребро с t_m). Далее полагаем, что

$$\int_{V_n} \boldsymbol{\Omega}_j \cdot \nabla I(\mathbf{r}, \theta_j) d\mathbf{r} \approx V_n d_n^k / v_n^k \quad (2.41)$$

для всех $V_n \subset U^k$. Затем счетчик k увеличиваем на единицу и возвращаемся к началу цикла.

Отметим, что, если область D_{xyz} (D_{rz} в координатах r, z) содержит несколько подобластей с различными оптическими свойствами, то целесообразно проводить процедуру интерполяции для каждой подобласти отдельно.

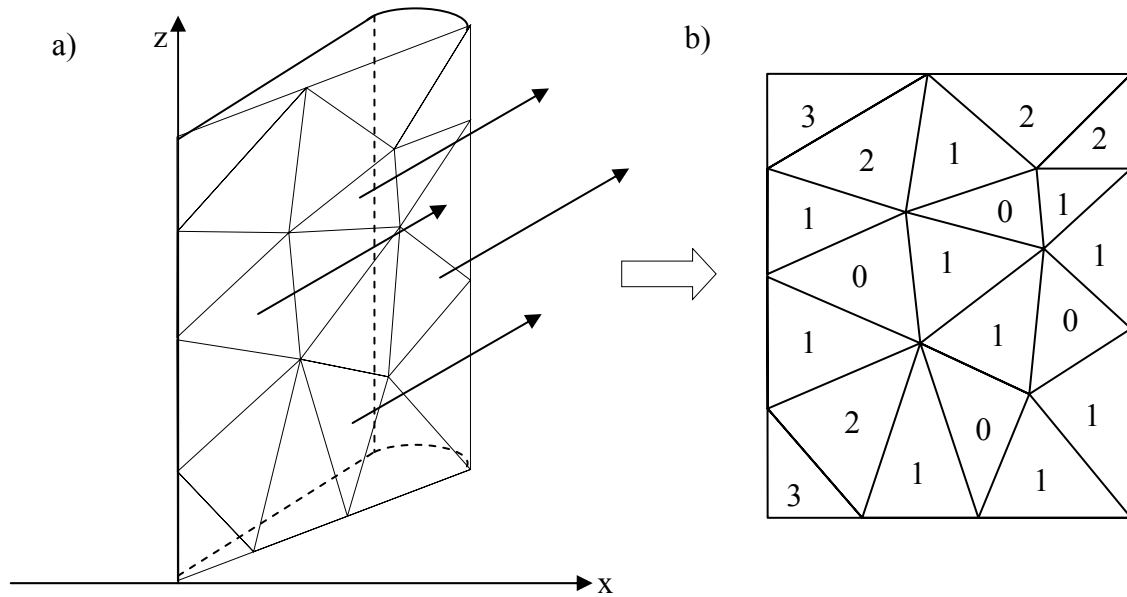


Рис. 2.9. а) Лучи, пересекающие сектор D_{ij} . Имеются «незатронутые» ячейки. б) $0 \sim U^0$, $1 \sim U^1$, $2 \sim U^2$.

2.2.1.5. Итерационная схема решения задачи переноса излучения. В итоге, общий алгоритм решения задач с рассеянием состоит из следующих этапов:

Шаг 1. Для всех полигональных ячеек t_m разбиения в координатах r, z выбираются начальные средние значения интеграла рассеяния $\bar{S}$.

Шаг 2. С помощью формулы (2.36) находятся значения правой части уравнения переноса F .

Шаг 3. Из решения системы уравнений (2.25) и «дискретизованных» краевых условий (2.26), (2.28), (2.30) и (2.31) вычисляются средние значения интенсивностей I_{kj} .

Шаг 4. С помощью соотношения (2.35) заново находятся средние значения интеграла рассеяния $\bar{S}$. Если невязка между новыми значениями $\bar{S}$ и значениями с предыдущей итерации превышает заданный уровень, то работа алгоритма продолжается с Шага 2. В противном случае процесс решения можно считать сошедшимся и вычисления прекращаются.

2.2.1.6. Тестирование метода дискретного переноса

Задача 1. Рассматривается радиационный перенос в конусе, заполненном абсолютно прозрачной средой (т.е., среда не поглощает, не излучает и не рассеивает: $\kappa = 0$, $I_b = 0$ и $\sigma_s = 0$). Среда снаружи конуса, также не поглощает, не излучает и не рассеивает. Радиус основания конуса $R=1$, а его высота $Z=1$. Основание конуса непрозрачное, черное

($\rho_d = 0$) и оно излучает с постоянной интенсивностью $I_{b,s} = 4/\pi$. Боковая поверхность кристалла – прозрачная зеркальная (френелевская) граница; показатель преломления среды внутри конуса $n = 2$, а вне конуса $n = 1$.

Слева на рис. 2.10 представлены распределения суммарного радиационного потока вдоль основания конуса посчитанные методом дискретного переноса, а также точные аналитические решения, посчитанные с помощью метода зеркальных отражений [48]. Видно, что хотя при малых N_θ на решении сказывается лучевой эффект*, однако, с ростом числа направлений различие между численным решением и точным распределением становится малым.

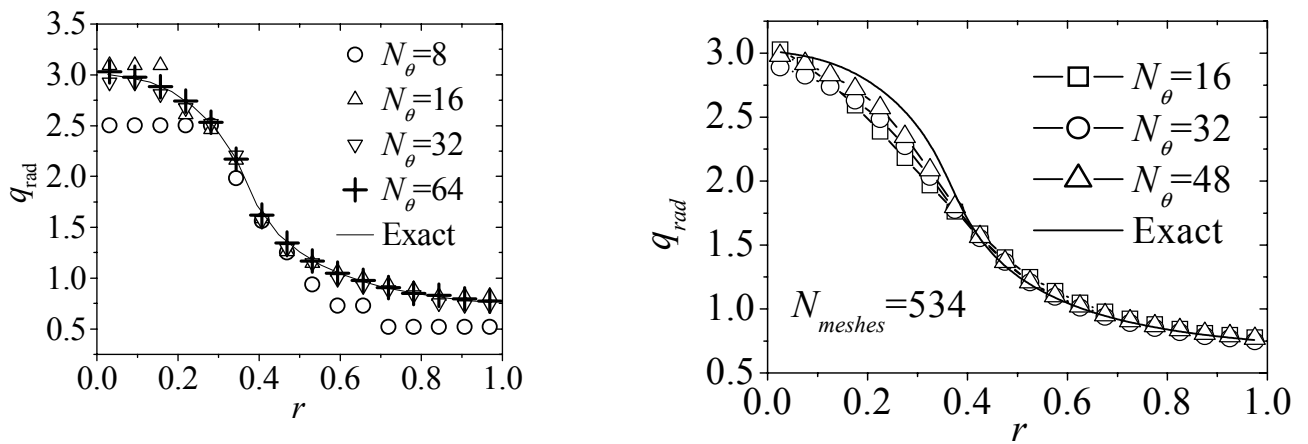


Рис. 2.10. Распределение суммарного радиационного теплового потока на основании конуса для различных N_θ в сравнении с точным решением

Для сравнения, в правой половине рис. 2.10 приведены значения потоков, посчитанные методом характеристик. Метод характеристик (см., например, [27]) – это вариант метода дискретных ординат, в котором уравнение переноса излучения интегрируется внутри каждой ячейки вдоль характеристик параллельных каждому из дискретных направлений Ω_j . При этом, в методе характеристик, в отличие от метода дискретного переноса, интенсивность излучения задается постоянными значениями на всех гранях ячеек, а не только на тех, что принадлежат внешним границам и границам раздела сред. Причем поскольку интегрирование по характеристикам ведется в пределах одной ячейки, то интенсивности на каждой грани напрямую связываются только с интенсивностями смежных с данной гранью ячеек.

* Лучевой эффект (ray effect) – это численный дефект, вызванный тем, что в МДО рассматривается не все непрерывное поле направлений Ω , а только конечный дискретный набор $\{\Omega_j\}$

Метод характеристик был выбран в качестве объекта для сравнения, поскольку до недавнего времени это был единственный метод, который применялся для расчетов переноса тепла излучением с учетом не только диффузных, но и френелевских границ при моделировании роста оксидных кристаллов ([46]).

Можно видеть, что решение, полученное методом характеристик, демонстрирует наличие постоянной систематической погрешности, которая практически не зависит от количества дискретных направлений. Еще более ярко эта особенность проявляет себя в следующем тесте.

Задача 2. Проводится расчет радиационного теплопереноса в цилиндре, заполненном прозрачной средой с показателем преломления $n=2$. Радиус основания цилиндра $R=1$, а его высота H . Основание цилиндра непрозрачное и черное ($\rho_d=0$), оно излучает с постоянной интенсивностью $I_{b,s}=4/\pi$. Боковая поверхность и верхнее основание цилиндра – прозрачные зеркальные (френелевские). Цилиндр окружен прозрачной средой с показателем преломления $n=1$.

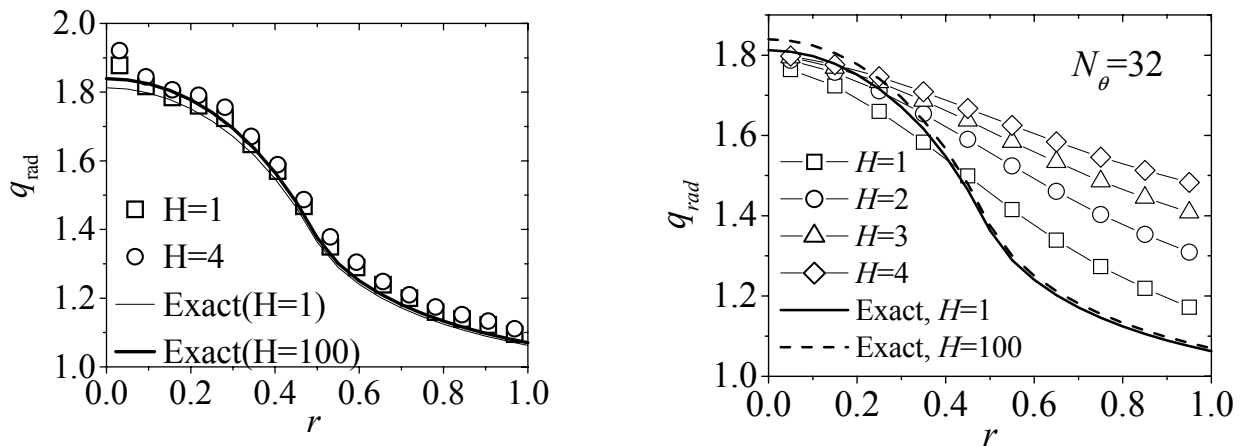


Рис. 2.11. Распределение суммарного радиационного теплового потока на верхнем основании цилиндра: точные распределения для $H=1$ и $H=100$, и значения найденные численно для различных высот цилиндра от $H=1$ до $H=4$, $N_\theta=32$. Слева – значения найденные методом дискретного переноса, справа – методом характеристик

На рис. 2.11 приведены точные распределения суммарных радиационных тепловых потоков на верхнем основании цилиндра для значений высоты $H=1$ и $H=100$ [48]. Видно, что потоки при $H=1$ и $H=100$ практически совпадают. Это говорит о том, что с ростом H распределение потоков стремится к некоторому предельному, которое практически достигается уже при $H=1$. Причиной такого поведения является так называемый “волноводный” эффект, который вызван френелевским отражением внутри

цилиндра. Часть лучей отражается от стенок цилиндра без потерь, поэтому они распространяются не затухая.

Отметим, что численная погрешность решения, полученного методом характеристик, по мере увеличения длины цилиндра весьма существенно нарастает. Данная ошибка проявила себя столь ярко именно в задачах с зеркальными прозрачными границами, из-за сильной неоднородности интенсивности излучения вблизи угла полного внутреннего отражения. Дело в том, что для излучения приходящего на границу из оптически более плотной среды коэффициент отражения $\rho_{s,n}$ сильно зависит от угла падения. Например, на рис. 2.2 показано, что при $n = 2$ коэффициент $\rho_{s,n}$ ведет себя подобно разрывной функции, изменяясь в несколько раз в узком интервале углов вблизи угла полного внутреннего отражения. Это, в определенном смысле, аналогично разрывности краевых условий, которая, как хорошо известно, ведет к возмущению численного решения вследствие численной диффузии*. В то же время, схема метода дискретного переноса практически лишена этого дефекта, и выдает хорошие результаты, которые слабо зависят от высоты цилиндра (рис. 2.11, слева).

Следует сказать, что численная диффузия – это общая «болезнь» всех сеточных численных методов решения уравнения радиационного переноса, в которых интенсивности излучения в узлах или ячейках сетки выражаются только через интенсивности в соседних узлах и ячейках. При рассмотрении радиационного теплопереноса подобное упрощение представляется весьма искусственным, за исключением случая оптически толстых сред*.

Задача 3. Тест на расчет поглощения. Радиационный теплоперенос в цилиндре, заполненном холодной ($T = 0$) средой с коэффициентом поглощения $\kappa = 1$. Радиус основания цилиндра $R = 1$, как и его высота $Z = 1$. Основание цилиндра непрозрачное и черное ($\rho_d = 1$), оно излучает с постоянной интенсивностью $I_{b,s} = 1$. Боковая поверхность цилиндра – непрозрачная зеркальная ($\rho_d = 1$). Верхнее основание – непрозрачное, черное и холодное ($T_s = 0$).

* Численная диффузия (применительно к задачам переноса излучения иногда еще употребляют термин “false scattering” – ложное рассеяние) – размытие и сглаживание решения, имеющее не физическую, а исключительно численную природу.

* Среда называется оптически толстой, если средняя длина свободного пробега фотона (то есть величина обратная коэффициенту ослабления) мала по сравнению с ее характерным размером.

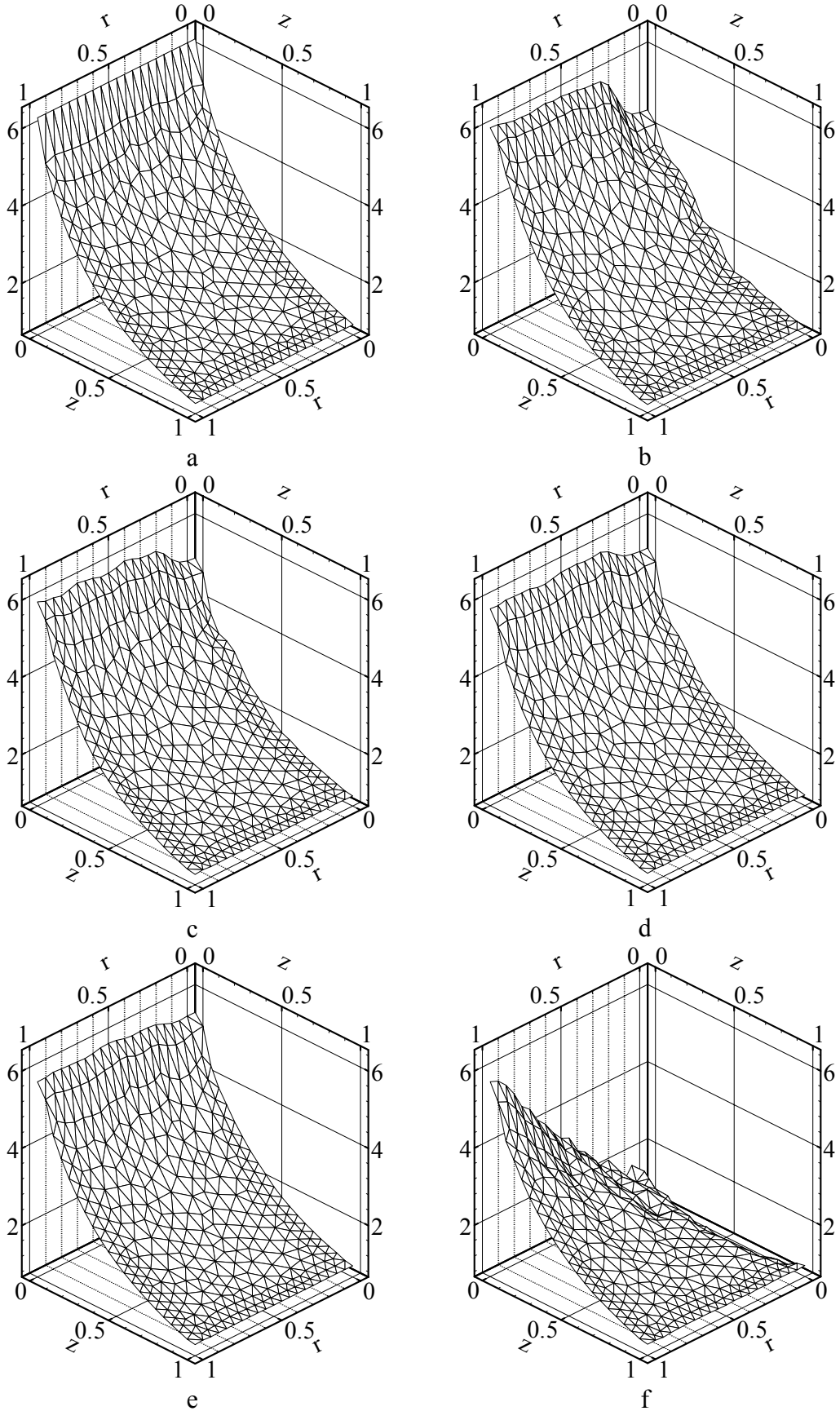


Рис. 2.12. Поле $-\text{div } \mathbf{q}^r$: а - точные значения; b,c,d,e - рассчитанные значения при $N_\theta = 4, 8, 16$ и 32, соответственно; f – значения, рассчитанные при $N_\theta = 32$ без проведения процедуры интерполяции в «незатронутых» ячейках

На рис. 2.12а представлено точное поле $-\text{div} \mathbf{q}^r$, взятое из [1], на рис. 2.12b-e – его значения, рассчитанные при различных N_θ , на рис. 12f решение получено без проведения процедуры интерполяции в «незатронутых» ячейках. Этот пример показывает, что предлагаемый метод позволяет вычислять поле $-\text{div} \mathbf{q}^r$ с приемлемой точностью, из него следует также, что без процедуры интерполяции это поле вычисляется со значительной ошибкой.

Задача 4. Тест на учет рассеяния. Рассматривается радиационный теплоперенос в цилиндре, заполненном холодной ($I_b = 1$) средой. Радиус цилиндра $R = 0.4$, а его высота $H = 1$. Боковая поверхность и верхнее основание цилиндра черные и холодные ($\rho_d = 0$, $I_{b,s} = 0$). Среда внутри цилиндра поглощает излучение с коэффициентом поглощения $\kappa = 0.5$ и изотропно рассеивает его с коэффициентом рассеяния $\sigma_s = 5$. Значения радиационного потока на боковой поверхности цилиндра, рассчитанные методами характеристик и дискретного переноса, приведены на рис. 2.13. И для того и для другого подхода найденные значения хорошо совпадают с эталонными, приведенными в работе [52].

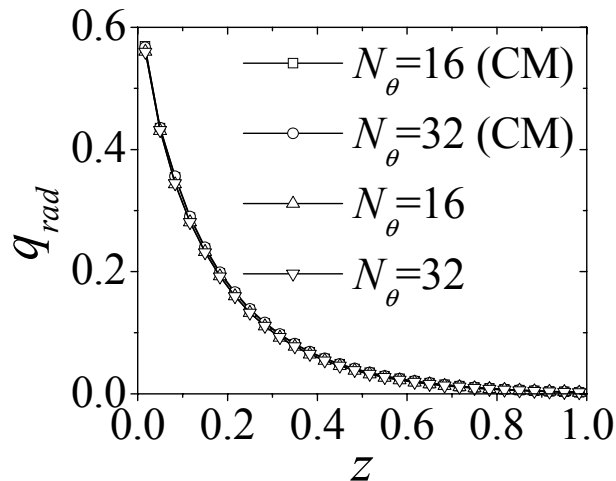


Рис. 2.13. Суммарный радиационный поток на боковой поверхности цилиндра, посчитанный методами характеристик (CM – characteristic method) и дискретного переноса

2.2.2. Трехмерный случай

Перенос изложенной в предыдущем параграфе численной схемы на трехмерный случай не представляет особых проблем. В трехмерном случае реализация этого подхода в

определенной степени оказывается даже более простой, поскольку пространственные и угловые переменные не связаны друг с другом. Напомним, что в цилиндрической геометрии ситуация другая и азимутальный угол может рассматриваться и как координата точки, и как направление луча.

Как следствие, в трехмерном случае, дискретизация задачи носит более очевидный характер и разбиение области D_{xyz} , где решается задача, отделено от дискретизации задачи по направлениям. Внутри области D_{xyz} строится расчетная сетка из трехмерных полиэдрических ячеек (чаще всего тетраэдров или параллелепипедов). Затем, как и в МДО, выбирается конечное множество дискретных направлений $\Omega_j, j = 1, 2, \dots, N_\Omega$. Указанный выбор может быть сделан большим числом способов. В данной работе при проведении численных расчетов направления задавались следующим образом: $\Omega_{i,j} = (\sin \theta_j \cos \varphi_{i,j}, \sin \theta_j \sin \varphi_{i,j}, \cos \theta_j)$; $\theta_j = \pi j / N_\theta$, $j = 1, \dots, N_\theta$, где N_θ – четное; $\varphi_{i,j} = \pi(2i-1)/N_{\varphi,j}$, $i = 1, \dots, N_{\varphi,j}$; $N_{\varphi,j} = 4j$, если $j \leq N_\theta/2$, и $N_{\varphi,j} = 4(N_\theta - j + 1)$, если $j > N_\theta/2$. Как уже упоминалось при описании осесимметричного варианта, такой выбор дискретных направлений соответствует S_N угловой аппроксимации в МДО при $N = N_\theta$.

Получение соотношений типа (2.25) в трехмерном случае идейно ничем не отличается от случая осесимметричного. Точно также, интенсивность излучения задается только на тех гранях ячеек сетки, которые принадлежат внешним границам или границам раздела сред. И точно также, чтобы связать между собой интенсивности на границах, уравнение переноса излучения интегрируется вдоль лучей, параллельных направлениям Ω_j из заданного дискретного набора внутри каждой подобласти. То есть, чтобы получить соотношения для интенсивности излучения, падающего на граничный элемент под номером k с направления Ω_j , из центра этого элемента k испускается луч в направлении, обратном Ω_j , и луч трассируется до тех пор, пока не достигнет какой-либо из границ области (либо внешней, либо внутренней). Луч одновременно является характеристикой уравнения переноса, и интегрирование данного уравнения вдоль него дает искомое соотношение типа (2.25).

Дополнив эти соотношения граничными условиями в дискретной форме, получаем систему уравнений, которая позволяет при известных источниках внутри области найти интенсивности излучения на границах.

При наличии рассеяние для решения задачи используется тот же подход, что и в осесимметричном случае. При этом, вычисление дивергенции радиационного потока построено на изложенной выше идеологии разделения ячеек на «затронутые» и

«незатронутые». Отличие заключается лишь в том, что в качестве ячеек V_n в трехмерном случае надо рассматривать полиэдрические ячейки разбиения области D_{xyz} . Тогда

$$\int_{V_n} \text{div} \mathbf{q}_r d\mathbf{r} = \int \int_{V_n} \mathbf{\Omega} \cdot \nabla I(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) d\mathbf{r} d\mathbf{\Omega} \approx \sum_{j=1}^{N_{\Omega}} w_j \int_{V_n} \mathbf{\Omega}_j \cdot \nabla I(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}_j) d\mathbf{r}, \quad (2.42)$$

а для «затронутых» ячеек используется соотношения

$$\int_{V_n} \mathbf{\Omega}_j \cdot \nabla I(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}_j) d\mathbf{r} \approx V_n \sum_{\gamma} (I(\mathbf{r}_{\gamma 2}, \mathbf{\Omega}_j) - I(\mathbf{r}_{\gamma 1}, \mathbf{\Omega}_j)) / \sum_{\gamma} |\mathbf{r}_{\gamma 2} - \mathbf{r}_{\gamma 1}|. \quad (2.43)$$

Для поиска значений $\int_{V_n} \mathbf{\Omega}_j \cdot \nabla I(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}_j) d\mathbf{r}$ в «незатронутых» ячейках используют точно тот алгоритм интерполяции, что и в осесимметричном случае, только интерполяция проводится уже не в секторе $D_{ij} = \{\mathbf{r} : (r, z) \in D_{rz}, \varphi \in (\varphi_{i-1,j}, \varphi_{i,j})\}$, а во всей расчетной области D_{xyz} .

2.2.2.1. Тестирование трехмерного варианта метода дискретного переноса. В

этом разделе рассмотрены две тестовые задачи радиационного теплопереноса. Первая из них показывает, насколько адекватно учитываются при данном подходе преломление и отражение излучения на френелевских границах. Во второй задаче моделируется радиационно-кондуктивный теплообмен в цилиндре.

Задача 1. Рассматривается перенос излучения в прозрачной пластине в форме равнобедренного треугольника (рис. 2.14). Угол в вершине напротив основания составляет $\alpha = 120^\circ$; высота, опущенная на основание, $H = 1$. Показатель преломления вещества пластины $n = 1.75$, а показатель преломления внешней среды $n_{\text{внеш}} = 1$. Сторона пластины, соответствующая основанию треугольника, является непрозрачной, черной ($\rho_s = 0$) и имеет температуру T . Ширина этой стороны (толщина пластины) равна $D = 0.2$. Остальные стороны представляют собой зеркальные и прозрачные (френелевские) границы. Вещество пластины не поглощает, не излучает и не рассеивает: $\kappa = 0$, $\sigma_s = 0$. Расчетная сетка для этой задачи показана на рис. 2.15.

На рис. 2.16 представлено распределение плотности результирующего потока излучения по основанию пластины. Там же приведено точное решение из работы [55]. Видно, что численное решение достаточно близко к точному. Был даже выявлен тонкий эффект резкого изменения потоков у краев пластины. Однако для этого пришлось использовать достаточно высокий порядок угловой аппроксимации решения – S_{16} и S_{32} , что является типичным для задач с френелевскими границами вследствие резкого изменения коэффициента отражения (см. рис. 2.2).

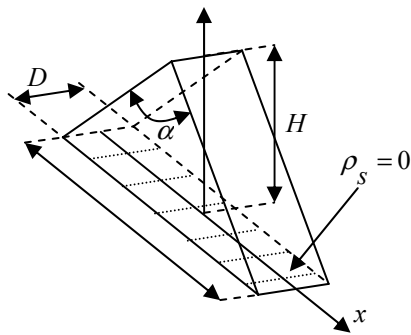


Рис. 2.14. Схема задачи 1

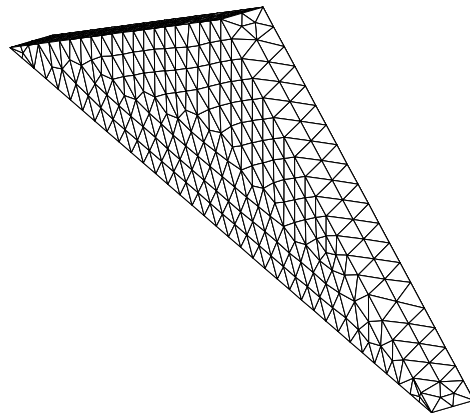


Рис. 2.15. Расчетная сетка задачи 1

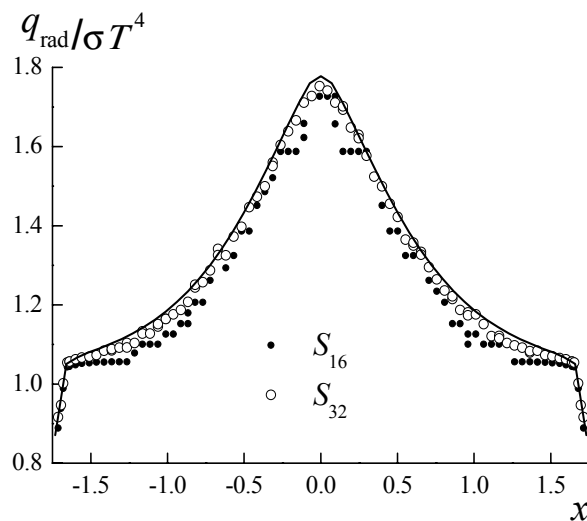


Рис. 2.16. Распределение плотности результирующего радиационного теплового потока вдоль основания треугольной пластины. Сплошная линия - точное решение, точки - численное. Координаты каждой точки — это x -координата центра граничного элемента сетки и значение суммарного потока на нем

Задача 2. Рассматривается радиационно-кондуктивный теплообмен в цилиндре, заполненном прозрачной средой с коэффициентом поглощения $\kappa = 1 \text{ м}^{-1}$. Радиус цилиндра равен $R = 0.2 \text{ м}$, его высота — $H = 1 \text{ м}$. Верхнее и нижнее основания цилиндра являются непрозрачными и черными ($\rho_s = 0$), а боковая поверхность цилиндра — непрозрачной и зеркальной с коэффициентом отражения ρ_s , равным единице. Температура верхнего основания составляет T_1 , а нижнего — $0.5 T_1$. Коэффициент

теплопроводности среды k выбирается таким образом, чтобы величина кондуктивно-радиационного параметра $N \equiv \frac{\kappa k}{4\sigma T_1^3}$ равнялась 0.01. В силу симметрии задачи и того, что боковая поверхность является полностью отражающей, распределение температуры зависит только от координаты z – расстояния до нижнего основания цилиндра.

Результаты расчета распределения температуры по высоте на сетке, показанной на рис. 2.17, приведены на рис. 2.18. Уже при минимальной угловой аппроксимации (S_2) численное решение почти идеально совпадает с известным точным решением из работы [1].

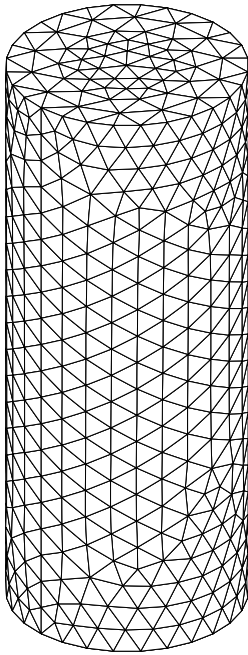


Рис. 2.17. Расчетная сетка задачи 2

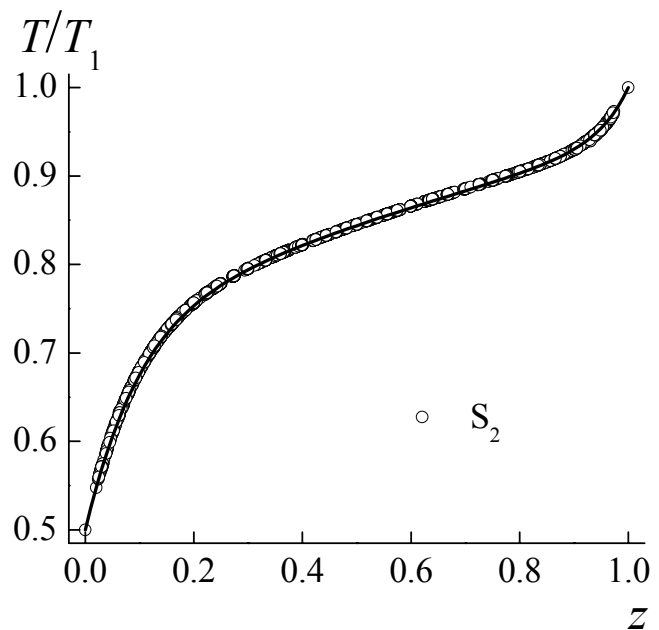


Рис. 2.18. Распределение безразмерной температуры по высоте цилиндра. Точки – значения температуры в узлах сетки. Сплошная линия – решение из работы [1].

2.3. Выводы

Предложен численный метод расчета радиационного переноса тепла, который до этого никогда не использовался при моделировании роста оксидных кристаллов. Данный метод основан на комбинации методов дискретных ординат и трассировки лучей (ray tracing) и представляет собой разновидность метода дискретных направлений (discrete transfer method). В наследство от МДО в варианте метода характеристик этот численный подход взял схему разбиения расчетной области, способ дискретизации задачи по

направлениям и алгоритм дискретизации краевых условий. В свою очередь, от метода трассировки луча был перенят расчет переноса излучения внутри прозрачных (и полупрозрачных) сред. Последнее позволило избавиться от главного недостатка метода характеристик – аномально сильной численной диффузии, которая приводила к существенному искажению решения путем сглаживания радиационных потоков. В добавок, за счет отказа от использования в качестве переменных значений интенсивностей излучения во внутренних частях расчетной области, удалось значительно понизить размерность численной системы, что привело к ускорению времени счета и к снижению затрат машинной памяти.

Для нахождения значений объемной плотности поглощенной радиации $-\text{div} \mathbf{q}'$ предложен специальный алгоритм, который никогда раньше не применялся и основан на оригинальной процедуре интерполяции поглощенной радиации по каждому дискретному направлению отдельно. Этот же самый алгоритм используется и при решении задач с рассеянием, поскольку рассеяние учитывается с помощью поглощения средой теплового излучения.

Следует отметить, однако, что, избавившись от численной диффузии, метод дискретного переноса все-таки унаследовал другой недостаток МДО – лучевой эффект (ray effect), который выражается в колебаниях решения численной природы (см., например, тестовую задачу 1 в разделе 2.2.1.6). Причем эти колебания выражаются даже ярче чем в методе характеристик. Однако подобное наблюдение не должно вводить в заблуждение – большая гладкость решения, полученного методом характеристик, вызвана численной диффузией и не говорит о более высокой точности.

Борьба с лучевым эффектом в МДО идет либо путем увеличения количества дискретных направлений, либо путем повышения порядка аппроксимации поля интенсивностей на единичной сфере. Однако второй способ представляется приемлемым только для узкого круга задач, в которых поле интенсивностей можно считать достаточно гладким. В большинстве же практических приложений поле интенсивностей на единичной сфере это скорее разрывная, чем непрерывная функция. Это обусловлено и наличием френелевских границ, и неоднородностью краевых условий, и геометрическими эффектами, вроде затенения. Поэтому снижения лучевого эффекта до приемлемого уровня следует добиваться увеличением количества дискретных направлений.

Изложенные в данной главе результаты были опубликованы в нескольких работах. В статье [27] метод дискретного переноса для осесимметричного приближения показан как модификация метода характеристик. Наиболее подробное изложение дано в [28].

Трехмерный вариант метода опубликован в [56]. Помимо этих статей метод дискретного переноса опубликован в трудах многих конференций - [57-61].

Следует подчеркнуть, что описанный в данной главе численный подход для решения уравнения переноса тепла излучением уже многократно применялся при моделировании роста оксидных кристаллов. Естественно, что большинство этих работ относятся к моделированию задач, обладающих цилиндрической симметрией ([49], [24], [62-68]). Причем осесимметричный вариант метода уже в течение нескольких лет используется в программе Flow Module пакета CGSim [69], который применяется во многих практических приложениях.

Трехмерный вариант метода применялся для расчета тепловых полей, возникающих в кристаллизационной установке при выращивании лент сапфира методом Степанова ([70-74]).

3. Динамическая модель процесса Чохральского

3.1. Предварительные замечания

Данная глава посвящена описанию нестационарной модели процесса Чохральского, позволяющей моделировать не только процесс изменения формы кристалла, но и автоматическое управление этим процессом. При этом, основной акцент сделан на применении данной модели к росту оксидных кристаллов, хотя изложенный ниже подход может быть использован для расчетов любых вариантов процесса Чохральского в осесимметричном случае. Дело в том, что именно для оксидных кристаллов динамическая модель роста так до сих пор и не была разработана, хотя подобное моделирование роста полупроводниковых кристаллов используется уже достаточно давно (см. главу 1 «Основные проблемы виртуального выращивания оксидных кристаллов из расплава»).

В то же время, моделирование теплообмена при выращивании кристаллов методом Чохральского является на сегодняшний день достаточно стандартной процедурой. Существуют даже коммерческие программы (см., например, [69]), позволяющие моделировать теплообмен в процессе Чохральского как при росте полупроводниковых, так и оксидных кристаллов. Однако при рассмотрении оксидных кристаллов, моделирование ограничивается стационарным случаем, когда форма кристалла не изменяется с течением времени и, следовательно, процесс собственно вытягивания кристалла вообще не рассматривается.

В то же время, именно для оксидных кристаллов необходимость в динамическом моделировании является наиболее острой. В частности, привлечение аппарата динамического моделирования может послужить мощным подспорьем к выработке удобных качественных и количественных критериев, с помощью которых система управления проходила бы сложные участки, такие как инверсия фронта кристаллизации, без вмешательства оператора. Правда, возможны варианты корректировки системы управления и без детального исследования процессов теплообмена, а опытным путем на основе проведения серии испытаний. В частности, именно на этом строится стандартная процедура настройки ПИД-регуляторов [75]. Применительно к росту кристаллов, в работе [76] предложена процедура оценки времени запаздывания и построения авторегрессионной модели отклика системы на управляющее воздействие по результатам испытаний реакции системы на импульсное, ступенчатое и синусоидальное изменения мощности нагревателя. Похожий подход с построением авторегрессионной модели предлагается и в [77]. Однако в обоих случаях указанные алгоритмы отрабатывались на

стадии роста кристаллов постоянного диаметра, и едва ли они окажутся существенным подспорьем в решении таких действительно сложных задач, как управление ростом кристалла во время инверсии фронта кристаллизации, особенно, если она происходит на этапе разращивания кристалла. В подобных задачах учет природы происходящих внутри установки процессов является, по-видимому, необходимым.

Здесь можно сказать, что оксидные кристаллы идут в некотором смысле по пути, проторенному кристаллами полупроводников. Краткий, но весьма информативный обзор развития технологии получения оксидных кристаллов способом Чохральского за более чем 40 летний период, представлен в публикации [78]. Если в самом начале удавалось выращивать только очень небольшие кристаллы диаметром порядка 2-3 см и весом около 100 грамм для исследовательских целей, то сейчас уже в промышленных объемах получают оксидные кристаллы весом до нескольких десятков килограмм. Тем не менее, проблема получения высококачественных оксидных кристаллов большого диаметра (>75 мм) остается весьма острой и для ее решения требуется скачок в понимании процессов происходящих внутри теплового узла. Этот скачок должен быть обеспечен появлением адекватных математических и программных моделей, которые позволят вносить изменения в технологию процесса и проводить модернизацию конструкций тепловых узлов. На современном этапе развития численного моделирования роста кристаллов несколько направлений являются наиболее приоритетными ([79]). Это решение трехмерных задач, учет различных нестационарных эффектов, эффективное решение задач радиационного переноса, особенно в областях, заполненных взаимодействующими с излучениями средами, моделирование дефектообразования и, наконец, оптимизация процесса выращивания (в широком смысле этого слова). Таким образом, проблема динамического моделирования оксидных кристаллов является одной из самых насущных.

Чтобы перейти от решения стационарных задач к решению задач динамического моделирования, необходимо уметь вычислять изменение формы кристалла в процессе выращивания. Эволюция формы кристалла определяется, прежде всего, тепловыми процессами, протекающими в кристаллизационном узле. Поэтому главным управляющим параметром является тепловыделение нагревателя. В качестве других управляющих параметров могут выступать, например, скорости вытягивания и вращения кристалла и тигля. Однако их величины обычно задаются в явном виде как функции времени. Поэтому, возникает необходимость отслеживать изменение мощности тепловыделения в нагревателе в течение всего процесса. Для решения этой проблемы в работе [43] вводятся понятия прямой и обратной задачи. В случае прямой задачи тепловыделение в нагревателе

Q и скорость вытягивания считаются заданными функциями времени, а форма кристалла находится из расчета. Но для того, чтобы получить кристалл определенной формы нужно предварительно найти зависимость $Q(t)$, которая эту форму обеспечит. Временные вариации мощности нагревателя $Q(t)$, соответствующие заданной форме кристалла, находятся из решения обратной задачи. Обратная задача является некорректной, в том смысле, что как минимум одно из условий корректности - (I) существование решения (II) его единственность и (III) непрерывность решения, не выполняется [43], [80]. Необходимость предварительного решения обратной задачи сильно усложняет процесс моделирования. В работе [43] и [44] обратная задача решается в несколько этапов. Сначала находятся мощности тепловыделения соответствующие стационарным состояниям кристалла заданной формы в различные моменты времени по ходу роста. При этом тепловыделение в каждый момент подбирается таким образом, чтобы форма боковой поверхности кристалла не отклонялась от заданной. Следовательно, на данном этапе необходимо решить целую серию задач оптимизации, что уже весьма трудоемко. Далее, найденная зависимость $Q(t)$ должна быть подвергнута дополнительной корректировке, которая связана с тем, что при решении стационарных задач, во-первых, не учитывается тепло выделяемое (либо поглощаемое) при росте за счет кристаллизации (плавления) вещества при изменении формы межфазной границы, а, во-вторых, не учитываются нестационарные эффекты, вызванные запаздыванием реакции системы на изменение тепловыделения в нагревателе. Решение обратной задачи, таким образом, является существенно более сложным по сравнению с задачей прямой. И если для случая полупроводниковых кристаллов подобный подход еще вполне приемлем, то в случае роста оксидных кристаллов его использование представляется весьма проблематичным. В частности, совершенно неясно как быть с процессом инверсии – ведь стационарного состояния для соответствующего момента времени может просто не существовать! Поэтому более конструктивным представляется применение подхода близкого тому, что использовался в работе [41], когда вместо решения обратной задачи моделировалась работа автоматической системы управления, которая самостоятельно корректировала управляющие параметры роста. Однако в [41] использовался сильно упрощенный подход, в котором в качестве «измеряемого» параметра на вход системы контроля поступает текущий радиус кристалла (радиус кристалла в тройной точке), в то время как в реальных установках на вход системы управления поступают только показания весового датчика, на основании которых система и пытается вычислить величину реального радиуса. Тем не менее, использование даже такого упрощенного подхода позволило показать, что применение в системе управления только так называемого интегрального слагаемого,

когда скорость изменения мощности пропорциональна величине ошибки, то есть рассогласованию измеряемого и заданного сигналов, влечет к появлению систематического дефекта в виде не исчезающей «волны» на боковой поверхности растущего кристалла. Для того, чтобы кристалл на цилиндрической стадии рос значительно более ровным, достаточно использовать в управлении помимо интегрального, еще и пропорциональное слагаемое, которое пропорционально скорости изменения ошибки (это, так называемый, ПИ-регулятор). Эти результаты хорошо согласуются с экспериментом, тем самым, подчеркивая важность и практическую значимость моделирования работы системы управления. Отметим также, что при применении подхода из [43], основанного на решении обратной задачи, невозможно адекватно оценить влияние систем управления на процесс роста.

Дальнейшее изложение построено следующим образом. Сначала, не вдаваясь в подробности, описан алгоритм моделирования изменения формы кристалла в данном подходе. При этом главная цель состоит в объяснении принципов. Детальное описание будет дано позже, в разделе **«Итерационный алгоритм нахождения тройной точки»**. Поскольку важно моделировать не только процесс изменения формы кристалла, но и автоматическое управление этим процессом, в разделе **«Модель управления нагревателем»** приведены примеры регуляторов тепловыделения нагревателей на основе показаний датчика веса.

Сразу же подчеркнем, что все задачи динамического моделирования рассматриваются только в осесимметричной постановке и относятся к установкам, обладающим цилиндрической симметрией. Конечно, форма самого кристалла может отклоняться от осесимметричной, например, в силу появления граней на фронте кристаллизации и выхода граней на боковую поверхность кристалла. Тем не менее, мы вынуждены вести расчеты в рамках осесимметричной модели, поскольку трехмерное моделирование требует чрезвычайно больших затрат вычислительных ресурсов.

Для расчета глобального теплообмена в элементах ростовой установки использовался Flow Module пакета CGSim [69], разработанного ООО «СофтИмпакт». Пакет позволяет решать как стационарные, так и нестационарные задачи. Его отличительной особенностью является возможность расчета течений в рамках большого количества различных подходов. Можно рассчитывать как ламинарные, так и турбулентные течения по моделям $k-\epsilon$, RANS (осреднение по Рейнольдсу), LES (метод больших вихрей) и др. [81], учитывать зависимость плотности жидкости от температуры в приближении Буссинеска, конвекцию Марангони. Кроме того, для расчета

радиационного переноса в пакет был добавлен разработанный нами алгоритм, который описан в главе «**Численный метод решения задач радиационного теплопереноса**». С другой стороны, в пакете не предусмотрено изменение формы кристалла во времени. Поэтому для моделирования эволюции формы кристалла был разработан специальный алгоритм, описанный в этой главе.

3.2. Моделирование эволюции формы кристалла

Как уже отмечалось выше, для перехода от решения статических задач к решению задачи динамического моделирования необходимо отслеживать изменение формы кристалла и объема расплава с течением времени.

Предположим, что геометрия системы кристалл-расплав в некоторый момент времени t известна. Требуется определить геометрию системы на следующем временном шаге в момент времени $t + \Delta t$. Процедура решения состоит из нескольких этапов. На первом этапе решается задача глобального теплообмена, учитывающая конвекцию в расплаве, радиационный теплоперенос в газе и полупрозрачном кристалле, кондуктивный перенос тепла в нагревателе, тигле и блоках теплоизоляции, и находится распределение температуры и тепловых потоков во всех элементах установки в момент времени t . Такая задача, в принципе, является нестационарной, но иногда при моделировании роста кристаллов используется более простой квазистационарный подход, при котором в каждый момент времени решается задача стационарного теплообмена. Подобный подход существенно упрощает моделирование, но не учитывает инерционные эффекты, которые чрезвычайно важны на стадии разращивания кристалла, а также при управлении его ростом. Как показал опыт решения динамической задачи, применение квазистационарного подхода приводит к совершенно нереальному и неадекватному поведению всей тепловой системы. Происходит утрата тепловой инерции. Например, при ступенчатом изменении мощности нагревателя тепловые поля внутри установки подстраются под это изменение практически мгновенно. Ведь если считать, что система и в момент времени t , и в момент времени $t + \Delta t$ находится в стационарных состояниях, то температурные поля в эти моменты могут весьма сильно отличаться друг от друга. Таким образом, применение квазистационарного подхода при динамическом моделировании работы системы управления оказывается некорректным.

На втором этапе по найденным тепловым потокам вычисляются скорости кристаллизации на фронте (рис. 3.1а, скорости показаны стрелками)

$$V_{cr} = \frac{q^{out} - q^{inc}}{L \rho_{cr}}, \quad (3.1)$$

где L - скрытая теплота плавления, ρ_{cr} - плотность кристалла, q^{out} - результирующий тепловой поток, уходящий с фронта кристаллизации в твердую фазу, а q^{inc} - тепловой поток, приходящий на фронт из расплава. Положительные значения V_{cr} соответствуют кристаллизации вещества (на рис. 3.1a соответствуют стрелкам, направленным наружу кристалла), а отрицательные - плавлению (стрелки, направленные внутрь кристалла, на рис. 3.1a). Зная значения скоростей кристаллизации, находится смещение фронта, которое складывается из вертикального смещения, вызванного вытягиванием кристалла вверх с заданной скоростью V_{pull} , и смещения, направленного по нормали к фронту со скоростью V_{cr} (рис. 3.1b, пунктирная линия). Что же касается точек на свободной поверхности кристалла, то они смещаются только вверх (рис. 3.1b, штрихпунктирная линия).

На третьем этапе находится новое положение тройной точки, в которой пересекаются границы раздела кристалл-газ, кристалл-расплав и расплав-газ (рис. 3.1c). Поскольку смещение тройной точки может иметь не только нормальную, но и касательную составляющую к фронту кристаллизации, то для расчета тройной точки знания скорости кристаллизации оказывается недостаточным и необходимо привлекать дополнительные соотношения, в качестве которых используются:

- 1) уравнение баланса массы кристалла и расплава $\frac{d}{dt}(M_{crystal} + M_{melt}) = 0$
- 2) капиллярное уравнение Лапласа, определяющее форму мениска, $\frac{\gamma}{R_1} + \frac{\gamma}{R_2} + \rho g z = const$, где γ - коэффициент поверхностного натяжения, ρ - плотность, g - ускорение свободного падения, R_1 и R_2 - главные радиусы кривизны поверхности жидкости в данной точке, а ось z направлена вертикально вверх, и
- 3) условие постоянства угла роста, то есть угла между касательными, проведенными к мениску и боковой поверхности растущего ($V_{cr} > 0$) кристалла.

В случае плавления ($V_{cr} < 0$) последнее условие заменялось условием перемещения тройной точки по поверхности кристалла с учетом возможного соскальзывания расплава вдоль фронта кристаллизации.

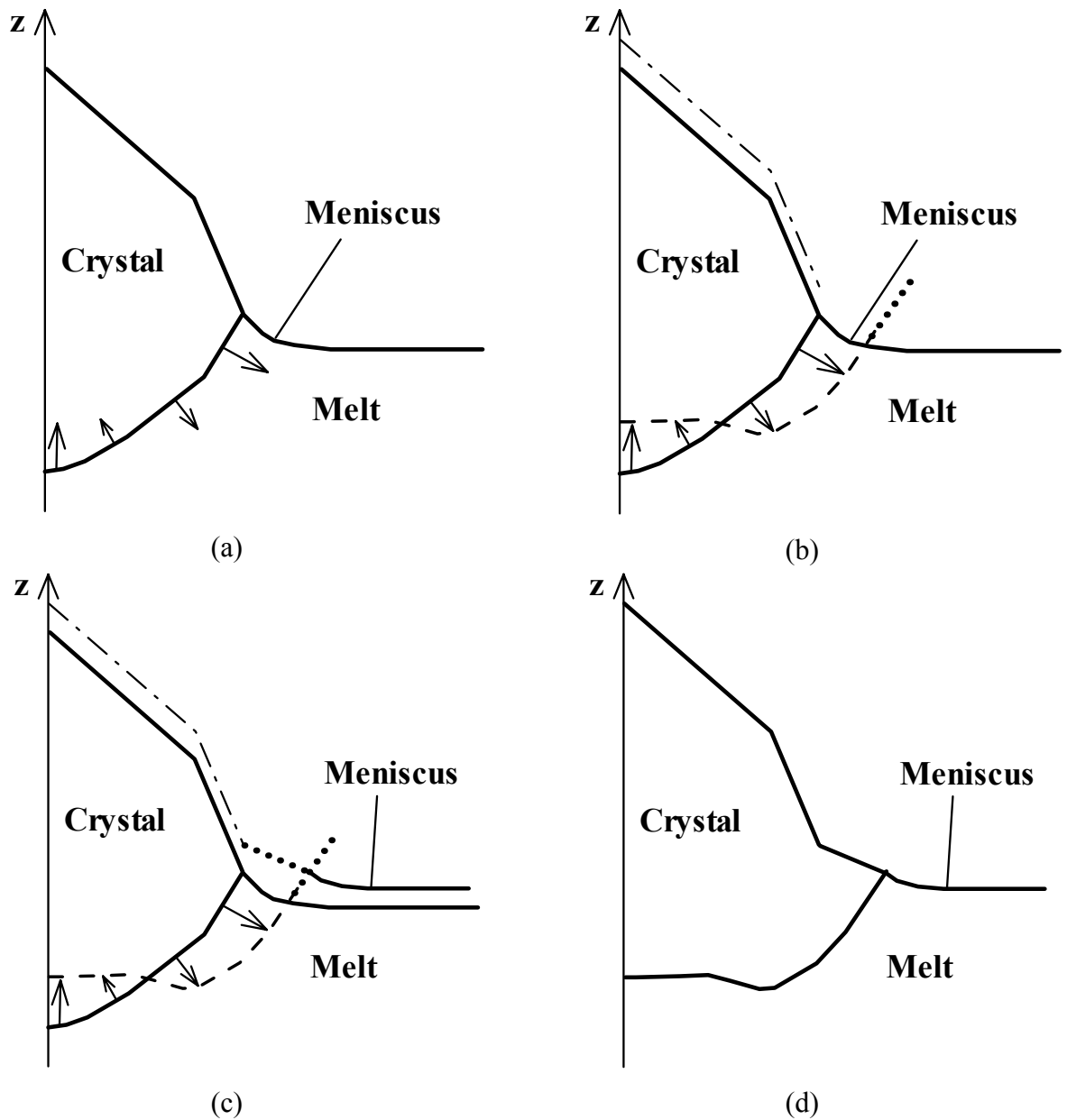


Рис. 3.1. Эволюция формы кристалла в течение одного временного шага

Итоговый вид кристалла в момент времени $t + \Delta t$ приведен на рис. 3.1d, а на рис. 3.2 отдельно вынесено начальное и конечное состояния системы кристалл-расплав на данном временном шаге Δt .

Приведенный алгоритм дает возможность рассчитать эволюцию системы кристалл-расплав за временной шаг Δt . Повторение этого алгоритма шаг за шагом позволяет моделировать процесс роста кристалла в динамике. Что касается, начального, самого первого состояния системы, то его обычно находят из решения стационарной задачи, в которой мощность нагревателя подбирается таким образом, чтобы скорости кристаллизации на фронте кристалла лежали в допустимых пределах.

При этом сам процесс моделирования существенно зависит от того, какие параметры задачи являются управляющими. В реальном процессе Чохральского получение кристалла заданной формы чаще всего обеспечивается системой автоматического управления, основанной на использовании весового датчика. Именно такой подход и был реализован в рамках данной работы.

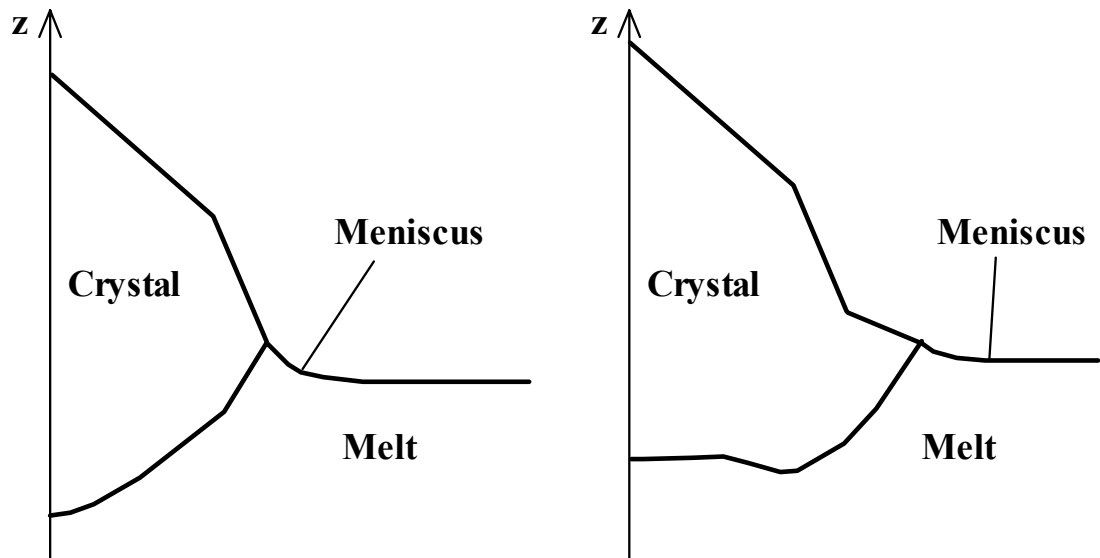


Рис. 3.2. Итоговое изменение формы кристалла. Слева – форма кристалла и поверхности расплава в момент времени t . Справа – в момент времени $t + \Delta t$.

3.3. Модель управления нагревателем

Чтобы прояснить работу автоматической системы управления по весовому датчику приведем описания двух разных систем управления, которые используются в реальных установках. Первая из них - это так называемый ПИД-регулятор, применяемый, в частности, при выращивании гадолиний галлиевых гранатов (ГГГ) в НИИ Материаловедения в г. Зеленограде. Кристаллы ГГГ производятся высокоградиентным методом Чохральского. При температуре плавления 2023 К перепад температур в расплаве достигает трехсот градусов. Большие температуры и большие градиенты температур достигаются за счет использования соответствующей печи с индукционным механизмом нагрева тигля.

Работа системы управления основана на изменении напряжения U на индукционных катушках нагревателя, в соответствии с сигналом ошибки e подаваемым на вход системы управления. Сигнал ошибки - это рассогласование показаний весового датчика с базовым сигналом, заложенным в установку оператором. Например

$$e = \frac{dF}{dt} - \frac{dG}{dt}, \quad (3.2)$$

где G – задаваемое изменение веса кристалла со временем, а F – показание весового датчика, то есть вес кристалла с учетом веса мениска и выталкивающей силы, действующей на погруженную в расплав часть кристалла. Иногда применяется и другой вариант определения ошибки

$$e = F - G. \quad (3.3)$$

Таким образом, при использовании ПИД-регулятора скорость изменения напряжения определяется выражением

$$\frac{dU}{dt} = K_P \frac{de}{dt} + K_I e + K_D \frac{d^2 e}{dt^2}. \quad (3.4)$$

Здесь K_P , K_I и K_D – это соответственно пропорциональный, интегральный и дифференциальный коэффициенты управления. Выбор этих коэффициентов особое искусство, от которого во многом зависит устойчивость ростового процесса и качество выращиваемых кристаллов.

Хотя ПИД-регулятор управляет напряжением, подаваемым на нагреватель, при моделировании удобнее считать, что изменяется не напряжение, а мощность тепловыделения в нагревателе. Это упрощение вполне оправданно, когда перепад перепады напряжения по ходу процесса роста не слишком высоки. В этом случае можно

считать, что изменение тепловыделения прямо пропорционально изменению напряжения. В результате будем иметь

$$\frac{dQ}{dt} = \tilde{K}_P \frac{de}{dt} + \tilde{K}_I e + \tilde{K}_D \frac{d^2e}{dt^2}, \quad (3.5)$$

где коэффициенты $\tilde{K}_P$, $\tilde{K}_I$ и $\tilde{K}_D$ пропорциональны исходным коэффициентам, заложенным в установку. Коэффициент пропорциональности обычно не известен, поэтому основную информацию при моделировании несут не абсолютные, а относительные значения управляющих коэффициентов.

Помимо систем управления, основанных на работе ПИД-регулятора, имеются и другие. Например, это двухступенчатый регулятор, применяемый в Новосибирске в Институте Неорганической Химии СО РАН при выращивании кристаллов германата висмута (BGO) низкоградиентным методом Чохральского. Для данного производства характерны меньшие температуры (температура плавления кристалла BGO в структуре силленита 1203 K), и существенно более низкие температурные градиенты, чем в случае ГГГ (перепад температур в расплаве всего несколько градусов). Необходимые температурные условия обеспечиваются с помощью многосекционного резистивного нагревателя, расположенного снаружи тигля. Система автоматического управления корректирует температуры многосекционного нагревателя по следующему закону:

$$\frac{d\bar{T}_i}{dt} = k_{1,i} \left(\frac{dF}{dt} - \frac{dG}{dt} \right) + \frac{df_i}{dt} \quad i = 1, 2, 3, \quad (3.6)$$

где $\bar{T}_i$ - значение управляющей температуры i -го нагревателя (это виртуальная, а не реальная температура, которая «сидит» в контуре управления своего нагревателя), f_i – задаваемое оператором смещение управляющей температуры, $k_{1,i}$ - коэффициент усиления по рассогласованию весов. После того как найдено новое значение управляющей температуры $\bar{T}_i$ оно поступает на блок управления i -ым нагревателем. Блок управления изменяет напряжение U_i со скоростью

$$\frac{dU_i}{dt} = k_{2,i} \left(\frac{d\bar{T}_i}{dt} - \frac{dT_i}{dt} \right) + \frac{k_{2,i}}{\tau_i} (\bar{T}_i - T_i), \quad (3.7)$$

где T_i – это уже реальная температура на термопаре, расположенной вблизи i -го нагревателя, $k_{2,i}$ и τ_i - задаваемые управляющие параметры. Причем τ_i должно быть примерно равно времени тепловой релаксации данной системы (в случае экспериментальной установки с диаметром тигля 70 мм оно составляет 2 - 2.5 мин).

Так же как и в предыдущем случае, при моделировании полагалось, что мощность тепловыделения Q_i в каждом нагревателе пропорциональна напряжению U_i . Поэтому использовались аналогичные управляющие соотношения не для напряжения, а для мощности

$$\frac{dQ_i}{dt} = k_{2,i} \left(\frac{d\bar{T}_i}{dt} - \frac{dT_i}{dt} \right) + \frac{k_{2,i}}{\tau_i} (\bar{T}_i - T_i). \quad (3.8)$$

Конечно, такому управлению должно соответствовать какое-то новое значение $k_{2,i}$. К счастью, точность определения управляющего параметра $k_{2,i}$ не играет существенной роли при моделировании. Главное, чтобы выбранные значения позволяли системе быстро (за время порядка τ_i) подгонять температуру на термопаре T_i к заданному значению $\bar{T}_i$. Как следствие, подходящее значение $k_{2,i}$ легко находилось в серии численных экспериментов так, чтобы рассогласование между $\bar{T}_i$ и T_i не превышало, в среднем, десятых долей градуса. Таким образом, отклонение показания датчика веса от заданного веса кристалла приводит к изменению температуры $\bar{T}_i$, что в свою очередь вызывает изменение тепловыделения Q , которое продолжается до тех пор, пока температуры $\bar{T}_i$ и T_i не сравняются. Из уравнений следует, что в установившемся режиме скорость изменения весовой ошибки равна нулю, что эквивалентно равенству сечения кристалла задаваемому значению. При этом вес кристалла будет отличаться от заданного на некоторую константу.

3.4. Итерационный алгоритм нахождения тройной точки

Положим, для удобства, что фронт кристаллизации в момент времени t описывается параметрической кривой $r(s, t)$ и $z(s, t)$, где $0 \leq s \leq 1$. Причем $s = 0$ соответствует центральной точке межфазной границы (то есть $r(0, t) \equiv 0$), а $s = 1$ – тройной точке. Ниже приводится алгоритм, с помощью которого по известному положению фронта в момент времени t находилось положение фронта в момент времени $t + \Delta t$.

Первым делом вычисляются тепловые потоки на известном фронте кристаллизации $r(s, t)$, $z(s, t)$. Для этого решается задача глобального теплообмена во всей установке, находятся температурные поля во всех элементах теплового узла, радиационные потоки в прозрачных и полупрозрачных блоках, а также конвективные потоки в расплаве. После

нахождения тепловых потоков вычисляется скорость кристаллизации в каждой точке фронта

$$V_{cryst}^t(r(s, t), z(s, t)) = ((\mathbf{q}_L \cdot \mathbf{n}) - (\mathbf{q}_S \cdot \mathbf{n})) / (\rho L), \quad (3.9)$$

где $\mathbf{q}_S$ и $\mathbf{q}_L$ - векторы плотности потока тепла в твердой и жидкой фазах, ρ - плотность кристалла, L - удельная теплота плавления кристалла, а $\mathbf{n}$ - направленная внутрь расплава нормаль к фронту кристаллизации. Величины $\mathbf{q}_S$, $\mathbf{q}_L$ и $\mathbf{n}$ свои в каждой точке $(r(s, t), z(s, t))$ фронта. В случае, характерном для оксидных кристаллов, когда кристалл прозрачен, а расплав нет, тепловой поток в жидкой фазе является чисто кондуктивным, а поток в твердой фазе складывается из кондуктивного и радиационного.

3.4.1. Простой алгоритм

После того, как найдено распределение скорости кристаллизации по известному фронту в момент времени t , вводится кривая $\tilde{r}(s, t + \Delta t)$, $\tilde{z}(s, t + \Delta t)$, которой будут принадлежать точки фронта в момент времени $t + \Delta t$. Смещение точек фронта складывается из двух движений - вертикального, обусловленного вытягиванием кристалла вверх, и нормального по отношению к фронту, вызванного кристаллизацией и плавлением вещества на межфазной границе. Поэтому для $0 \leq s \leq 1$ можно записать

$$\begin{aligned} \tilde{r}(s, t + \Delta t) &= r(s, t) + V_{cryst}^t(r(s, t), z(s, t)) n_r(s, t) \Delta t \\ \tilde{z}(s, t + \Delta t) &= z(s, t) + V_{cryst}^t(r(s, t), z(s, t)) n_z(s, t) \Delta t + V_{pull} \Delta t, \end{aligned} \quad (3.10a)$$

где $n_r(s, t)$ и $n_z(s, t)$ - соответственно радиальная и вертикальная компоненты нормали к фронту в точке $(r(s, t), z(s, t))$. Однако вполне возможно, что некоторые точки нового фронта в момент времени $t + \Delta t$ будут лежать за пределами отрезка $0 \leq s \leq 1$. Поэтому для случая $1 < s \leq 2$ использовалась экстраполяционная формула

$$\begin{aligned} \tilde{r}(s, t + \Delta t) &= 2\tilde{r}(1, t + \Delta t) - \tilde{r}(2 - s, t + \Delta t) \\ \tilde{z}(s, t + \Delta t) &= 2\tilde{z}(1, t + \Delta t) - \tilde{z}(2 - s, t + \Delta t), \end{aligned} \quad (3.10b)$$

а для полноты картины в оставшемся крайне маловероятном случае $s > 2$ применялось следующее соотношение

$$\begin{aligned} \tilde{r}(s, t + \Delta t) &= s \tilde{r}(1, t + \Delta t) \\ \tilde{z}(s, t + \Delta t) &= (1 - s) \tilde{z}(0, t + \Delta t) + s \tilde{z}(1, t + \Delta t). \end{aligned} \quad (3.10c)$$

Использование данных экстраполяционных соотношений обусловлено, во-первых, простотой их реализации, а во-вторых, описанная таким образом кривая $\tilde{r}(s, t + \Delta t)$,

$\tilde{z}(s, t + \Delta t)$ является непрерывной, а в точке $s = 1$ непрерывен еще и наклон этой кривой $\frac{\partial \tilde{r}}{\partial s}, \frac{\partial \tilde{z}}{\partial s}$.

Последний этап в поисках нового положения фронта кристаллизации $r(s, t + \Delta t), z(s, t + \Delta t)$ заключается в нахождении положения тройной точки в момент времени $t + \Delta t$. Здесь помимо условия, что тройная точка должна принадлежать линии $\tilde{r}(s, t + \Delta t), \tilde{z}(s, t + \Delta t)$, необходимо привлекать дополнительное соотношение для определения ее конкретного местоположения на данной кривой. Это соотношение - условие сохранения суммарной массы расплава и кристалла:

$$M_{crist} + M_{melt} = const, \quad (3.11')$$

которое удобно записать как

$$\Delta M_{crist} + \Delta M_{melt} = 0, \quad (3.11)$$

где $M_{crist} = V_{crist} \rho_{crist}$ - масса кристалла, $M_{melt} = \rho_{melt} V_{melt}$ - масса расплава в тигле. V_{crist}, ρ_{crist} и V_{melt}, ρ_{melt} - объем и средняя плотность кристалла и расплава соответственно. Если учитывать изменение средней по объему плотности расплава ρ_{melt} (плотность зависит от температуры), то

$$\Delta M_{melt} = \Delta \rho_{melt} V_{melt} + \rho_{melt} \Delta V_{melt}. \quad (3.12)$$

Однако слагаемым $\Delta \rho_{melt} V_{melt}$ можно пренебречь, поскольку плотность расплава в течение всего процесса роста меняется крайне незначительно. В результате условие сохранения суммарной массы расплава и кристалла приобретает вид

$$\rho_{melt} \Delta V_{melt} + \rho_{crist} \Delta V_{crist} = 0. \quad (3.13)$$

Обозначим s^* - параметрическую координату тройной точки в момент времени $t + \Delta t$ на линии $\tilde{r}(s, t + \Delta t), \tilde{z}(s, t + \Delta t)$. То есть, $\tilde{r}(s^*, t + \Delta t), \tilde{z}(s^*, t + \Delta t)$ и есть сама тройная точка. Тогда изменение объема кристалла можно записать как

$$\begin{aligned} \Delta V_{crist} = & \pi \int_0^{s^*} \tilde{r}^2(s, t + \Delta t) \frac{\partial \tilde{z}(s, t + \Delta t)}{\partial s} ds - \pi \int_0^1 r^2(s, t) \frac{\partial z(s, t)}{\partial s} ds + \\ & + \frac{\pi}{3} (z(1, t) + V_{pull} \Delta t - \tilde{z}(s^*, t + \Delta t)) \times \\ & \times (r^2(1, t) + \tilde{r}^2(s^*, t + \Delta t) + r(1, t) \tilde{r}(s^*, t + \Delta t)) \end{aligned} \quad (3.14)$$

Чтобы понять эту формулу достаточно вспомнить, что объем любого тела вращения

$$V = \pi \oint_{\partial V} r^2 dz, \quad (3.15)$$

где интегрирование по границе ∂V идет в направлении обратном направлению вращения часовой стрелки. Тогда объем кристалла в момент времени t можно записать как

$$V_{cryst}^t = \pi \int_{\partial \Gamma_{front}^t} r^2 dz + \pi \int_{\partial \Gamma_{surf}^t} r^2 dz, \quad (3.16)$$

где $\partial \Gamma_{front}^t$ - линия межфазной границы, а $\partial \Gamma_{surf}^t$ - свободная поверхность кристалла. Причем интегрирование вдоль $\partial \Gamma_{front}^t$ идет по направлению к тройной точке $(r(1, t), z(1, t))$, а интегрирование вдоль $\partial \Gamma_{surf}^t$ в направлении от нее (в тройной точке $\partial \Gamma_{front}^t$ и $\partial \Gamma_{surf}^t$ смыкаются).

За промежуток времени Δt кристалл не только меняет форму фронта, но и вытягивается вверх на длину $V_{pull} \Delta t$. Поэтому

$$\partial \Gamma_{surf}^{t+\Delta t} = \partial \Gamma_{pull}^t \cup \partial \Gamma_{new}^{\Delta t}, \quad (3.17)$$

где $\partial \Gamma_{pull}^t$ - это линия $\partial \Gamma_{surf}^t$, поднятая на расстояние $V_{pull} \Delta t$

$$\partial \Gamma_{pull}^t = \left\{ (r, z) \mid (r, z - V_{pull} \Delta t) \in \partial \Gamma_{surf}^t \right\}, \quad (3.18)$$

а $\partial \Gamma_{new}^{\Delta t}$ - это новый участок боковой поверхности кристалла, который есть ни что иное, как отрезок, соединяющий новую тройную точку $\tilde{r}(s^*, t + \Delta t), \tilde{z}(s^*, t + \Delta t)$ со старой $r(1, t), z(1, t)$, поднятой на все то же расстояние $V_{pull} \Delta t$

$$\partial \Gamma_{new}^{\Delta t} = \left\{ (r, z) \mid \begin{aligned} &(r, z) = \lambda(r(1, t), z(1, t) + V_{pull} \Delta t) + \\ &+ (1 - \lambda)(\tilde{r}(s^*, t + \Delta t), \tilde{z}(s^*, t + \Delta t)), 0 \leq \lambda \leq 1 \end{aligned} \right\}. \quad (3.19)$$

Несложно видеть, что

$$\pi \int_{\partial \Gamma_{pull}^t} r^2 dz = \pi \int_{\partial \Gamma_{surf}^t} r^2 dz, \quad (3.20)$$

а интеграл $\pi \int_{\partial \Gamma_{new}^{\Delta t}} r^2 dz$ равен объему усеченного конуса

$$\begin{aligned} \pi \int_{\partial \Gamma_{new}^{\Delta t}} r^2 dz &= \frac{\pi}{3} (z(1, t) + V_{pull} \Delta t - \tilde{z}(s^*, t + \Delta t)) \times \\ &\times (r^2(1, t) + \tilde{r}^2(s^*, t + \Delta t) + r(1, t) \tilde{r}(s^*, t + \Delta t)) \end{aligned} \quad (3.21)$$

Теперь можно записать

$$\begin{aligned} \Delta V_{cryst} &= V_{cryst}^{t+\Delta t} - V_{cryst}^t = \pi \int_{\partial \Gamma_{front}^{t+\Delta t}} r^2 dz - \pi \int_{\partial \Gamma_{front}^t} r^2 dz + \pi \int_{\partial \Gamma_{surf}^{t+\Delta t}} r^2 dz - \pi \int_{\partial \Gamma_{surf}^t} r^2 dz = \\ &= \pi \int_{\partial \Gamma_{front}^{t+\Delta t}} r^2 dz - \pi \int_{\partial \Gamma_{front}^t} r^2 dz + \pi \int_{\partial \Gamma_{new}^{\Delta t}} r^2 dz. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Учитывая, что

$$\pi \int_{\partial \Gamma_{front}^t} r^2 dz = \pi \int_0^1 r^2(s, t) \frac{\partial z(s, t)}{\partial s} ds, \quad (3.23)$$

а

$$\pi \int_{\partial \Gamma_{front}^{t+\Delta t}} r^2 dz = \pi \int_0^{s^*} \tilde{r}^2(s, t + \Delta t) \frac{\partial \tilde{z}(s, t + \Delta t)}{\partial s} ds, \quad (3.24)$$

получаем искомое соотношение для изменения объема кристалла за время Δt

$$\begin{aligned} \Delta V_{crist} = & \pi \int_0^{s^*} \tilde{r}^2(s, t + \Delta t) \frac{\partial \tilde{z}(s, t + \Delta t)}{\partial s} ds - \pi \int_0^1 r^2(s, t) \frac{\partial z(s, t)}{\partial s} ds + \\ & + \frac{\pi}{3} (z(1, t) + V_{pull} \Delta t - \tilde{z}(s^*, t + \Delta t)) \times \\ & \times (r^2(1, t) + \tilde{r}^2(s^*, t + \Delta t) + r(1, t) \tilde{r}(s^*, t + \Delta t)) \end{aligned} \quad (3.25)$$

Аналогичным образом вычисляется изменение объема расплава за промежуток времени Δt

$$\begin{aligned} \Delta V_{melt} = & \pi \int_0^1 r^2(s, t) \frac{\partial z(s, t)}{\partial s} ds + \pi \int_{\partial \Gamma_{men}^t} r^2 dz - \\ & - \pi \int_0^{s^*} \tilde{r}^2(s, t) \frac{\partial \tilde{z}(s, t)}{\partial s} ds - \pi \int_{\partial \Gamma_{men}^{t+\Delta t}} r^2 dz + \\ & + \frac{\pi}{3} (z_{men}^{t+\Delta t} - z_{men}^t) ((r_{men}^t)^2 + (r_{men}^{t+\Delta t})^2 + r_{men}^t r_{men}^{t+\Delta t}) \end{aligned} \quad (3.26)$$

где $\partial \Gamma_{men}^t$ ($\partial \Gamma_{men}^{t+\Delta t}$) - линия свободной поверхности расплава (линия мениска) в момент времени t (либо $t + \Delta t$), r_{men}^t, z_{men}^t ($r_{men}^{t+\Delta t}, z_{men}^{t+\Delta t}$) - координаты точки контакта свободной поверхности расплава с внутренней поверхностью тигля в момент времени t ($t + \Delta t$).

Причем интегрирование по поверхности мениска $\partial \Gamma_{men}$ идет в направлении от тройной точки. Следует отметить, что в проводившихся расчетах учитывался тот факт, что линия $\partial \Gamma_{men}$ не постоянна. Форма мениска находилась из решения капиллярного уравнения Лапласа, которое в самом общем виде может быть записано как

$$\frac{\gamma}{R_1} + \frac{\gamma}{R_2} + \rho g z = const, \quad (3.27)$$

где γ - коэффициент поверхностного натяжения, ρ - плотность, g - ускорение свободного падения, R_1 и R_2 - главные радиусы кривизны поверхности жидкости в

данной точке, а ось z направлена вертикально вверх. В осесимметричном случае это уравнение можно представить в следующем виде [82]

$$w'' r^* + w' (1 + w'^2) \pm 2 (d - w) (1 + w'^2)^{3/2} r^* = 0, \quad (3.28)$$

где $w = z/a$ и $r^* = r/a$ – безразмерные координаты, $w' = dw/dr^*$, $a = \sqrt{\frac{2\gamma}{\rho g}}$ –

капиллярная постоянная, а безразмерный параметр $d = Pa/2\gamma$ содержит давление P . Здесь важно отметить, что при переходе к записи капиллярного уравнения Лапласа в таком виде появляется дополнительное ограничение: поверхность мениска предполагается имеющей однозначные проекции на ось Or в каждой точке, а для многозначных менисков каждая ветвь описывается дифференциальным уравнением с разными знаками перед последним членом в зависимости от знака w' . Знак плюс соответствует части мениска с $w' < 0$, минус – соответственно с $w' > 0$.

Так как капиллярное уравнение Лапласа – дифференциальное уравнение второго порядка, то постановка краевой задачи для определения формы мениска требует задания двух граничных условий. Одно из них ставится в точке контакта свободной поверхности расплава и внутренней стенки тигля. Во всех вариантах расчетов там ставилось условие

$$w' = 0. \quad (3.29)$$

Второе условие – это условие в тройной точке, где мениск соприкасается с боковой поверхностью кристалла. При кристаллизации вещества в районе тройной точки (то есть, когда $V_{cryst}^t(r(1, t), z(1, t)) > 0$), необходимое граничное условие вытекало из постоянства угла роста. Угол роста – это угол между касательными, проведенными к мениску и боковой поверхности растущего кристалла. В итоге, в таком случае, новое положение тройной точки ищется из решения уравнения от одного неизвестного параметра s^* :

$$\rho_{melt} \Delta V_{melt}(s^*) + \rho_{cryst} \Delta V_{cryst}(s^*) = 0. \quad (3.30)$$

Решение данного уравнения не представляет особой сложности и практически не занимает времени по отношению ко всей остальной задаче. В наших расчетах для нахождения s^* использовались методы хорд и дихотомии (деление отрезка пополам). После того, как значение параметра s^* найдено, задается параметрическая кривая, описывающая положение фронта в момент времени $t + \Delta t$

$$\begin{aligned} r(s, t + \Delta t) &= \tilde{r}(s/s^*, t + \Delta t) \\ z(s, t + \Delta t) &= \tilde{z}(s/s^*, t + \Delta t) \end{aligned} \quad (3.31)$$

Случай плавления вещества в районе тройной точки (когда $V_{cryst}^t(r(1, t), z(1, t)) \leq 0$) – особый. Условие постоянства угла роста тогда может и не выполняться. Поэтому новое положение тройной точки находится из других соображений. Поскольку кристалл в тройной точке плавиться, то кривая $\tilde{r}(s, t + \Delta t), \tilde{z}(s, t + \Delta t)$ пересекает $\partial\Gamma_{pull}^t$ -линию свободной поверхности кристалла в момент времени t , поднятую на расстояние $V_{pull} \Delta t$. Именно точка пересечения $\tilde{r}(s, t + \Delta t), \tilde{z}(s, t + \Delta t)$ с $\partial\Gamma_{pull}^t$ и выбирается в качестве нового положения тройной точки $\tilde{r}(s^*, t + \Delta t), \tilde{z}(s^*, t + \Delta t)$ в момент времени $t + \Delta t$. Так же как и раньше, параметрическая кривая нового фронта

$$\begin{aligned} r(s, t + \Delta t) &= \tilde{r}(s/s^*, t + \Delta t) \\ z(s, t + \Delta t) &= \tilde{z}(s/s^*, t + \Delta t) \end{aligned} \quad (3.32)$$

Важно отметить, что, несмотря на то, что положение тройной точки при таком подходе искать не надо, уравнение (3.13) баланса масс кристалла и расплава решать приходится. Дело в том, что из-за невыполнения условия постоянства угла роста в тройной точке, форму свободной поверхности расплава $\partial\Gamma_{men}^{t+\Delta t}$ необходимо искать не только из решения капиллярного уравнения Лапласа, но и из условия сохранения суммарной массы расплава и кристалла. При этом в качестве варьируемого параметра выступает угол между касательными, проведенными к мениску и боковой поверхности растущего кристалла. Указанный угол определяется высотой мениска, которая, в свою очередь, зависит от z -координаты тройной точки и положения уровня расплава.

Изредка оказывается так, что решения данной задачи не существует. В таком случае, приходится допускать, что тройная точка может лежать не только на пересечении $\tilde{r}(s, t + \Delta t), \tilde{z}(s, t + \Delta t)$ с $\partial\Gamma_{pull}^t$, но и подниматься выше вдоль боковой поверхности кристалла. Это соответствует случаю, когда уровень расплава так резко повысился, что подтопил кристалл, не успев его расплавить.

3.4.2. Улучшенный алгоритм

По ходу применения описанного выше подхода выявились его недостатки. Главный из них заключался в необходимости использовать слишком маленькие шаги по времени Δt при вычислении перемещения фронта. Попытки увеличить Δt приводили к образованию на фронте так называемой «пилы» (рис. 3.3) - фронт терял гладкость и складывался в «гармошку». «Пила» имела исключительно сеточный характер и пропадала с уменьшением шага Δt . Причиной устойчивости дефекта типа «пила» служит способ расчета потоков на границах в использовавшейся для моделирования глобального

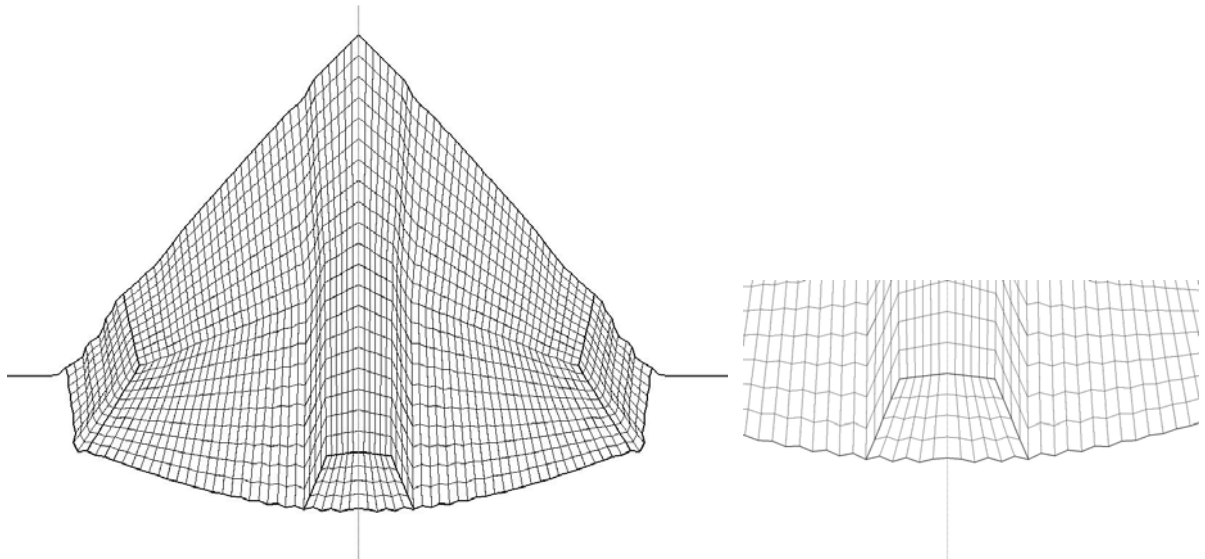


Рис. 3.3. Слева - расчетный кристалл и сетка. Справа – увеличенная центральная часть с дефектом фронта типа «пила»

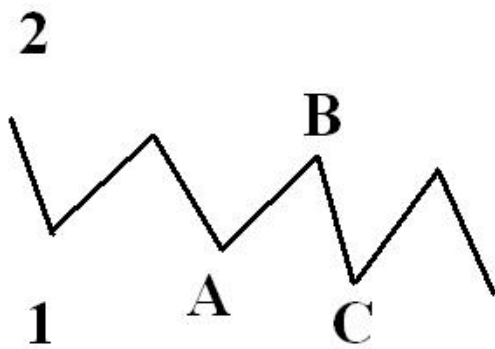


Рис. 3.4. Схематическое изображение межфазной границы между средами 1 и 2 в виде «пилы»

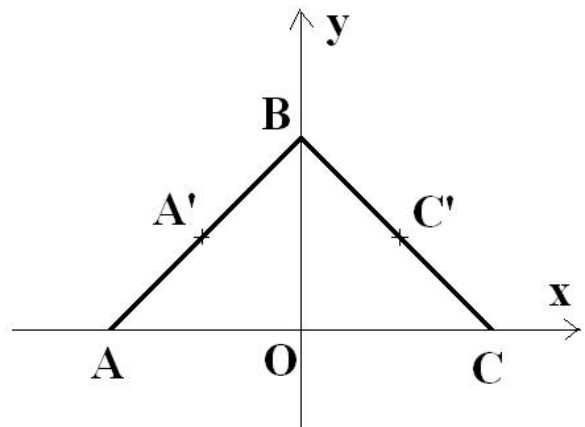


Рис. 3.5. Сегмент «пилы»

теплообмена программе FlowModule пакета CGSim [69]. Потоки вычисляются не в узлах расчетной сетки, а на гранях. При этом величина потока соответствует некому осредненному по грани значению. В реальности возникновению подобной «пилы» на фронте препятствует то обстоятельство, что появление «пилы» должно приводить к дополнительной неравномерности в распределении тепловых потоков вдоль нее. Потоки на концах «зубов» «пилы» (около выступающих участков) сильно отличается от потоков около «корней» (то есть, впадин). Чтобы понять, как именно распределяются потоки по грани, рассмотрим отдельно один сегмент ABC фронта изображенного на рис. 3.4. Поскольку в нашем алгоритме узлы сетки на межфазной границе располагаются равномерно, то $|AB| = |BC|$. Удобно ввести локальные оси координат x и y так, как это

изображено на рис. 3.5. Ось x направлена вдоль фронта, а ось y – по нормали к нему. Рассмотрим модельную задачу кондуктивного теплообмена в треугольнике ABC , в которой на внешней границе AC задан постоянный поток q , а на участках межфазной границы AB и BC ставится изотермическое условие:

$$\begin{aligned} \Delta T &= 0, (x, y) \in \Delta ABC \\ \left. \frac{dT}{dn} \right|_{AC} &= q, \\ T|_{AB} &= T_0 \\ T|_{BC} &= T_0 \end{aligned} \quad (3.33)$$

где $\frac{dT}{dn}$ - это производная от температуры по внешней, относительно треугольника ABC ,

нормали. В качестве параметра, характеризующего неравномерность распределения потока по грани, рассмотрим отношение тепловых потоков, проходящих через всю грань AB , к тепловым потокам, проходящим через половину грани $A'B$

$$K^{corr} = \frac{\int_{AB} \frac{dT}{dn} dl}{\int_{A'B} \frac{dT}{dn} dl}. \quad (3.34)$$

Отметим, кстати, что в силу симметрии задачи $\int_{AB} \frac{dT}{dn} dl = \int_{BC} \frac{dT}{dn} dl$, а

$\int_{A'B} \frac{dT}{dn} dl = \int_{BC'} \frac{dT}{dn} dl$. Кроме того, параметр K^{corr} не зависит от q и T_0 , а зависит только от

$h = |OB|/|OA|$. Очевидно, что при $h = 0$ $K^{corr} = 2$, а при h , стремящемся к бесконечности, K^{corr} также неограниченно растет (поскольку все тепло из треугольника ABC уходит через AA' и CC'). Для значения $h = 1$ было найдено аналитическое решение. В этом случае точное значение $K^{corr} = 4$. Для остальных значений h зависимость $K^{corr}(h)$ была подобрана путем численного эксперимента, в котором для различных h находилось решение исходной задачи теплопроводности.

Оказалось, что при не слишком больших значениях h изменение функции $K^{corr}(h)$ можно аппроксимировать выражением

$$K^{corr}(h) = 2(1 + h^2). \quad (3.35)$$

В таблице 3.1 представлены результаты численного эксперимента в сопоставлении с данной формулой.

Таблица 3.1. Найденная численно зависимость $K^{corr}(h)$ в сравнении с аппроксимационной формулой $2(1+h^2)$

h	K^{corr}	$2(1+h^2)$	Относительная ошибка	h	K^{corr}	$2(1+h^2)$	Относительная ошибка
0.0	2	2	0	0.8	3.304	3.28	0.0074
0.1	2.042	2.02	0.011	0.9	3.632	3.62	0.0033
0.2	2.106	2.08	0.012	1.0	4	4	0
0.3	2.213	2.18	0.015	1.1	4.412	4.42	0.0019
0.4	2.359	2.32	0.017	1.2	4.871	4.88	0.0019
0.5	2.543	2.5	0.017	1.3	5.381	5.38	$2.5 \cdot 10^{-4}$
0.6	2.761	2.72	0.015	1.4	5.948	5.92	0.0047
0.7	3.015	2.98	0.012	1.5	6.574	6.5	0.011

Видно, что относительная ошибка не превышает 2% при $h \leq 1.5$. Отметим, что значение h близкое к единице – это уже очень сильная «пила» на фронте, при которой задачу следует останавливать. Поэтому можно утверждать, что в диапазоне реальных значений h формула $K^{corr}(h) = 2(1+h^2)$ дает очень хорошее приближение.

Параметр K^{corr} показывает характер распределения по грани кондуктивного потока в среде 1. Если обозначить среднюю плотность потока по грани (например, АВ или ВС) как q^{avr} , то средняя плотность потока по той половине грани, которая ближе к острию «зуба» АВС (то есть, к точке В) составит

$$q_1 = \frac{2q^{avr}}{K^{corr}} \approx \frac{q^{avr}}{1+h^2}, \quad (3.36)$$

а по второй половине, которая расположена у основания «зуба» (точки А или С)

$$q_2 = \left(2 - \frac{2}{K^{corr}}\right) q^{avr} \approx \frac{1+2h^2}{1+h^2} q^{avr}. \quad (3.37)$$

Эти формулы легко получить, если учесть, что $\int_{AB} \frac{dT}{dn} dl = q^{avr} |AB|$, $\int_{A'B} \frac{dT}{dn} dl = q_1 |A'B|$,

$$\int_{A'A} \frac{dT}{dn} dl = q_2 |A'A|, \quad |A'A| = |A'B| = \frac{1}{2} |AB| \quad \text{и} \quad \int_{AB} \frac{dT}{dn} dl = \int_{A'B} \frac{dT}{dn} dl + \int_{A'A} \frac{dT}{dn} dl.$$

Введем поправочные коэффициенты

$$K_B^+ = \frac{1}{1+h^2} \quad (3.38a)$$

и

$$K_B^- = 2 - K_B^+ = \frac{1+2h^2}{1+h^2} \quad (3.38b)$$

(нижний индекс B подчеркивает тот факт, что они относятся к точке В). Теперь можно было бы при вычислении скорости кристаллизации в узле В использовать поток q_B , величина которого найдена не по усредненным по граням АВ и ВС значениям плотности кондуктивного потока из среды 1 q^{AB} и q^{BC} , а по скорректированным значениям $K_B^+ q^{AB}$ и $K_B^+ q^{BC}$.

То есть, если раньше кондуктивный поток q_B из среды 1 в точке В вычислялся по формуле

$$q_B = \frac{|AB| q^{AB} + |BC| q^{BC}}{|AC|} = \frac{\sqrt{1+h^2}}{2} (q^{AB} + q^{BC}), \quad (3.39)$$

то теперь

$$q_B = \frac{|AB| K_B^+ q^{AB} + |BC| K_B^+ q^{BC}}{|AC|} = \frac{\sqrt{1+h^2}}{2} K_B^+ (q^{AB} + q^{BC}). \quad (3.40)$$

Однако подобный подход приведет к появлению систематической ошибки для ровных, но не прямых фронтов (например, для тех, у которых значение параметра K_B^+ практически не меняется от точки к точке). Можно сказать, что величина K_B^+ характеризует кривизну фронта в окрестности точки В, которая, в свою очередь, влияет на распределение потоков по грани АВ. Но на это распределение влияет также и кривизна фронта в точке А! Поэтому в расчетах используется более сложный вариант использования поправочных коэффициентов.

Прежде всего, для i -ого узла $K_i^+ = \frac{1}{1+h_i^2}$ только тогда, когда этот узел лежит на острие условного «зуба», то есть, выдвинут наружу относительно своих соседей справа и слева (как точка В на рис. 3.4). В противном случае (узлы А и С на рис. 3.4) $K_i^+ = \frac{1+2h_i^2}{1+h_i^2}$.

Второй поправочный коэффициент K_i^- однозначно связан с K_i^+ : $K_i^- = 2 - K_i^+$.

После определения поправочных коэффициентов во всех узлах приступаем к нахождению скоростей кристаллизации. Обозначим как q^i величину среднего по площади кондуктивного потока из среды 1 на грани, соединяющий i -ый и $(i+1)$ -ый узлы. Тогда при вычислении скорости кристаллизации в i -ом узле вместо q^i используется значение

$$\frac{1}{2} (K_i^+ + K_{i+1}^-) q^i, \quad (3.41a)$$

а вместо q^{i-1}

$$\frac{1}{2}(K_i^+ + K_{i-1}^-)q^i. \quad (3.41b)$$

То есть, в качестве величины кондуктивного потока q_i в i -ом узле, используется значение

$$q_i = \frac{\sqrt{1+h_i^2}}{2} \left(\frac{1}{2}(K_i^+ + K_{i+1}^-)q^{AB} + \frac{1}{2}(K_i^+ + K_{i-1}^-)q^{BC} \right). \quad (3.42)$$

При таком способе коррекции, на ровных участках фронта с постоянной кривизной коррекции тепловых потоков вообще не происходит (поскольку тогда K_i^+ и K_i^- не зависят от i , и их полусумма всегда равна 1). Для классической «пилы», наоборот, $K_i^+ \approx K_{i+1}^-$ и поэтому кондуктивные потоки подправляются сообразно степени искривления фронта.

Замечание. В приведенных выше рассуждениях, все время говорилось о кондуктивных потоках в среде 1 (рис. 3.4). Но есть еще и среда 2, для которой также следует применять корректировку кондуктивных потоков. При этом поправочные коэффициенты K_i^+ и K_i^- поменяются местами, поскольку тот узел, который для среды 1 являлся острием «зуба» «пилы», для среды 2 будет уже основанием этого «зуба».

Введение процедуры корректировки потоков, позволяет перейти к динамическому моделированию процесса Чохральского со значительно большими временными шагами. Для этого используется подход, основанный на методе Рунге-Кутты четвертого порядка^{*}. Изменения касаются построения кривой $\tilde{r}(s, t + \Delta t), \tilde{z}(s, t + \Delta t)$ при переходе на новый временной шаг. Если раньше для этого использовались соотношения (3.10), то теперь поиск $\tilde{r}(s, t + \Delta t), \tilde{z}(s, t + \Delta t)$ выполняется в 4 этапа.

На первом этапе строится промежуточная кривая

$$\begin{aligned} \tilde{r}_1(s, t + \Delta t/2) &= r(s, t) + V_1(r(s, t), z(s, t))n_r(s, t)\frac{\Delta t}{2} \\ \tilde{z}_1(s, t + \Delta t/2) &= z(s, t) + V_1(r(s, t), z(s, t))n_z(s, t)\frac{\Delta t}{2} + V_{pull}\frac{\Delta t}{2}, \end{aligned} \quad (3.43)$$

^{*} Метод Рунге-Кутты четвертого порядка широко применяется для решения задач Коши вида $y' = f(x, y)$, $y(x_0) = y_0$. Значение в каждой последующей точке вычисляется по формуле $y_{n+1} = y_n + (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)\Delta x/6$, где $k_1 = f(x_n, y_n)$, $k_2 = f(x_n + \Delta x/2, y_n + k_1\Delta x/2)$, $k_3 = f(x_n + \Delta x/2, y_n + k_2\Delta x/2)$, $k_4 = f(x_n + \Delta x, y_n + k_3\Delta x)$, Δx - шаг сетки по x , y_n соответствует $y(x_n)$, $x_n = x_0 + n\Delta x$.

где $V_1(r(s, t), z(s, t))$ это скорость кристаллизации на старом фронте $r(s, t)$, $z(s, t)$ при поправочных коэффициентах K_i^+ и K_i^- (которые зависят только от формы фронта), соответствующих старому фронту.

Затем строится вторая промежуточная кривая

$$\begin{aligned}\tilde{r}_2(s, t + \Delta t/2) &= r(s, t) + V_2(r(s, t), z(s, t))n_r(s, t)\frac{\Delta t}{2} \\ \tilde{z}_2(s, t + \Delta t/2) &= z(s, t) + V_2(r(s, t), z(s, t))n_z(s, t)\frac{\Delta t}{2} + V_{pull}\frac{\Delta t}{2},\end{aligned}\quad (3.44)$$

где V_2 - это скорость кристаллизации, найденная по старым тепловым потокам (которые были на фронте $r(s, t)$, $z(s, t)$), но с новыми поправочными коэффициентами, соответствующими фронту $\tilde{r}_1(s, t + \Delta t/2)$, $\tilde{z}_1(s, t + \Delta t/2)$. Далее снова повторяем эту процедуру, но уже с шагом Δt

$$\begin{aligned}\tilde{r}_3(s, t + \Delta t) &= r(s, t) + V_3(r(s, t), z(s, t))n_r(s, t)\Delta t \\ \tilde{z}_3(s, t + \Delta t) &= z(s, t) + V_3(r(s, t), z(s, t))n_z(s, t)\Delta t + V_{pull}\Delta t,\end{aligned}\quad (3.45)$$

где V_3 - это скорость кристаллизации с поправочными коэффициентами, соответствующими фронту $\tilde{r}_2(s, t + \Delta t/2)$, $\tilde{z}_2(s, t + \Delta t/2)$. Поправочные коэффициенты только что найденного вспомогательного фронта $\tilde{r}_3(s, t + \Delta t)$, $\tilde{z}_3(s, t + \Delta t)$ обеспечивают еще один набор скоростей кристаллизации V_4 .

После этого, для $0 \leq s \leq 1$, строится кривая $\tilde{r}(s, t + \Delta t)$, $\tilde{z}(s, t + \Delta t)$:

$$\begin{aligned}\tilde{r}(s, t + \Delta t) &= r(s, t) + V_{crys}^t(r(s, t), z(s, t))n_r(s, t)\Delta t \\ \tilde{z}(s, t + \Delta t) &= z(s, t) + V_{crys}^t(r(s, t), z(s, t))n_z(s, t)\Delta t + V_{pull}\Delta t,\end{aligned}\quad (3.46)$$

где $V_{crys}^t = \frac{1}{6}(V_1 + 2V_2 + 2V_3 + V_4)$. Для случая $s > 1$, используются те же экстраполяционные формулы, что и раньше.

Успешное применение метода Рунге-Кутты в процедуре корректировки потоков дало основание перенести этот опыт и на алгоритм построения нового фронта. При этом схема алгоритма почти не отличается от той, что была приведена выше, за исключением того, что теперь V_j ($j = 1, \dots, 4$) - это скорость кристаллизации, найденная не по старым тепловым потокам, а по потокам на фронте $\tilde{r}_{j-1}(s)$, $\tilde{z}_{j-1}(s)$ (где $\tilde{r}_0(s)$, $\tilde{z}_0(s)$ соответствует $r(s, t)$, $z(s, t)$ - линии межфазной границы в момент времени t). При этом V_1 соответствует моменту времени t , V_2 и V_3 - моменту $t + \Delta t/2$, а V_4 - времени $t + \Delta t$.

3.5. Корректировка сетки по мере роста кристалла

При прямом моделировании роста кристаллов встает проблема модификации расчетной сетки. Особенно это актуально для расчетов в рамках описанной динамической модели, поскольку в этих процессах форма кристалла не фиксирована и может претерпевать существенные изменения по ходу роста. Некоторые исследователи [43], в том числе и для того, чтобы упростить решение задачи перестроения сетки, полагают форму растущего кристалла заданной. Однако за это приходится платить тем, что перед прямым моделированием необходимо решать дополнительную сложную задачу, в которой вычисляется изменение мощности нагревателя с течением времени. Вдобавок ко всему, при таком подходе теряется важная информация о влиянии системы управления на процесс роста. Поэтому область применения подобного алгоритма весьма ограничена, ведь даже найденный из решения обратной задачи закон изменения мощности нагревателя нельзя напрямую использовать в реальном процессе.

Тем не менее, данная схема имеет свой очевидный плюс – при известной и достаточно ровной форме кристалла, можно построить такую сетку, которая будет растягиваться или сужаться, не вырождаясь по мере роста кристалла.

Другой подход состоит в построении внутри некоторых блоков с наиболее изменчивой геометрией (например, в кристалле) неструктурированных треугольных сеток. Такой подход представляется вполне оправданным, если, во-первых, время, затрачиваемое на построение новых сеток, не приводит к сильному замедлению работы всего алгоритма. Во-вторых, необходимо наличие эффективного алгоритма переноса решения на новую сетку.

К сожалению, использовавшаяся для решения задачи глобального теплообмена программа Flow Module [69], позволяет решать систему только на структурированных сетках. Поэтому вариант с построениями неструктурированных сеток не мог быть задействован.

Так как во всех рассматриваемых задачах используется вариант метода Чохральского с неподвижным тиглем (в отличие от рассмотренного в [43] и [44]), то при моделировании роста кристалла необходимо отслеживать изменение как формы кристалла, так и формы мениска и уровня расплава в тигле. Важно отметить, что во всех расчетах форма кристалла не полагалась заданной, а изменялась в зависимости от

тепловых условий на фронте кристаллизации. Это делало задачу подгонки расчетной сетки под геометрию системы еще более сложной.

Алгоритм деформации сетки по мере роста кристалла основан на особенностях ее организации в программе Flow Module [69]. В данной программе используется разбиение, составленное из блоков со структурированной четырехугольной сеткой. Характер распределения узлов (равномерно, либо с участками сгущения и разряжения) по границам каждого блока задается при построении, а положение внутренних узлов определяется с помощью алгоритма трансфинитной интерполяции. Границы блоков состоят из линейных участков. Концы каждого линейного участка – это так называемые ключевые точки. Перестроение сетки основано на смещении этих самых ключевых точек. После перемещения ключевых точек, по ним строятся новые границы блоков, по границам распределяются узлы сетки (причем характер распределения остается неизменным), а узлы на границах блоков определяют расположение всех остальных узлов.

При смещении ключевых точек их разбивают на четыре подгруппы:

- 1) «свободные» точки. На их перемещения не накладывается никаких ограничений. Это ключевые точки, которые, во-первых, не лежат на внешней границе рассматриваемой области, а во-вторых, все смежные с ними блоки соответствуют одному и тому же материалу.
- 2) «неподвижные» точки. Эти точки либо лежат на внешней границе рассматриваемой области, либо соприкасаются с блоками, состоящими из трех и более материалов. Также к «неподвижным» относятся те точки, которые являются точками излома границы между двумя разными материалами.
- 3) «полуподвижные» точки – точки с одной степенью свободы. Они могут смещаться только вдоль какого-то одного направления. «Полуподвижные» точки принадлежат прямолинейным участкам границ между двумя разными материалами и могут смещаться только вдоль этих границ.
- 4) «особые» точки. Это точки лежащие на границах кристалл-газ, кристалл-расплав и расплав-газ. С физической точки зрения именно эти поверхности определяют геометрию системы кристалл-расплав и только эти поверхности меняют свою форму в процессе роста.

Смещение $\Delta \mathbf{r} = \begin{pmatrix} \Delta r \\ \Delta z \end{pmatrix}$ «особых» точек определяется на каждом временном шаге при

моделировании эволюции формы кристалла и мениска. При этом «особые» точки раскидываются по границам кристалл-газ, кристалл-расплав и расплав-газ равномерно по длине. Таким образом

$$\Delta \mathbf{r}_j = \mathbf{r}_j^{new} - \mathbf{r}_j^{old}, \text{ для } j \in S_{special}, \quad (3.47)$$

где $S_{special}$ - множество «особых» точек.

Смещение остальных точек находится из решения системы

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{r}_j &= \sum_{i \in Adj(j)} \Delta \mathbf{r}_i \left| \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j \right|^{-p} / \sum_{i \in Adj(j)} \left| \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j \right|^{-p}, \quad j \in S_{free} \\ \Delta \mathbf{r}_j &= \left(\boldsymbol{\tau}_j \cdot \sum_{i \in Adj(j)} \Delta \mathbf{r}_i \left| \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j \right|^{-p} / \sum_{i \in Adj(j)} \left| \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j \right|^{-p} \right) \boldsymbol{\tau}_j, \quad j \in S_{limited}, \\ \Delta \mathbf{r}_j &\equiv 0, \quad j \in S_{fixed} \end{aligned} \quad (3.48)$$

где $Adj(j)$ - множество узлов смежных с j -ым (то есть, для которых существует сегмент границы, непосредственно соединяющий их с j -ым узлом), S_{free} , $S_{limited}$ и S_{fixed} – это соответственно множества «свободных», «полуподвижных» и «неподвижных» узлов, а $\boldsymbol{\tau}_j$ - единичный вектор, определяющий допустимое направление смещения для «полуподвижного» узла j . Параметр p определяется пользователем и задает то, насколько сильно «привязана» каждая ключевая точка к своим соседям.

Отметим, что в любой момент расчет может быть остановлен и пользователь имеет возможность изменить сетку по своему усмотрению. Это бывает весьма удобно, поскольку размеры некоторых блоков очень сильно меняются по ходу роста, и нет нужды использовать одинаковую сетку для маленького кристалла в начале разращивания и для большого кристалла в самом конце процесса роста. Причем пользователь может изменить не только масштаб сетки (сделать ее более мелкой или более крупной), но и по-новому разбить сетку на структурированные блоки.

3.7. Выводы

Разработана полностью нестационарная модель процесса Чохральского, которая позволяет отслеживать на компьютере эволюцию формы кристалла с течением времени. В рамках данной динамической модели предложена модель автоматического управления ростовым процессом на основании показаний датчика веса. Это дает в руки исследователю чрезвычайно эффективный инструмент, позволяющий оценивать, в том числе и влияние работы автоматической системы управления на процессы, протекающие в тепловом узле.

Описание динамической модели опубликовано в работах [64], [65], [68].

4. Исследование явления инверсии фронта кристаллизации при выращивании кристаллов гадолиний-галлиевого граната ($\text{Gd}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$)

Данный раздел диссертации посвящен тестированию приведенной в предыдущей главе динамической модели процесса Чохральского на примере хорошо известного ростового процесса. В этом качестве выступает процесс Чохральского с высокими температурными градиентами, с помощью которого в реальной кристаллизационной установке в НИИ Материаловедения г. Зеленоград выращивают крупногабаритные кристаллы гадолиний-галлиевого граната $\text{Gd}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$ (ГГГ). Выбор ГГГ в качестве исследуемого кристалла объяснялся тем, что, во-первых, имеется довольно много информации об его свойствах, а, во-вторых, этот кристалл часто рассматривался в задачах моделирования [13], [83], [19]. Основное внимание в данном исследовании было уделено влиянию радиационных свойств свободной поверхности кристалла и конвекции Марангони на вариации формы межфазной границы, а также рассмотрению процесса инверсии фронта кристаллизации на стадии разращивания кристалла ГГГ.

Инверсия фронта кристаллизации является важным элементом процесса выращивания, поскольку в ее результате форма фронта быстро меняется от сильно выпуклой в расплав до почти плоской. Причина инверсии известна давно и объясняется перестройкой течения расплава в подкристальной области. В расплаве борются два типа конвекции: свободная, связанная с перепадом температуры в тигле, и вынужденная, вызванная вращением кристалла. Первая вместе с отводом тепла от фронта кристаллизации посредством излучения стремится прогнуть фронт в расплав, а вторая, наоборот, сделать его плоским. На начальной стадии процесса вытягивания, когда радиус кристалла еще достаточно мал, доминирует свободная конвекция. Однако по мере увеличения радиуса кристалла влияние вынужденной конвекции возрастает и, начиная с некоторого момента, она становится определяющей в подкристальной области. Указанная перестройка течения сопровождается кардинальным изменением формы фронта, и это изменение может происходить достаточно быстро. В принципе, инверсию можно осуществить либо путем увеличения скорости вращения кристалла при неизменном его диаметре, либо в процессе разращивания кристалла, когда его радиус увеличивается при неизменной скорости вращения. Обычно подразумевается, что оба процесса инверсии практически эквивалентны. Однако на самом деле это не так. В первом варианте инверсия происходит между двумя квазистационарными состояниями системы при

неизменной внешней форме кристалла, и поэтому нет необходимости рассматривать инверсию как процесс. Во втором, который является более технологичным, инверсия оказывается принципиально нестационарной, поскольку в результате разрачивания меняется форма кристалла и перемещение фронта становится зависящим от предыстории процесса. Очевидно, что для моделирования первый случай является существенно более простым, и поэтому квазистационарный подход использовался практически во всех работах, посвященных данному вопросу (см., например, [13], [6], [84]), включая даже те, где рассматривалось разрачивание кристалла [83], [19]. Правда, в работе [19] была опробована также и нестационарная модель, однако, результат был достигнут ценой чрезвычайно больших затрат компьютерного времени и лишь для частного случая с одним фиксированным углом разрачивания. Необходимо отметить, что применительно к полупроводникам подобная задача с изменением формы кристалла рассматривалась в работах [43], [44]. Однако, как уже указывалось выше, для полупроводников эта задача оказывается существенно более простой, поскольку отсутствует перенос излучения в кристалле, а влияние конвекции на форму межфазной границы является малым.

4.1. Описание ростового процесса и теплового узла

Схема ростовой установки, используемой в НИИ Материаловедения в г. Зеленограде для выращивания крупногабаритных гранатов, показана на рис. 4.1. Следует отметить, что как ростовая установка, так и сам кристалл обладают выраженной цилиндрической симметрией, поэтому рассмотрение задачи в осесимметричном приближении выглядит вполне оправданным (хотя нельзя исключать возможность того, что конвекция в расплаве носит трехмерный характер).

Диаметр и высота тигля равны 15 см. Индукционный нагрев тигля моделировался путем задания постоянной плотности тепловыделения в его боковой стенке и пропорциональной радиусу в дне тигля. Теплообмен между деталями установки осуществлялся как кондуктивным, так и радиационным путем, а сами детали полагались непрозрачными и диффузно отражающими. Расплав также считался непрозрачным. Его коэффициент черноты был равен 0.85, теплопроводность 4 Вт/(м К), теплоемкость 586 Дж/кг, коэффициент объемного расширения $2.46 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$, а кинематическая вязкость 0.064 см²/с. Перепад температур в расплаве достаточно велик, поэтому полагалось, что конвекция носит турбулентный характер. Кроме того, учитывалась конвекция Марангони, вызванная зависимостью коэффициента поверхностного натяжения расплава от температуры.

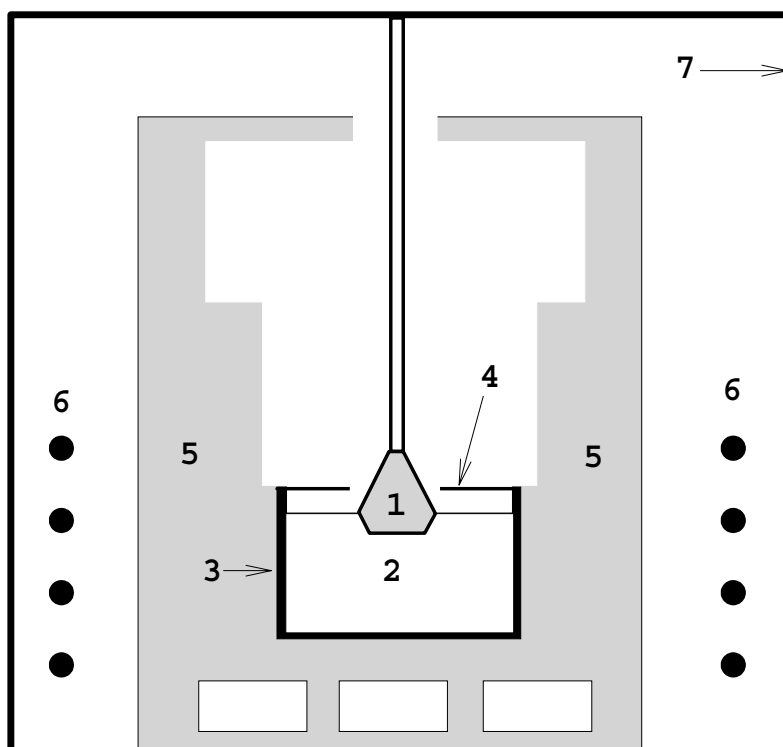


Рис. 4.1. Схема ростовой установки для выращивания кристаллов ГГГ. 1 – кристалл, 2 – расплав, 3 – иридиевый тигель, 4 – кольцевой экран, 5 – комбинированная многослойная изоляция теплового узла, 6 – индуктор, 7 – водоохлаждаемая стенка камеры

Теплопроводность кристалла полагалась равной 20 Вт/(м К) , а сам он рассматривался как полупрозрачное тело с показателем преломления $n = 1.8$ и двумя полосами поглощения $0 < \lambda < 4 \text{ мкм}$ и $\lambda > 4 \text{ мкм}$, где λ – длина волны. В первой полосе кристалл считался прозрачным с коэффициентом поглощения 0.35 см^{-1} , а во второй полосе непрозрачным, со степенью черноты поверхности 0.87 . Необходимо отметить, что при температуре плавления кристалла ГГГ 2023 К более 85% излучения в спектре черного тела сосредоточено в первой полосе.

Моделирование процесса роста кристалла производилось с помощью описанной в главе 3 динамической модели процесса Чохральского, в которой временные вариации межфазной границы определялись тепловыми потоками на фронте кристаллизации и теплотой плавления кристалла ГГГ 2.85 кДж/см^3 , а изменение формы боковой поверхности находилось из условия постоянства угла роста, равного 20 градусам, и условия сохранения суммарной массы кристалла и расплава.

На протяжении всего процесса роста кристалл вытягивался вверх с постоянной скоростью 7 мм/ч и постоянной скоростью вращения 21.5 оборот в минуту. Начальное значение мощности нагревателя Q подбиралось таким образом, чтобы сразу после

затравления форма кристалла, как можно меньше отклонялась от заданной, а дальнейшее изменение Q с течением времени отслеживалось путем моделирования работы системы управления по весовому датчику на основе ПИД-регулятора:

$$\frac{dQ}{dt} = K_P \frac{de}{dt} + K_I e + K_D \frac{d^2e}{dt^2}. \quad (4.1)$$

Здесь K_P , K_I и K_D – это соответственно пропорциональный, интегральный и дифференциальный коэффициенты управления, а e – сигнал ошибки:

$$e = \frac{dF}{dt} - \frac{dG}{dt}, \quad (4.2)$$

где G – задаваемое изменение веса кристалла со временем, а F – показание весового датчика, то есть вес кристалла с учетом веса мениска и выталкивающей силы, действующей на погруженную часть кристалла. Зависимость $G(t)$ вычислялась исходя из заданной формы боковой поверхности кристалла, которая соответствовала кристаллу с конической верхней частью, плавно перетекающей в цилиндрическую в процессе роста. Моделировался ростовой процесс с углом раствора конуса разращивания равным 90° и диаметром цилиндрической части 76 мм.

4.2. Влияние радиационных свойств свободной поверхности кристалла и конвекции Марангони на форму межфазной границы

Характер отражения излучения на поверхности кристалла зависит от многих факторов. Так, при выращивании тугоплавких кристаллов на их поверхности может осаждаться депозит – материал, испаряющийся с конструктивных элементов ростовой камеры и со свободной поверхности расплава. Также под действием высокой температуры может происходить травление поверхности кристалла. Таким образом, поверхность кристалла может быть как зеркально отражающей, так и диффузной или покрытой депозитом.

На рис. 4.2 представлены результаты расчетов, проведенных в предположении о различных радиационных свойствах поверхности кристалла и при разных значениях коэффициента Марангони Ma . Эффект Марангони может существенно усилить роль естественной конвекции при вытягивании кристаллов из расплава. Поэтому представляет интерес оценка степени его влияния на ростовой процесс.

Предложенные результаты соответствуют решениям стационарных задач, в которых форма кристалла считалась заданной (конус с диаметром основания 6 см и углом раствора 90 градусов), а форма фронта кристаллизации соответствует стационарной форме фронта при скорости вытягивания кристалла из расплава 7 мм/ч (см. Приложение В).

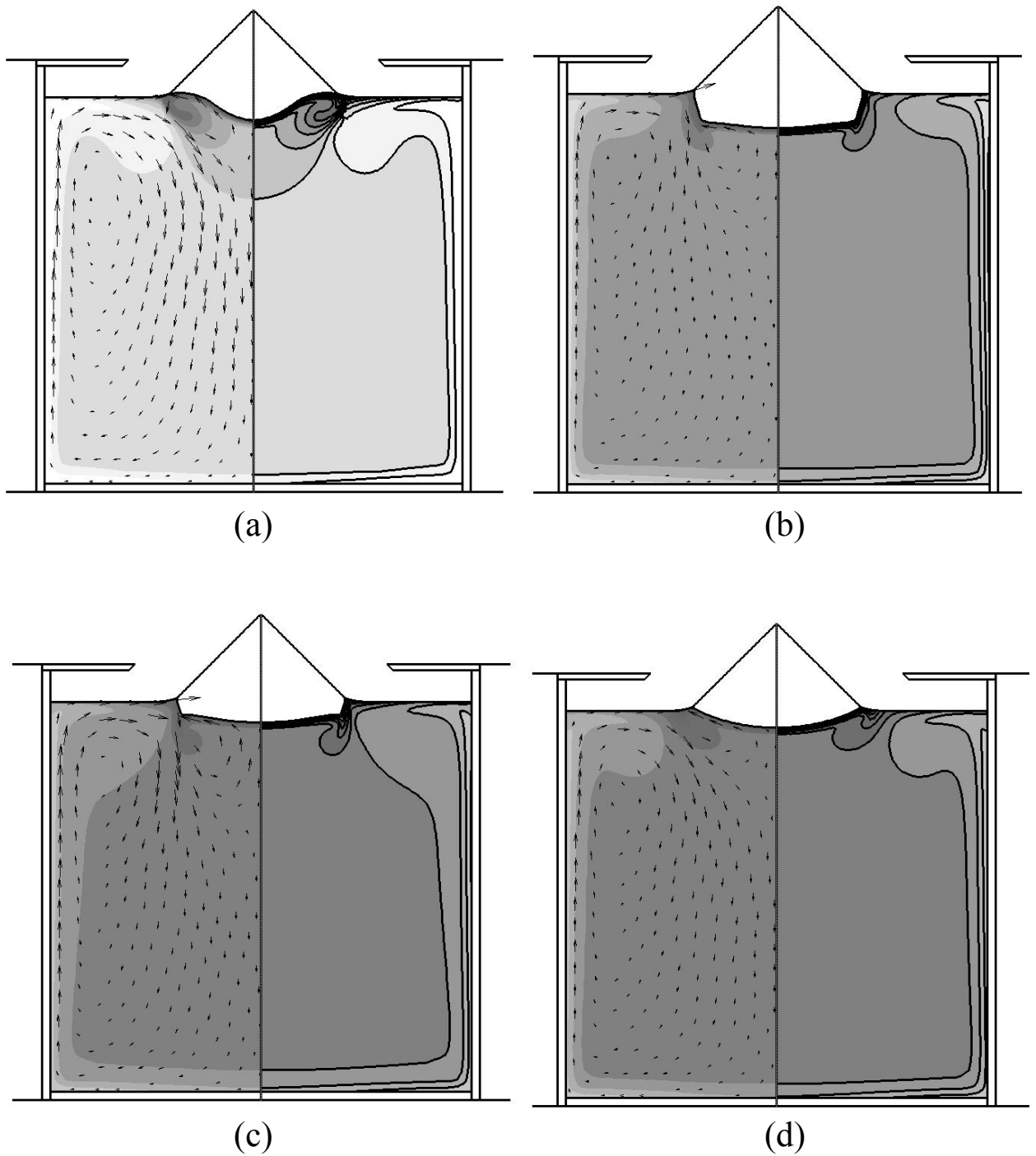


Рис. 4.2. Формы фронта кристаллизации и течения в расплаве. (а) - случай зеркальной (френелевской) боковой поверхности, $Ma = 0$, (б) – случай диффузной боковой поверхности, $Ma = 3.5 \cdot 10^{-5} \text{ Н/(м К)}$, (с) - боковая поверхность покрыта депозитом, $Ma = 3.5 \cdot 10^{-5} \text{ Н/(м К)}$, (д) - боковая поверхность покрыта депозитом, $Ma = 0$

Вариант с зеркальной (френелевской) боковой поверхностью (рис. 4.2 (а)) имеет не характерную для кристаллов ГГГ каплевидную форму межфазной границы. При этом вынужденная конвекция наиболее интенсивна в примыкающей к тройной точке части

подкристалльной области. Варианты с диффузной поверхностью кристалла и с поверхностью, покрытой тонкой черной непрозрачной депозитной пленкой мало отличаются друг от друга (рис. 4.2 (b) и (c)) и значительно лучше соответствуют реальным кристаллам ГГГ. Фронт кристаллизации имеет плоскую среднюю часть, под которой располагается вихрь вынужденной конвекции, и наклонную, почти вертикальную, на краю. Граница между этими двумя частями расположена в точке столкновения вихрей вынужденной и естественной конвекции. При этом в тех вариантах, в которых конвекция Марангони не учитывалась (рис. 4.2 (a) и (d)), фронт кристаллизации не имеет выраженной наклонной боковой части. Таким образом, конвекция Марангони влияет на форму межфазной границы.

Об этом свидетельствуют и результаты нестационарного динамического моделирования процесса роста. На рис. 4.3 представлены расчетные линии роста (то есть линии межфазной границы, зафиксированные в разные моменты времени) для двух процессов, отличающихся друг от друга только значениями коэффициента Марангони (при этом, боковая поверхность кристалла полагалась диффузной).

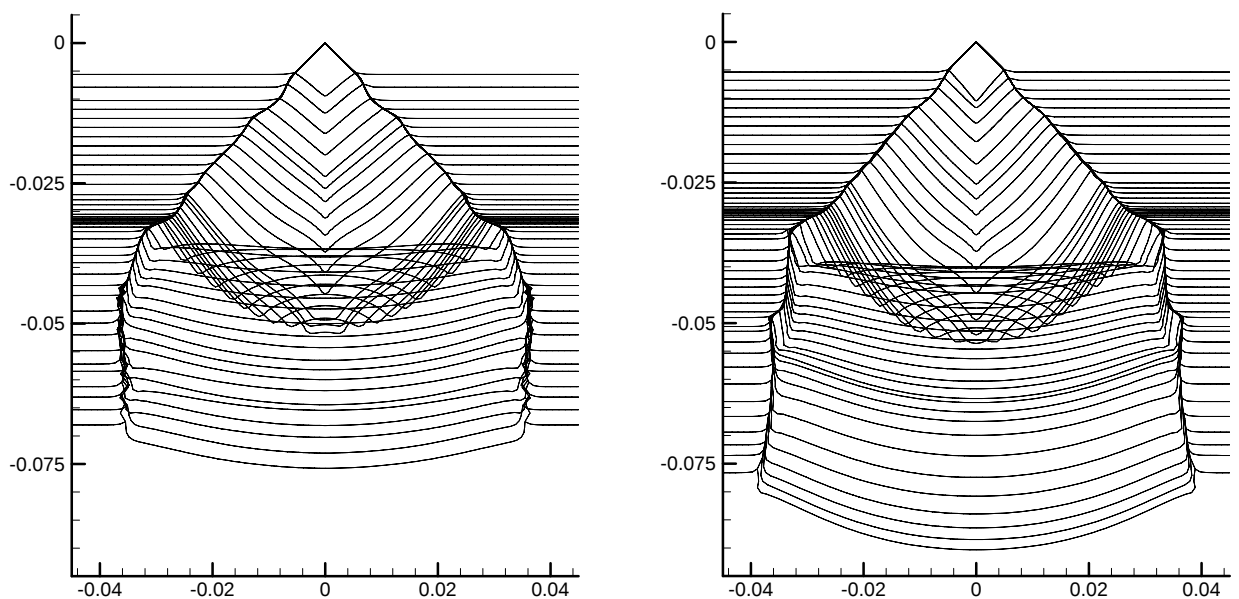


Рис. 4.3. Расчетные линии роста. Слева вариант с $Ma = 1 \cdot 10^{-5} \text{ H/(м К)}$, справа – $Ma = 3.5 \cdot 10^{-5} \text{ H/(м К)}$

Кристалл, выращенный при более слабом значении Ma (рис. 4.3 слева), имеет после инверсии меньшую боковую наклонную часть межфазной границы, чем кристалл, выращенный при большем значении Ma (рис. 4.3 справа). Соответственно и глубина прогиба в расплав центральной, уплощенной части фронта, в первом варианте меньше.

Для сравнения результатов численного моделирования изменения формы фронта кристаллизации при инверсии с тем, что наблюдается на практике, на рис. 4.4 слева приведена фотография в поляризованном свете образца, вырезанного из кристалла ГГГ.

По наклону полос роста видно, насколько выпуклой была форма фронта кристаллизации до процесса инверсии, и с какой плоской межфазной границей происходит рост основной части кристалла. Справа на рис. 4.4 показаны линии роста, найденные в процессе виртуального моделирования роста данного кристалла.

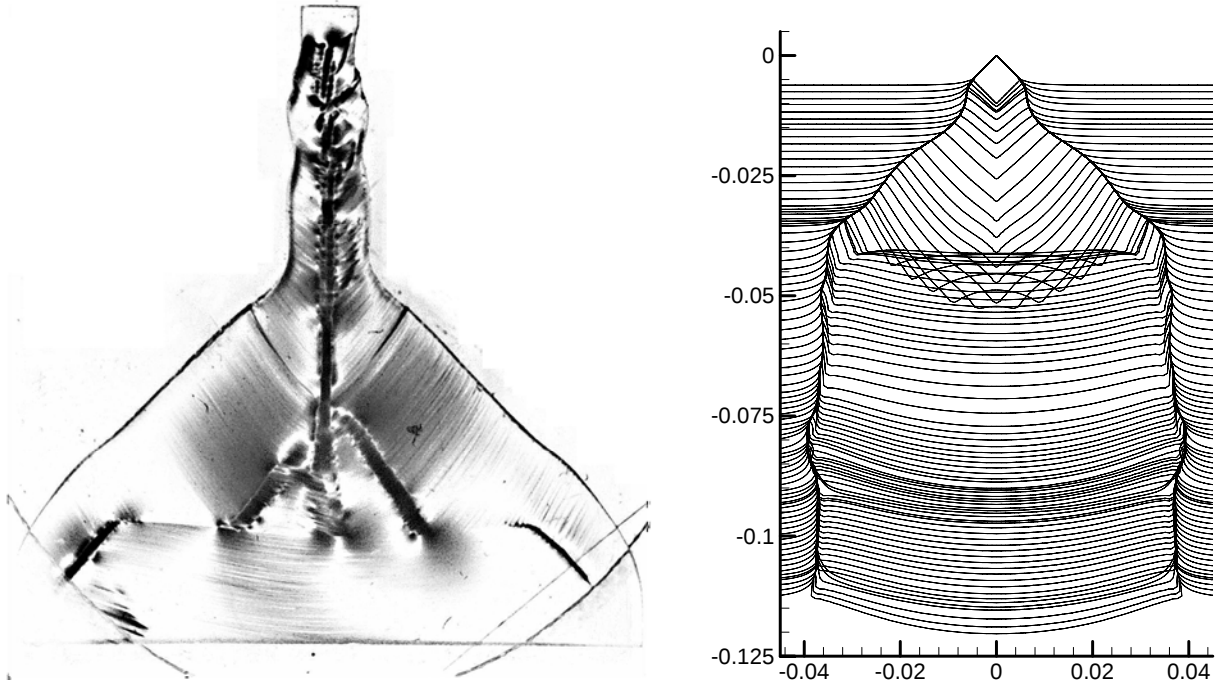


Рис. 4.4. Слева - снимок в поляризованном свете продольного сечения кристалла ГТГ, справа – расчетные линии роста

4.3. Влияние высоты мениска расплава на работу автоматической системы управления

На рис. 4.5 показано изменение во времени мощности тепловыделения нагревателя для двух процессов, чьи расчетные линии роста изображены справа на рис. 4.2 и на рис. 4.4. Отличие этих двух процессов, состоит в том, данные, приведенные на рис. 4.5а, получены для капиллярной постоянной расплава 1 мм, а на рис. 4.5б - капиллярной постоянной 5 мм. Видно, что большей капиллярной постоянной, соответствует больший период пульсаций мощности. Скорее всего, это свидетельствует о том, что чем больше высота мениска, тем выше инерционные свойства ростового процесса.

То, что амплитуда пульсаций мощности на рис. 4.5а больше, чем на рис. 4.5б еще не позволяет делать вывод об ухудшении управляемости с ростом капиллярной постоянной, поскольку на управляемость процесса оказывают сильное влияние и другие факторы – выбор коэффициентов управления ПИД-регулятора, состояние системы в момент затравления и др.

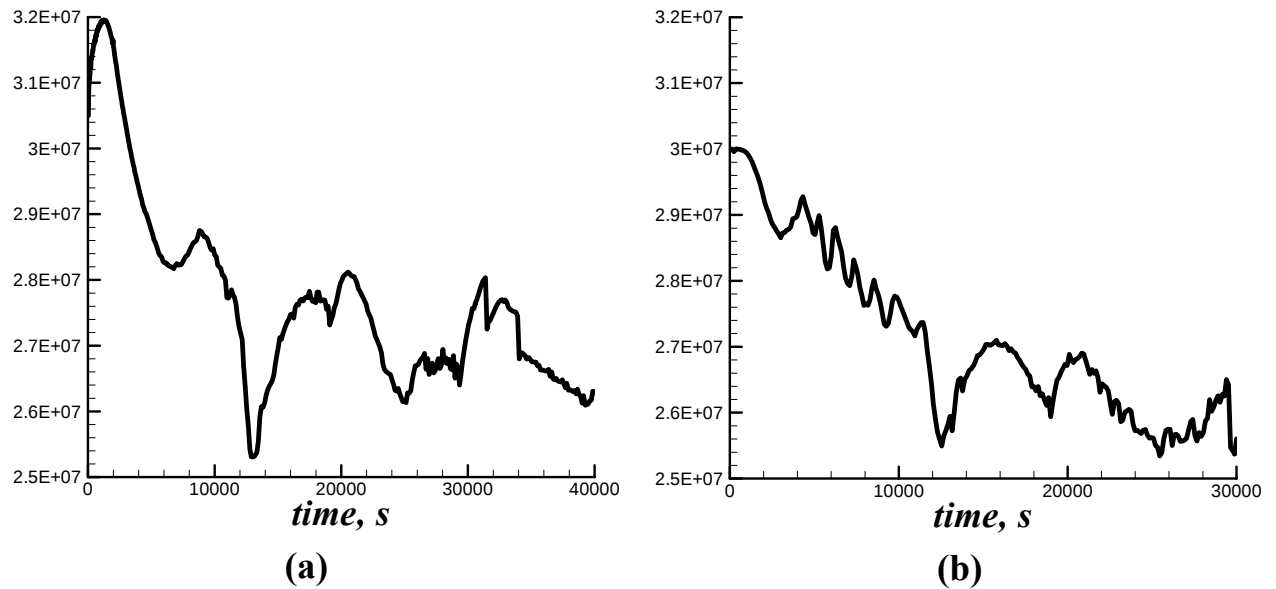


Рис. 4.5. Временные вариации мощности тепловыделения нагревателя. (a) – вариант с капиллярной постоянной равной 5 мм, (b) – вариант с капиллярной постоянной 1 мм

Следует отметить, что резкое падение тепловыделения в момент времени равный 11000с связано с инверсией фронта кристаллизации. Подплавление фронта во время инверсии воспринимается системой весового контроля как уменьшение радиуса кристалла, на что система реагирует понижением тепловыделения, стремясь увеличить скорость кристаллизации.

4.4. Моделирование роста кристаллов ГГГ большого размера

Используя динамическую модель, выполнены расчеты процесса выращивания кристаллов ГГГ большого диаметра (15 см) в кристаллизационной установке, радиальные размеры которой были увеличены в два раза. На практике кристаллы такого большого размера до сих пор не выращивались. Известно, что для успешного выращивания кристаллов большого диаметра, простого масштабирования кристаллизационной установки оказывается недостаточно. Поэтому представляло интерес исследовать, с какими проблемами столкнется выращивание кристалла ГГГ в такой увеличенной установке. Как и ожидалось, стабильность процесса моделирования с увеличением размера кристаллов уменьшилась. Тем не менее, удалось провести процесс разрачивания кристалла и выйти на стадию цилиндрического роста. Форма кристалла и последовательные положения фронта в различные моменты времени показаны на рис. 4.6.

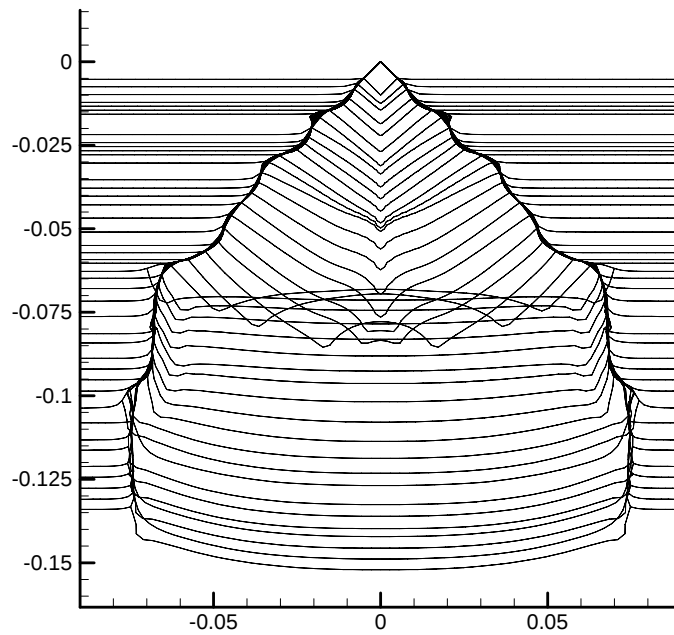


Рис. 4.6. Расчетные линии роста кристалла ГГГ большого размера

Видно, что картина инверсии фронта кристаллизации сохранилась. С другой стороны, в процессе роста происходило периодическое подплавление кристалла в окрестности трехфазной линии (контур межфазной границы выходит за пределы боковой поверхности кристалла). К сожалению, пока мы не можем утверждать, что этот эффект имеет физическую природу, а не является численным. С другой стороны, картина течения в расплаве, показанная на рис. 4.7, дает основания полагать, что подобная неустойчивость действительно может иметь место.

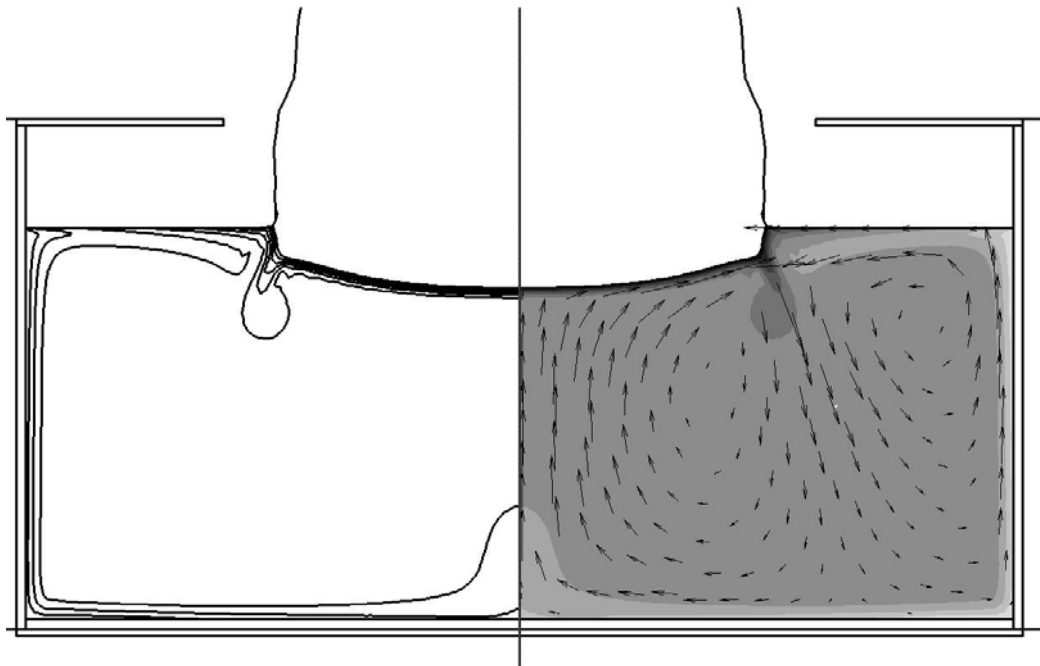


Рис. 4.7. Распределение температуры и поле течений в тигле диаметром 30 см. Расстояние между изотермами 20 градусов.

В расплаве четко видны два вихря, которые встречаются как раз в месте излома межфазной границы. В этом же месте изотермы сильно искривляются и отходят от фронта кристаллизации, что указывает на резкое уменьшение потока тепла, подводимого к фронту из жидкой фазы. Интересно также отметить, что в большей части расплава распределение температуры близко к однородному, и только около стенок тигля и фронта кристаллизации имеет место сгущение изотерм. В любом случае наблюдаемое усиление неустойчивости процесса роста (реального и виртуального) связано с увеличением радиационного отвода тепла с возросшей площади свободной поверхности расплава, что приводит к усилению не только свободной конвекции, но и конвекции Марангони, которая ответственна за появление трапецевидной формы межфазной границы. Для уменьшения отвода тепла, необходимо вносить изменение в конструкцию тепловой зоны: изменять экранировку, увеличивать теплоизоляцию в верхней части зоны и т.п.

4.5. Выводы

В рамках данной главы проведено тестирование, предложенной в предыдущем разделе динамической модели процесса Чохральского. Показано, что радиационные свойства свободной поверхности полупрозрачного кристалла могут оказывать существенное влияние на форму межфазной границы. Также на форму фронта и ее вариации в процессе роста влияет конвекция Марангони. Конвекция Марангони способствует образованию после инверсии фронтов трапецевидной формы с плоской центральной частью и наклонными краями. Причем, чем выше коэффициент Марангони, тем больше размеры боковой части и тем сильнее прогиб фронта в расплав.

Выдвинуто предположение, что увеличение высоты мениска расплава приводит к усилению инерционных свойств ростового процесса.

Проведены расчеты процесса выращивания кристаллов ГГГ большого диаметра. Расчеты показали снижение стабильности процесса моделирования с увеличением размера установки и кристаллов. По всей видимости, простого масштабирования установки недостаточно и требуется внесение более существенных изменений в конструкцию кристаллизационного узла.

Результаты данной работы опубликованы в статье [68].

5. Управление многосекционным нагревателем в процессе выращивания кристаллов германата висмута в структуре силленита ($\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$) способом Чохральского с малыми температурными градиентами

5.1. Введение

Кристаллы силленитов широко применяются в различных областях промышленности, поскольку обладают большим набором ценных с практической точки зрения качеств. Подобным кристаллам присуща оптическая активность, фотопроводящие и фотохромные явления, пьезоэлектрические, электро- и магнитооптические свойства. Это позволяет использовать данные материалы в таких устройствах как пьезодатчики, фильтры и линии задержки электромагнитных сигналов, электро- и магнитооптические измерители напряженности полей, пространственно-временные модуляторы, резонаторы в лазерах и др. Например, благодаря явлению фоторефракции указанные кристаллы используются при регистрации голограмм, поскольку их показатель преломления изменяется в зависимости от интенсивности их освещения [85].

В основном кристаллы силленитов выращиваются традиционным методом Чохральского. При этом, наименьшая достигнутая плотность дислокаций для кристаллов BGO, выращенных таким способом составляет 10^2 на см^2 [85]. В Новосибирском Институте неорганической химии (ИНХ) СО РАН для получения кристаллов германосилленита был применен низкоградиентный метод Чохральского, который уже использовался в этом институте для промышленного производства высококачественных кристаллов германозвлитина ($\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$) большого диаметра. В результате плотность дислокаций в кристаллах BGO со структурой силленита удалось понизить на порядок до 10 на см^2 [86]. Однако подобное высокое качество достигалось не по всей длине кристалла, а лишь на некоторых участках, соответствующих определенным этапам роста. Причина этого состояла в следующем. Для достижения низких градиентов используются многосекционные нагреватели. Процесс роста в таких условиях динамически неустойчив, и его стабилизация достигается за счет применения автоматического весового контроля. Как правило, сигнал обратной связи по весу подается с одинаковой амплитудой на все контуры регулирования температуры секций нагревателя, поддерживая эти температуры примерно одинаковыми. Обеспечивая заданное изменение поперечного сечения кристалла, такое управление не может предотвратить изменений тепловых условий на

фронте кристаллизации, происходящих по мере увеличения длины кристалла и падения уровня расплава, что приводит к изменению ограничения фронта кристаллизации, и, как следствие этого, к захвату включений и возникновению дефектов. Необходимо отметить, что в низкоградиентном методе Чохральского высококачественные кристаллы образуются при полностью ограненной межфазной границе.

Чтобы обеспечить неизменность тепловых условий на фронте кристаллизации, т.е. неизменность его формы в процессе вытягивания, необходимо кроме управления по весовому датчику использовать дополнительные соотношения, определяющие изменение температуры каждой секции. В принципе, подобных соотношений может быть много, в зависимости от тех требований, которые лежат в их основе: поддержание заданной формы фронта кристаллизации, уменьшение уровня термических напряжений и т.п. Насколько нам известно, до сих пор каких-либо физически обоснованных алгоритмов построения подобных соотношений опубликовано не было, и корректирующие воздействия подбирались опытным путем.

В данной главе рассматривается проблема управления выращиванием кристаллов германата висмута со структурой силленита в случае, когда нагреватель состоит из 3-х секций, а скорости вытягивания и вращения являются заданными. Для решения указанной задачи предлагается использовать подход, основанный на оптимизации глобального теплообмена в кристаллизационной установке.

5.2. Описание установки

Отработка технологии получения кристаллов германосилленита $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$ методом Чохральского с малыми температурными градиентами осуществлялась на малой экспериментальной установке с диаметром тигля 70 мм, который позволяет вытягивать кристаллы до 50 мм в диаметре. Схематический вид установки приведен на рис. 5.1.

Установка обладает цилиндрической симметрией. В самом центре расположен платиновый тигель. Высота цилиндрической части тигля составляет 140 мм. Верхняя крышка тигля имеет коническую форму и является съемной, чтобы можно было извлечь выросший кристалл. Тигель расположен на теплоизолирующей подложке, лежащей на специальной подставке. Назначение подставки – поднять ростовую камеру на нужную высоту внутри тигельной печи. В данной установке используется низковольтная

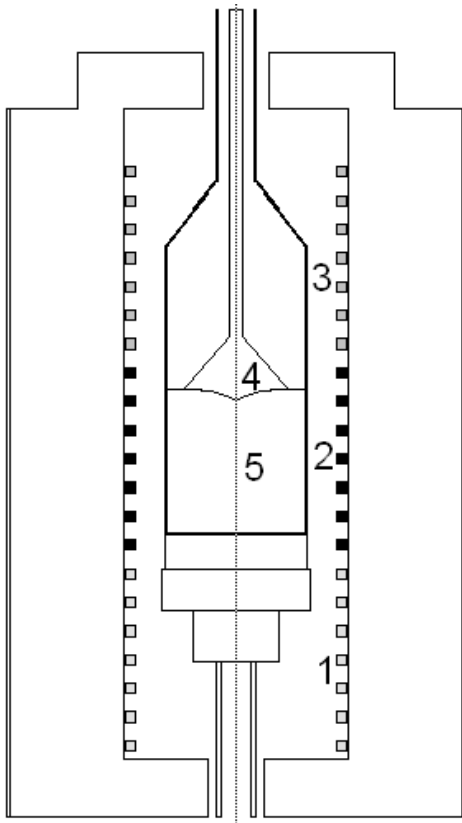


Рис. 5.1. Схема ростовой установки. 1, 2 и 3 – нижняя, средняя и верхняя секции резистивного нагревателя, 4 – кристалл, 5 – расплав.

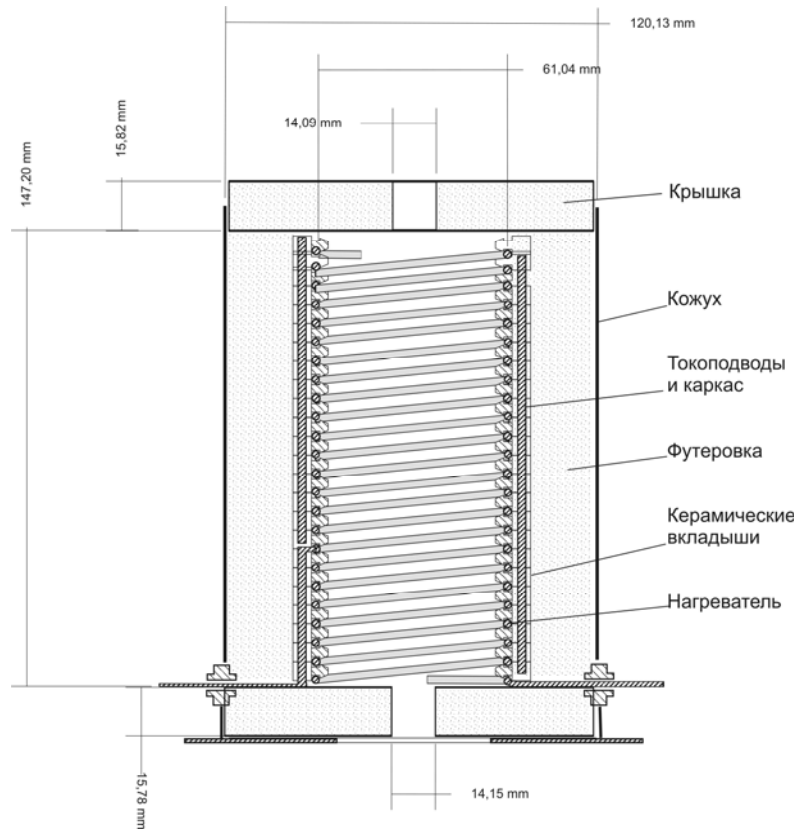


Рис. 5.2. Схема тигельной печи

тигельная печь. Ее схематический разрез показан на рис. 5.2. Печь состоит из трехсекционного нагревателя, закрепленного в каркасе из пластин жаропрочного сплава, слоя теплоизоляции, кожуха и крышки, в которой имеется отверстие для кристаллодержателя. С донной части футеровка печи отрыта, так как снизу печь закрывается теплоизолирующей заглушкой, когда тепловой узел устанавливается в рабочее положение. В случае необходимости в рабочую камеру вставляется кварцевая или керамическая труба для защиты нагревателя от взаимодействия с веществом расплава.

Нагреватель в сборе показан на рис. 5.3. Он представляет собой спираль из жаропрочного сплава диаметром 5 мм. Шаг спирали задается фасонными керамическими вкладышами. Вкладыши направляющими пазами надеты на пластины из жаропрочного каркаса, проходящие с внешней стороны нагревателя вдоль его образующей. Часть пластин каркаса служит одновременно токоподводами, приваренными к концам нагревателя и к виткам на границах секций. Это позволяет регулировать тепловую мощность в секциях нагревателя независимо друг от друга.

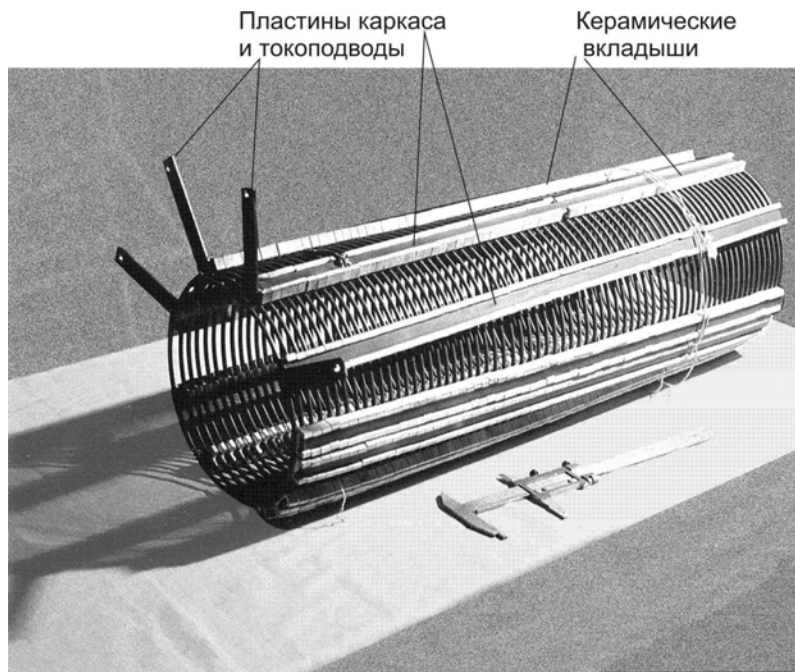


Рис 5.3. Вид секционного нагревателя

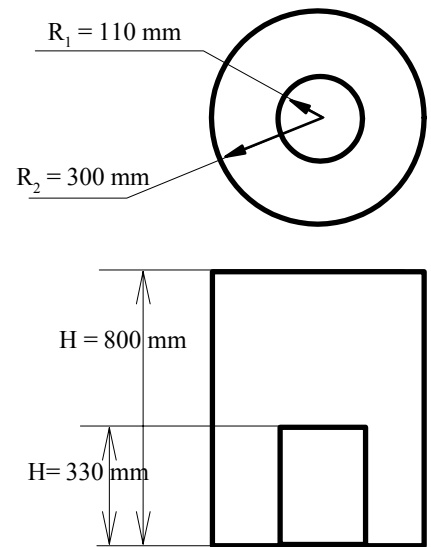


Рис. 5.4. Схематическое изображение внешней водоохлаждаемой камеры кристаллизационной установки с расположенной внутри тигельной печью. R_1 - радиус корпуса печи, R_2 - радиус водоохлаждаемой камеры.

В качестве материала футеровки используется теплоизолирующий материал ТКТ, который, плотно облекая нагреватель, обеспечивает надежную фиксацию его положения и формы. Из того же материала изготовлена крышка печи и теплоизолирующая заглушка, защищающая механизм весов от тепловых потоков.

Снаружи печь обернута в стальной кожух, в нижней части которого имеются пазы для токопроводов, а по образующей - отверстия для термопар.

Вся эта конструкция помещена внутрь стальной камеры диаметром 60 см и высотой 80 см (рис. 5.4). Стенки камеры охлаждаются водой практически до комнатной температуры.

Контроль процесса роста осуществляется с помощью датчика веса, расположенного под установкой. Сигнал от датчика поступает на вход системы управления, в которой он в дальнейшем используется для корректировки управляющих температур нагревателей. Значения этих температур поступают на блоки управления секциями нагревателя, причем у каждой секции свой собственный независимый блок. Блок управления нагревателем – это фактически ПИД-регулятор, подгоняющий напряжение на токопроводах (а значит и

мощность тепловыделения) нагревателя с тем, чтобы температура на соответствующей термопаре вблизи нагревателя сравнялась с заданным значением управляющей температуры. У каждой секции нагревателя есть своя термопара, которая расположена между внутренней стороной футеровки и витками нагревателя поблизости от середины секции. Термопары вводятся в рабочее пространство через отверстия в кожухе печи и каналы, которые формуется в футеровке и расположены между внутренней стороной футеровки и витками нагревателя поблизости от середины соответствующей секции.

5.3. Описание стандартного процесса роста

Ростовой процесс начинается с того, что оператор загружает шихту в тигель и несколько часов держит в горячей печи с тем, чтобы шихта расплавилась. При этом температуры всех трех нагревателей одинаковы и примерно на 20 градусов выше температуры плавления BGO (1203 К [24]). В качестве шихты используется стехиометрическая смесь Bi_2O_3 и GeO_2 . Стандартная масса загрузки шихты порядка 2 кг 200 г, что соответствует 7.5-8.0 см высоты уровня расплава относительно дна тигля. Это количества расплава позволяет получить кристалл диаметром 50 мм и длиной до 10 см.

После того как шихта полностью расплавилась, температуры нагревателей снижают до так называемой температуры затравления со скоростью 100 К/ч. Температура затравления подбирается экспериментально с тем, чтобы скорость кристаллизации в момент затравления, о которой судят по показаниям весового датчика, лежала в допустимых пределах. Затравление во всех описываемых процессах производилось на затравку BGO ориентированную вертикально по направлению $\langle 111 \rangle$. Если скорость прироста показаний весового датчика слишком мала или велика, то оператор сначала отрывает кристалл, а затем уменьшает или повышает температуру затравления. После этого требуется еще несколько десятков минут, чтобы температурные поля в системе установились. Далее оператор повторяет процесс затравления до тех пор, пока скорость кристаллизации не войдет в требуемые пределы. Если затравление прошло успешно, то процесс переключается с ручного управления на автоматическое. Система автоматического управления корректирует температуры многосекционного нагревателя и скорость вытягивания кристалла в соответствии с заложенной программой и показаниями весового датчика. При этом в установке реализована возможность изменения управляющей температуры каждого из нагревателей за промежуток времени $\Delta t = 20$ сек по следующему закону:

$$\Delta \bar{T}_i = k_{1,i}(\Delta F - \Delta G) + \Delta f_i \quad i = 1, 2, 3, \quad (5.1)$$

где $\bar{T}_i$ - значение управляющей температуры i -го нагревателя, F – показания весового датчика, G – задаваемый вес кристалла, f_i – задаваемое смещение управляющей температуры, $k_{1,i}$ - коэффициент усиления по рассогласованию весов. Задаваемый вес кристалла меняется с течением времени и вычисляется исходя из формы кристалла. Т.е. оператор закладывает в программу желаемую форму кристалла как функцию $r_{theor}(l)$, где l – это длина кристалла от затравки. Тогда заданный вес вычисляется по простой формуле, в которой не учитывается ни влияния мениска расплава на показания весового датчика, ни то, что форма фронта кристаллизации может быть отлична от плоской (рис. 5.5):

$$G(l) = \rho_{cryst} \pi \int_0^l r_{theor}^2(l') dl'. \quad (5.2)$$

Здесь ρ_{cryst} – плотность кристалла, а длина кристалла l меняется по мере его роста как

$$l(t + \Delta t) = l(t) + v_{cryst} \Delta t, \quad (5.3)$$

где $v_{cryst}(l)$ - программно задаваемое значение скорости кристаллизации вещества на фронте. При этом полагается, что v_{cryst} есть сумма скорости вытягивания кристалла V_{pull} и скорости опускания расплава V_{melt} . Необходимо отметить, что в литературе рассматривались алгоритмы вычисления задаваемого веса с учетом влияния мениска расплава на показания весового датчика [77], [87], [88]. Однако в настоящем процессе подобные уточнения не использовались.

Для осесимметричного кристалла радиуса r_{theor} с плоским фронтом V_{pull} и V_{melt} связаны между собой соотношением (см. Приложение В)

$$V_{melt} = \frac{V_{pull}}{\frac{\rho_{melt} R_{cru}^2}{\rho_{cryst} r_{theor}^2} - 1}, \quad (5.4)$$

где R_{cru} – внутренний радиус цилиндрического тигля. В результате, задаваемая скорость кристаллизации будет равна

$$v_{cryst} = V_{pull} + V_{melt} = \frac{V_{pull}}{1 - \frac{\rho_{cryst} r_{theor}^2}{\rho_{melt} R_{cru}^2}}, \quad (5.5)$$

а закон, по которому система управления меняет скорость вытягивания кристалла в процессе роста, принимает вид

$$V_{pull} = \left(1 - \frac{\rho_{cryst} r_{theor}^2}{\rho_{melt} R_{cru}^2} \right) v_{cryst}. \quad (5.6)$$

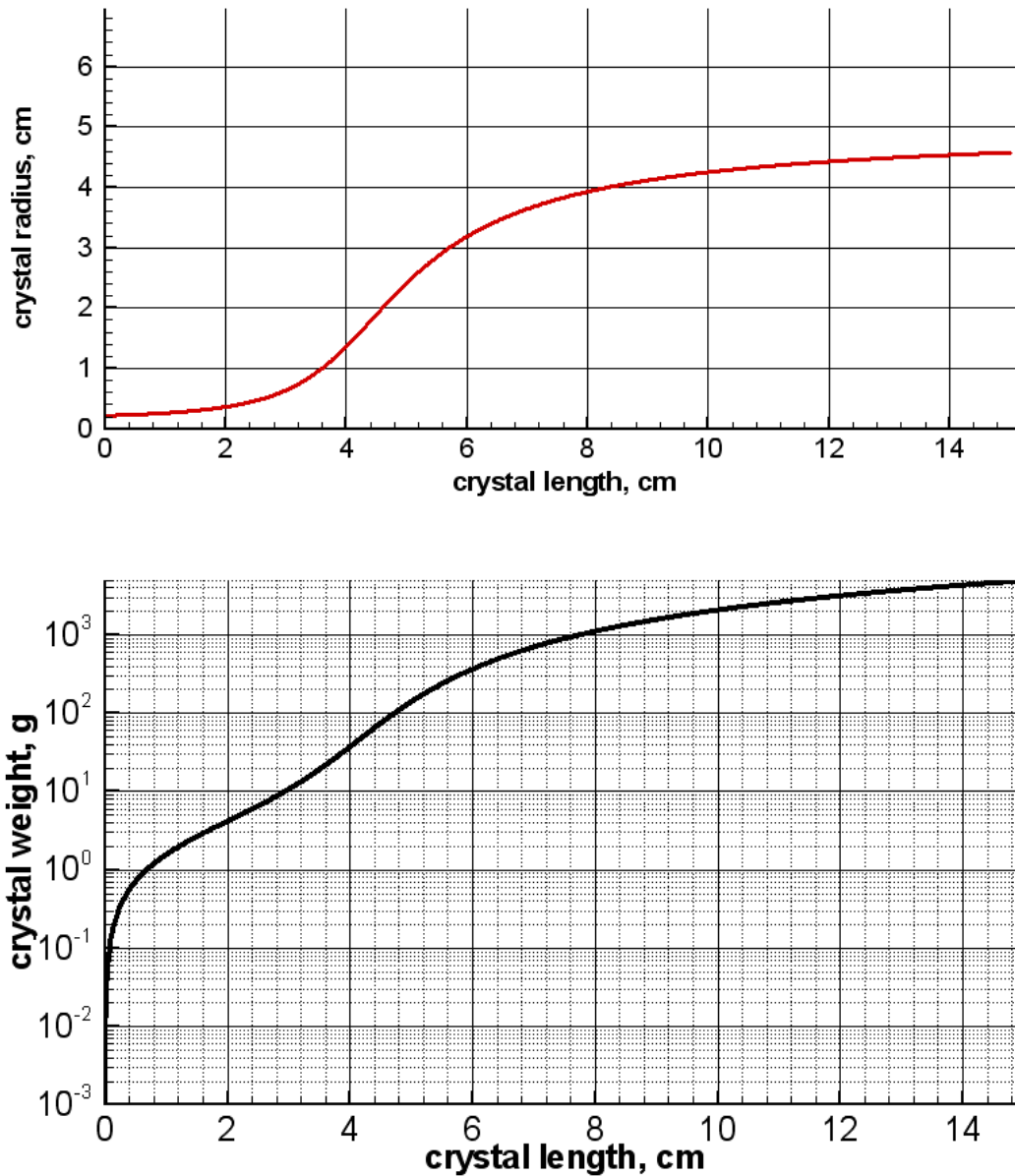


Рис. 5.5. Вверху: программно заданная форма кристалла. Внизу: зависимость веса данного кристалла от его длины (в логарифмическом масштабе).

Коэффициент $k_{1,i}$ в формуле (5.1) свой для каждого нагревателя. Обычно он не постоянный, а задается как функция от площади поперечного сечения $S = \pi r_{theor}^2$. $k_{1,i} = k_{1,i}(S)$, где $k_{1,i}(S)$ убывающая линейная функция. Как правило, в самом начале роста значение $k_{1,i}$ равно 0.5-2, в крайнем случае, 3 градуса на грамм. После разращивания, на стадии роста с постоянным диаметром, $k_{1,i}(S)$ сильно падает (в десятки раз), но, естественно, не до нуля – иначе система не сможет реагировать на рассогласование весов.

Помимо той составляющей, которую дает управление по датчику веса, эволюцию управляющей температуры можно подкорректировать с помощью задаваемой

зависимости $f_i(l)$. Обычно закон $f_i(l)$, используется для того, чтобы ослабить перегулирование, т.е. возникающие в системе колебания управляющего сигнала. Если после серии экспериментов, уже примерно известно как ведет себя управляющая температура во время роста, то, заложив эту зависимость в систему управления, можно существенно уменьшить пульсацию управляющих температур.

После того как найдено новое значение управляющей температуры $\bar{T}_i$ оно поступает на блок управления i -ым нагревателем. Блок управления раз в Δt секунд изменяет напряжение U_i на величину

$$\Delta U_i = k_{2,i}(\Delta \bar{T}_i - \Delta T_i) + \frac{k_{2,i}}{\tau_i}(\bar{T}_i - T_i)\Delta t, \quad (5.7)$$

где T_i – это температура на соответствующей термопаре, $k_{2,i}$ и τ_i – задаваемые управляющие параметры. Причем τ_i должно быть примерно равно времени тепловой релаксации данной системы, которое составляет 2 – 2.5 мин.

При моделировании полагалось, что мощность тепловыделения Q_i в каждом нагревателе пропорциональна напряжению U_i . Поэтому использовались аналогичные управляющие соотношения не для напряжения, а для мощности

$$\Delta Q_i = k_{2,i}(\Delta \bar{T}_i - \Delta T_i) + \frac{k_{2,i}}{\tau_i}(\bar{T}_i - T_i)\Delta t. \quad (5.8)$$

Конечно, такому управлению должно соответствовать какое-то новое значение $k_{2,i}$. К счастью, точность определения управляющего параметра $k_{2,i}$ не играет существенной роли при моделировании. Главное, чтобы выбранные значения позволяли системе быстро (за время порядка τ_i) подгонять температуру на термопаре T_i к заданному значению $\bar{T}_i$. Как следствие, подходящее значение $k_{2,i}$ легко находится в серии численных экспериментов.

5.4. Условия получения качественных кристаллов

В данном разделе по результатам работы [86] изложены особенности формообразования кристаллов $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$, выращиваемых методом Чохральского в условиях низких температурных градиентов. В этом исследовании показано, что при полностью ограниченном фронте кристаллизации возможно получение совершенных

кристаллов германосилленита. Оценка методом рентгеновской топографии [89], показала, что в таких кристаллах отсутствуют малоугловые границы и секториальность в областях, сформированных различными гранями, а плотность дислокаций менее 10 на см^2 (рис. 5.6). С другой стороны, как только на фронте начинает работать не только послойный, но и нормальный механизм роста, происходит резкое ухудшение качества кристаллов. В работе [86] установлено, что наиболее воспроизводимые условия выращивания кристаллов хорошего качества получаются при отношении высоты прогиба фронта кристалла в расплав h_f к его диаметру d_k (см. рис. 5.7) от $1/3$ до $1/2$ и скорости кристаллизации 2.5 мм/ч. Для выращивания кристаллов с более высокими скоростями кристаллизации потребуется увеличение градиентов температур, которое приведет к ослаблению образования граней. При уменьшении скоростей до 0.5-0.1 мм/час на фронте сочетаются нормальный и послойный механизмы роста, что ведет к резкому ухудшению качества кристаллов, а при скоростях кристаллизации ниже 0.05 мм/час реализуется нормальный механизм роста и фронт становится полностью округлым (рис. 5.8). Это обусловлено, по всей видимости, ослаблением переохлаждения на грани при понижении скорости кристаллизации.

Что касается, получения кристаллов с другим соотношением h_f/d_k при одинаковой скорости кристаллизации 2.5 мм/ч, то здесь наблюдается следующая картина.

При малых прогибах фронта ($h_f/d_k \leq 1/4$), нарушается полиэдрический рост, появляются макроступени в вершинных и реберных частях фронта и, как следствие, увеличивается количество включений в кристалле.

При величине соотношения h_f/d_k от $1/4$ до $1/3$ качество кристаллов, как правило, неудовлетворительно. В основном это проявляется в возникновении в кристаллах областей с повышенной концентрацией включений в виде трехлопастного пропеллера, совпадающего по расположению с ребрами фронта кристаллизации. Данное явление связано, по мнению различных авторов, с анизотропией скоростей роста и различием коэффициентов распределения примесей для полярных и неполярных граней, присутствующих на фронте кристаллизации [85].

Дальнейшее увеличение h_f/d_k влечет улучшение качества кристаллов. Однако при сильно выпуклом фронте ($h_f/d_k \sim 1/2$ и более) повышается вероятность зарождения паразитного кристалла на дне тигля из-за увеличения переохлаждения расплава в его донной части.

Следует также отметить, что ограниченный фронт кристаллизации сформирован гранями $\{100\}$ и $\{110\}$. Изменение формы и глубины фронта при различных тепловых условиях роста достигается за счет изменения размеров граней этих типов (табл. 5.1), что,

в свою очередь, влияет также и на форму сечения кристалла и на площадь граней на боковой поверхности кристалла.

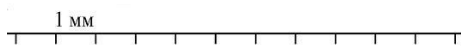


Рис. 5.6. Рентгеновская топограмма кристалла BGO, темная полоса на топограмме – дефект фотоэмульсии.

а

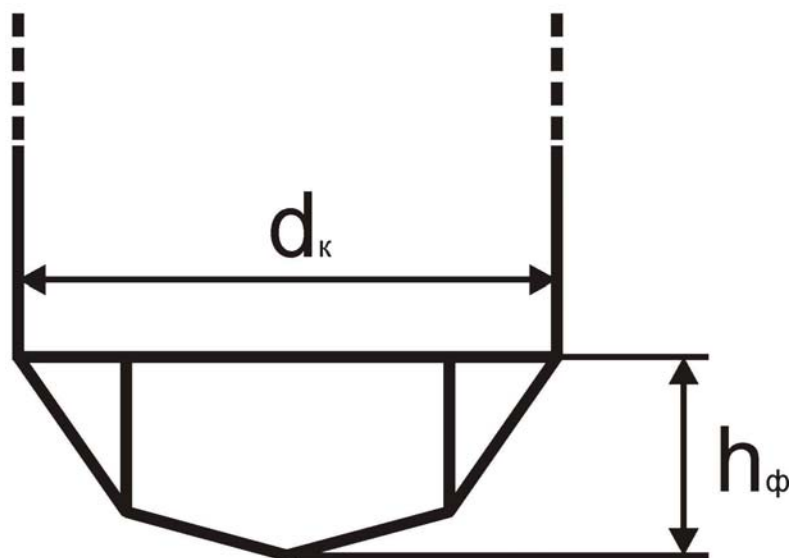
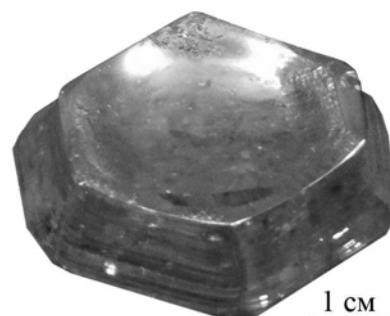
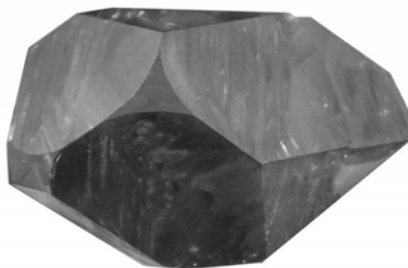


Рис. 5.7. Величина прогиба фронта кристаллизации (h_{ϕ}) и диаметр кристалла (d_k)

б

в



1 см

Рис. 5.8. Соотношение гранных и округлых форм на фронте в зависимости от скорости кристаллизации: а - скорость кристаллизации 2.5 мм/ч; б – скорость кристаллизации 0.2 мм/ч; в – скорость кристаллизации 0.05 мм/ч

Таблица 5.1. Изменение формы фронта кристалла BGO в зависимости от соотношения h_f/d_k

h_f/d_k	$S_{\{100\}}^\Sigma / S_{\{110\}}^\Sigma$ [†]	$S_{(10-1)}^{\text{avg}}$ [‡] , см ²	Форма сечения и габитус	Фотография фронта кристалла	Примечание
$\sim 1/4$	$\sim 1/4$	—			—
$\sim 1/3$	$\sim 1/2$	—			При $h_f/d_k > 1/3$ начинают формироваться грани на боковой поверхности кристалла, для которых $S_{(10-1)}^{\text{avg}} = 0.3 \text{ см}^2$.
$\sim 1/2$	~ 1	0.5			По мере приближения h_f/d_k к $1/2$ одна из граней $\{100\}$ прорастает до вершины фронта кристаллизации
$> 1/2$	$\sim 3/8$	6			Значительно увеличиваются грани (001) и (110), у них появляется общее ребро

[†] $S_{\{hkl\}}^\Sigma$ – общая площадь граней семейства $\{hkl\}$

[‡] $S_{(hkl)}^{\text{avg}}$ – средняя площадь одной грани (hkl) семейства $\{hkl\}$

* – грани перпендикулярные плоскости рисунка

5.5. Теплофизические свойства германосилленита $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$

Следует отметить, что при выращивании кристаллов $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$ доминирующую роль в теплообмене играет не кондуктивный, а радиационный теплоперенос, поскольку с одной стороны германосилленит обладает чрезвычайно низкой теплопроводностью - всего $0.18 \text{ Вт/(м}\cdot\text{К)}$, а с другой стороны достаточно высокой степенью прозрачности в инфракрасной части спектра: в части спектра, на которую приходится около 87% энергии теплового излучения при температуре плавления BGO 1203 К , коэффициент поглощения составляет менее 0.5 см^{-1} , т.е. оптическая толщина кристалла порядка единицы. Расчеты показывают, что при таких теплофизических параметрах, радиационные потоки в кристалле на 1-2 порядка больше кондуктивных. Поэтому корректный учет радиационного теплопереноса является чрезвычайно важным. При этом существенную роль играет характер отражения и преломления теплового излучения на свободной поверхности кристалла, поскольку $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$ обладает высокой оптической плотностью - показатель преломления силленита $n = 2.35$ [24]. В литературе можно найти и еще более высокие оценки вплоть до $n = 2.55$ [90].

Вопрос о характере отражения свободной поверхности кристалла достаточно подробно рассмотрен в [91]. В этой работе показано, что для корректного моделирования роста кристалла BGO его свободную поверхность в прозрачной части спектра следует полагать зеркальной, т.е. отражающей и преломляющей излучение в соответствии с законами геометрической оптики (т.н. формулы Френеля). Можно также отметить, что в видимой части спектра кристалл обладает высокой прозрачностью, его поверхность достаточно ровная, гладкая и зеркальная.

Кроме того, при расчетах теплообмена в тепловом узле в необходимо учитывать взаимодействие радиационных потоков с температурными полями внутри тела кристалла. Кристалл BGO в структуре силленита не является оптически тонким. В работах [92] и [93] приводится зависимость коэффициента поглощения излучения от длины волны (рис. 5.9). Видно, что для $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$ можно выделить окно полупрозрачности в диапазоне длин волн $0 < \lambda < 6.89 \text{ мкм}$, где коэффициент поглощения изменяется в пределах $0.3 - 0.5 \text{ см}^{-1}$. При $\lambda > 9.16 \text{ мкм}$ коэффициент поглощения уже настолько велик, что кристалл можно смело считать непрозрачным. Участок спектра $6.89 < \lambda < 9.16 \text{ мкм}$ – переходный от наиболее прозрачной полосы к непрозрачной. Поэтому при дальнейших расчетах использовалась трехполосная модель – две полупрозрачные полосы ($0 < \lambda < 6.89 \text{ мкм}$ и $6.89 < \lambda < 9.16 \text{ мкм}$) и одна непрозрачная ($\lambda > 9.16 \text{ мкм}$). Коэффициент поглощения в

каждой из полупрозрачных полос считался постоянным (Табл. 5.2). Требуемое значение вычислялось путем осреднения по соответствующей части спектра с весовой функцией Планка. При таком разбиении спектра на первую полосу приходится 86.7% энергии теплового излучения при температуре плавления BGO 1203 К. Оставшаяся часть энергии примерно поровну распределена между второй (6.5%) и третьей (6.8%) полосами.

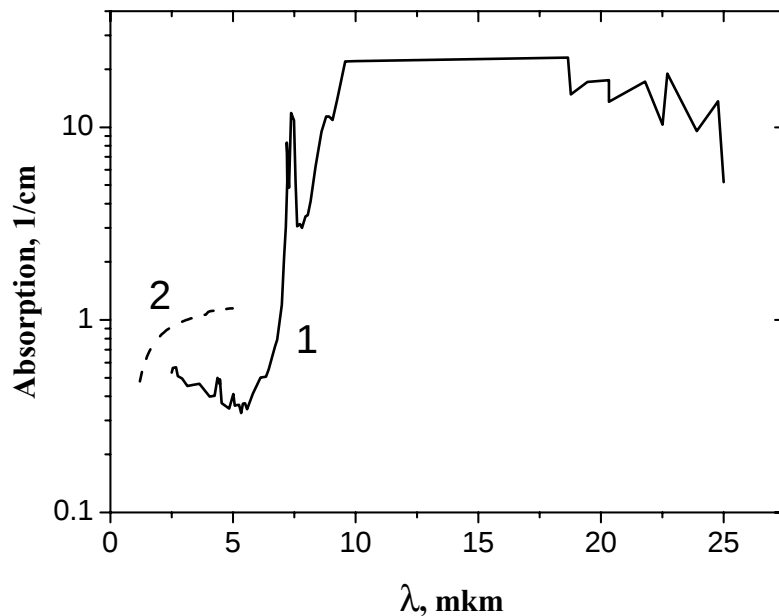


Рис. 5.9. Спектральная зависимость коэффициента поглощения $Bi_{12}GeO_{20}$ по результатам измерений [92] (1) и [93] (2)

Большая часть использовавшихся при численном моделировании теплофизических свойств расплава взята из работ [94] и [95]. Имеющиеся в них данные по вязкости, плотности расплава и их зависимости от температуры достаточно близки, так что величины вязкости расплава, его плотности и коэффициента объемного расширения можно считать известными. А вот значение теплопроводности расплава остается фактически неопределенным, т.к. данные, приводимые в различных источниках, различаются на два порядка. Поэтому, также как и в работе [91], в дальнейших расчетах в качестве коэффициента теплопроводности жидкой фазы германосилленита бралось такое значение, чтобы число Прандтля равнялось 20. При этом конвективные поля в расплаве имеют исключительно ламинарный характер. Это вносит дополнительную определенность в расчет теплообмена и упрощает моделирование роста кристалла, поскольку рост кристалла во многом определяется тепловыми процессами, происходящими на фронте. Форма фронта кристаллизации и динамика его изменения

определяются уходящими и приходящими тепловыми потоками, а также удельной теплотой плавления вещества (скрытой теплотой фазового перехода). В имеющейся литературе приводятся довольно скудные данные по теплоте плавления. В проведенных расчетах использовались значения из [24]. В более свежей работе [90] приводится значение в 139 кДж/кг. Таким образом, разброс значений не слишком велик и, кстати, эти значения мало отличаются от удельной теплоты плавления германоэвлитина $Bi_4Ge_3O_{12}$ 150.4 кДж/кг [96].

Таблица 5.2. Теплофизические свойства $Bi_{12}GeO_{20}$.

Температура плавления	1203 К	Скрытая теплота фазового перехода	156 кДж/кг
Расплав		Кристалл	
Плотность	8130 кг/м ³	Плотность	9000 кг/м ³
Теплопроводность	0.345 Вт/(м·К)	Теплопроводность	0.18 Вт/(м·К)
Теплоемкость	390 Дж/(кг·К)	Теплоемкость	390 Дж/(кг·К)
Коэффициент объемного расширения	$1.2 \cdot 10^{-4} \text{ К}^{-1}$	Коэффициент поглощения по полосам: $0 < \lambda < 6.89 \text{ мкм}$ $6.89 < \lambda < 9.16 \text{ мкм}$ свыше 9.16 мкм	0.482 см^{-1} 5.983 см^{-1} ∞ , кристалл непрозрачен
Кинематическая вязкость	$2.1 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$	Показатель преломления	2.35
Степень черноты поверхности	0.85	Степень черноты поверхности	0.8

5.6. Результаты моделирования процесса роста кристаллов германосилленита

5.6.1. Предварительные замечания

Перед тем, как описывать проведенные расчеты, отметим условности и упрощения, допущенные при численном моделировании и то, как они влияют на достоверность полученных результатов.

Прежде всего, во всех расчетах задача рассматривалась в осесимметричной постановке. Хотя ростовой узел и обладает цилиндрической симметрией, кристалл может достаточно сильно от нее отклоняться из-за наличия граней на фронте кристаллизации. Полиэдрическая форма фронта может повлиять как на тепловые потоки в кристалле, так и на конвекцию в расплаве. Однако рассмотрение подобных задач в трехмерной постановке

требует чрезвычайно больших затрат вычислительных ресурсов и поэтому до сих пор не используется. Необходимо отметить также, что форма ограниченного фронта значительно сильнее отклоняется от изотермы плавления, чем форма округлого фронта, поскольку переохлаждение на грани существенно больше и оно не постоянно вдоль грани. Поскольку в низкоградиентном методе Чохральского перепад температур в расплаве, как правило, не превышает нескольких градусов, то вполне возможно, что величина переохлаждения на грани может оказаться сопоставимой с перепадом температур в расплаве. К сожалению, более или менее достоверные данные о величине переохлаждения для кристаллов BGO отсутствуют, и поэтому данный эффект не принимался во внимание.

Необходимо также помнить, что значения некоторых физических параметров известны с недостаточной степенью точности, например, уже упоминавшийся выше коэффициент теплопроводности расплава.

И, наконец, нужно отметить следующее. В проводимом моделировании под температурой термопары T_i в формуле (5.8) понимается температура в определенной точке на внутренней стенке тепловой печи, в то время как на самом деле термопара несколько выдвинута в сторону нагревателя и находится на некотором расстоянии от стенки. Расстояние это точно неизвестно. Кроме того, не учитывается влияние степени черноты поверхности термопары. При этом, расчеты показывают, что разница между температурой стенки и температурой на поверхности нагревателя составляет от 15 до 25 градусов. Поэтому температура, измеряемая термопарой, может быть на несколько градусов выше температуры на стенке.

Все вышесказанное, однако, не отменяет ценности моделирования. Надо только правильно трактовать полученные результаты. Не следует их понимать так, что найденные в процессе расчетов значения, например, температур нагревателей – это точно те самые температуры, которые в реальном процессе обеспечат оптимальный рост кристалла. Однако значения этих температур относительно друг друга имеют уже гораздо большую практическую ценность, поскольку отклонения показаний термопар от температур на стенке отличаются для всех трех нагревателей примерно на одну и ту же величину. Динамики изменения относительных температур вполне достаточно для оптимизации процесса, поскольку система управления имеет дополнительный опорный сигнал от датчика веса.

Что касается отклонения формы фронта от осевой симметрии, то, во-первых, при выращивании кристаллов с малыми скоростями вытягивания и кристаллизации фронт практически не ограничивается, и осесимметричная постановка задачи имеет полное право на существование. Такие режимы можно использовать в качестве опорных точек для

соотнесения результатов расчетов с практикой. А во-вторых, есть все основания полагать, что если тепловые условия не позволяют осесимметричному кристаллу иметь хорошую форму фронта, то и для ограненного фронта эти условия будут способствовать образованию плохого фронта (слишком выпуклого в расплав или, наоборот, слишком плоского). Но, конечно, только сопоставление с экспериментальными данными может показать, насколько уместными были принятые упрощения.

5.6.2. Результаты

Целью моделирования было нахождение такого управления тепловыделением в трехсекционном нагревателе, при котором форма фронта кристаллизации на стадии роста кристалла постоянного диаметра остается практически неизменной и близкой к заданной оптимальной. Решение этой задачи осуществлялось в два этапа. На первом этапе находились дополнительные соотношения, определяющие изменение мощности в каждой секции в процессе вытягивания. На втором этапе для проверки эффективности найденного управления производилось прямое моделирование роста кристалла от момента затравления, используя разработанную динамическую модель процесса Чохральского.

5.6.2.1. Первый этап. Оптимизация

В принципе, задач оптимизации теплообмена может быть сформулировано много в зависимости от выбора целевой функции. Очевидно, что главной целью оптимизации является подбор тепловых условий, обеспечивающих требуемое структурное совершенство кристалла. Однако подобная формулировка не может быть использована в моделировании, поскольку является чисто качественной. Поэтому для построения целевой функции необходимо выбирать количественные характеристики процесса, влияющие на качество выращиваемых кристаллов. Подобными характеристиками являются: форма межфазной границы, уровень термических напряжений, распределение примеси и т.д. В случае оксидных кристаллов чрезвычайно большую роль играет форма фронта [86]. Поэтому задачу оптимизации можно было бы сформулировать следующим образом: найти такие тепловые условия, при которых форма фронта кристаллизации наименее отличается от заданной.

Однако в такой постановке задача слишком сложна с вычислительной точки зрения, поскольку требуется не только решить задачу глобального теплообмена во всей установке, но еще и найти форму фронта соответствующую данным тепловым условиям.

Счет будет происходить гораздо быстрее, если зафиксировать положение межфазной границы и сформулировать задачу оптимизации глобального теплообмена несколько иным образом: при заданном фронте кристаллизации найти такие тепловые условия, при которых нарушение теплового баланса (условия Стефана) на этом фронте оказывается минимальным для каждой длины кристалла. При этом, под тепловыми условиями, вообще говоря, можно понимать любые параметры технологического процесса и любые характеристики ростовой установки, влияющие на форму фронта кристаллизации. Применительно к задаче, рассматриваемой в настоящем разделе, в качестве варьируемых (управляющих) параметров используются тепловыделения в секциях резистивного нагревателя. Таким образом, решая задачу оптимизации для каждой длины кристалла можно получить недостающие соотношения для определения вариаций тепловыделения в секциях нагревателя в процессе выращивания.

В соответствие со сказанным выше, первоначально в качестве целевой функции был выбран функционал, связанный с точностью выполнения условия Стефана, то есть условия баланса тепла на фронте кристаллизации

$$F'(Q_1, Q_2, Q_3) = \int ((\mathbf{q}_S \cdot \mathbf{n}) - (\mathbf{q}_L \cdot \mathbf{n}) - \rho L V \cos(\mathbf{n}, \mathbf{Z}))^2 dS, \quad (5.9)$$

где Q_i - тепловыделение в i -ой секции, $\mathbf{q}_S$ и $\mathbf{q}_L$ - векторы плотности потока тепла в твердой и жидкой фазах, V - скорость вытягивания плюс скорость опускания расплава, ρ - плотность кристалла, L - удельная теплота плавления кристалла, $\mathbf{Z}$ - единичный вектор направленный вертикально вверх, а $\mathbf{n}$ - направленная внутрь кристалла нормаль к фронту кристаллизации, по которому ведется интегрирование. Необходимость отсекал варианты с существенными областями переохлаждения в расплаве, заставила несколько изменить целевую функцию, добавив к ней дополнительное «штрафное» слагаемое

$$F(Q_1, Q_2, Q_3) = \int ((\mathbf{q}_S \cdot \mathbf{n}) - (\mathbf{q}_L \cdot \mathbf{n}) - \rho L V \cos(\mathbf{n}, \mathbf{Z}))^2 dS + \frac{K_{penalty}}{V_{melt}} \int_{V_{melt}^{cold}} (T - T_{cryst})^2 dv. \quad (5.10)$$

Здесь V_{melt} - это объем всего расплава, а V_{melt}^{cold} - его переохлажденной части (там, где температура T ниже температуры плавления T_{cryst}), $K_{penalty}$ - специальный «штрафной» коэффициент. Величина «штрафного» коэффициента меняется от расчета к расчету, поскольку, с одной стороны, он должен быть достаточно большим, чтобы не допустить образования значительной переохлажденной зоны в расплаве, а с другой стороны, чем он больше, тем хуже сходимость оптимизационного алгоритма.

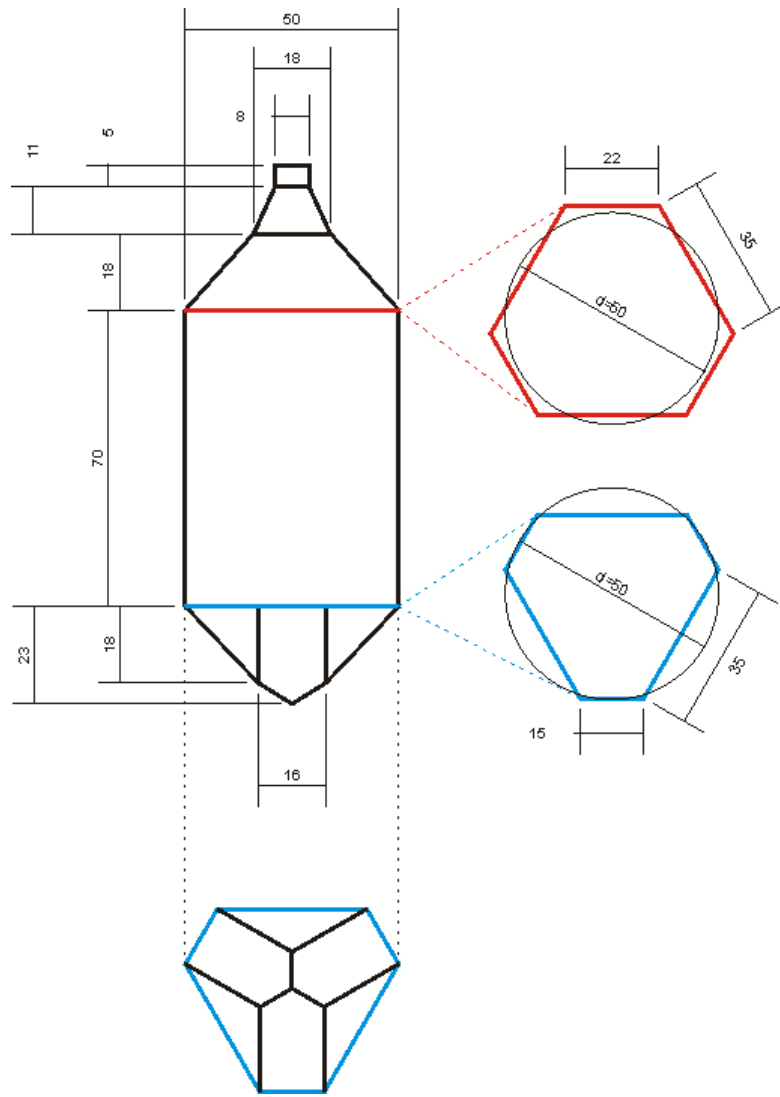


Рис. 5.10. Оптимальная форма кристалла, предложенная Панцуркиным Д.С.

Заметим, что если функционал $F'(Q_1, Q_2, Q_3)$ достигает своего наименьшего (т.е. нулевого) значения, то это соответствует росту кристалла с постоянной формой фронта. Действительно, условием неизменности формы фронта является соотношение

$$\frac{v_{cryst}}{\cos(\mathbf{n}, \mathbf{Z})} = V = const \quad (5.11)$$

по всему фронту в данный момент времени (см. Приложение В), где v_{cryst} – скорость кристаллизации в данной точке фронта. При этом

$$v_{cryst} = ((\mathbf{q}_S \cdot \mathbf{n}) - (\mathbf{q}_L \cdot \mathbf{n})) / (\rho L). \quad (5.12)$$

Таким образом, при оптимизации искались такие тепловые условия, чтобы распределение величины $\frac{v_{cryst}}{\cos(\mathbf{n}, \mathbf{Z})}$ по фронту было как можно ближе к заданной скорости

кристаллизации V . Оптимальная форма фронта была предложена сотрудником ИХ СО РАН Панцуркиным Д.С., основываясь на результатах [86]. Этот фронт относится к

процессу с постоянным значением V равным 2.5 мм в час и постоянной скоростью вращения кристалла 20 оборотов в минуту. Фронт имеет полиэдрическую форму с максимальной глубиной прогиба 2.3 см (рис. 5.10). В качестве заданного фронта в расчетах использовался осесимметричный фронт близкий к оптимальному (рис. 5.11).

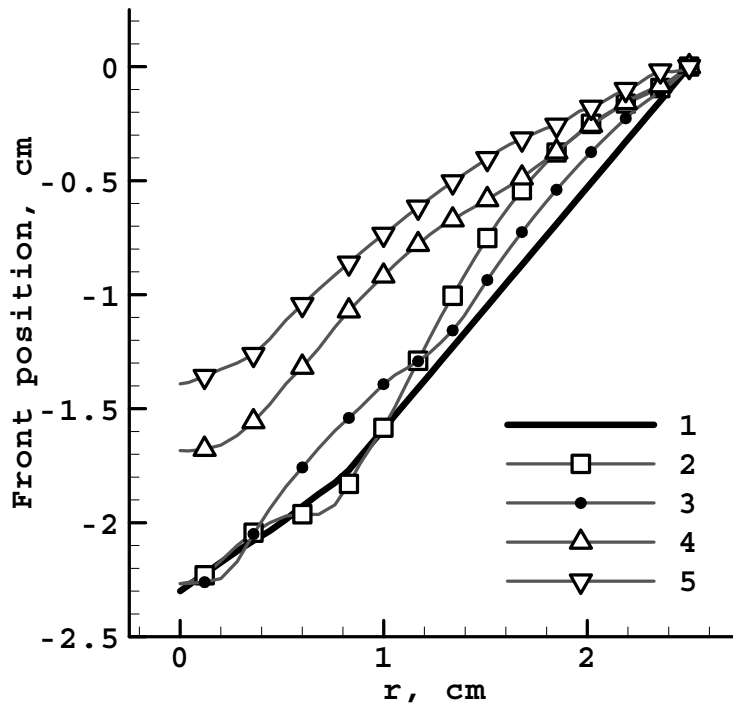


Рис. 5.11. Стационарный фронт кристаллизации при разных длинах кристалла в сравнении с заданной формой 1. 2 – длина кристалла 3.4 см, 3 – длина кристалла 4.6 см, 4 – 5.8 см, 5 – 6.9 см

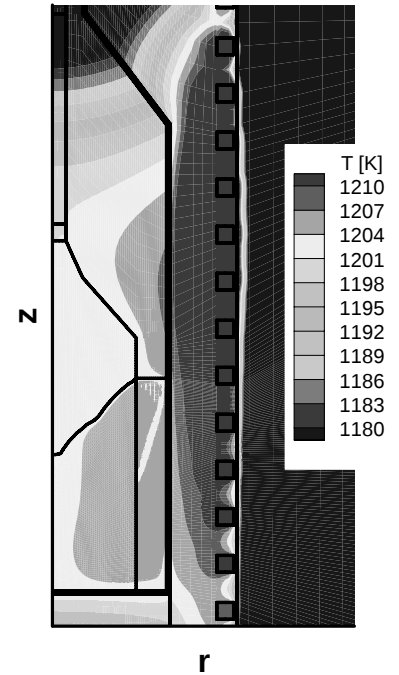


Рис. 5.12. Температурные поля внутри кристаллизационного узла

Для нахождения минимума целевой функции использовался метод деформируемого многогранника Нелдера и Мида [97], иногда еще именуемый симплекс-методом (не путать с симплекс-методом в линейном программировании!). Этот метод хорошо себя зарекомендовал и широко используется в инженерных задачах для поиска оптимума по небольшому набору параметров – 2, 3, 4 редко 5. Для поиска по пространствам больших размерностей требуются уже более сложные подходы, как, например, те, где надо вычислять не только значения самого функционала, но и значения его градиентов.

В рассматриваемой задаче имеется набор (Q_1, Q_2, Q_3) из трех неизвестных мощностей каждой из секций нагревателя, поэтому выбор метода деформируемого многогранника представляется вполне обоснованным. Тем не менее, решение рассматриваемой задачи оптимизации потребовало чрезвычайно больших затрат вычислительного времени. Во-первых, чтобы вычислить значение целевой функции

$F(Q_1, Q_2, Q_3)$ при заданном наборе тепловыделений (Q_1, Q_2, Q_3) , решалась стационарная задача глобального теплообмена во всей кристаллизационной установке, что требует порядка 8 часов на компьютере с тактовой частотой 3 ГГц. Во-вторых, количество значений целевой функции, которые приходится вычислять, оказывается порядка нескольких десятков.

Найденные в результате оптимизации температуры нагревателей для различных длин кристалла представлены в таблице 5.3. Под температурами нагревателей имеются в виду температуры в точках на внутренней стенке тепловой печи, в местах расположения термопар у соответствующих нагревателей. Под длиной кристалла подразумевается длина от его верхушки до уровня контакта с расплавом. При этом длина кристалла 3.4 см соответствует моменту окончания процесса разрачивания и началу стадии цилиндрического роста (рис. 5.10). Таким образом, при общей длине кристалла 6.9 см длина его цилиндрической части составляет 3.5 см.

Таблица 5.3. Оптимальные температуры нагревателей

Длина кристалла, см	Температура нижнего нагревателя, К	Температура среднего нагревателя, К	Температура верхнего нагревателя, К	Разница температур нижнего и среднего, К	Разница температур верхнего и среднего, К
3.4	1185.9	1200.1	1211	-14.2	10.9
4.6	1181.5	1197.9	1214.6	-16.4	16.7
5.8	1180.2	1199.8	1214	-19.6	14.2
6.9	1180.9	1199.4	1213.7	-18.5	14.3

Поведенные вычисления показывают, что наименьшим изменениям в процессе роста подвержена температура среднего нагревателя. Это объясняется тем, что средняя секция расположена ближе всего к тиглю и оказывает наибольшее влияние на температуру расплава и скорость кристаллизации. А так как в низкоградиентном методе перепад температур по расплаву всего несколько градусов, то и диапазон возможных изменений температуры среднего нагревателя крайне узок. Отклонение в большую или меньшую сторону вызовет либо плавление кристалла, либо переохлаждение расплава.

А вот температуры верхнего и нижнего нагревателей изменяются в гораздо более широких пределах. Особый интерес вызывает то, что, исходя из результатов оптимизации, на стадии цилиндрического роста самым горячим должен быть верхний нагреватель, а самым холодным нижний. Это весьма неожиданный вывод, дойти до которого без применения моделирования представляется маловероятным. Обычно все как раз наоборот: нижнюю и среднюю части нагревателя стараются разогреть сильнее, чем верхнюю, чтобы внизу вещество находилось в расплавленном состоянии, а сверху в

твердом. Однако расчеты выявили сильный отток тепла с поверхности кристалла за счет радиационного излучения. Этого оттока оказывается достаточно для охлаждения кристалла даже тогда, когда температура стенки тигля вокруг самого кристалла поднимается на несколько градусов выше температуры плавления под воздействием горячей верхней секции нагревателя (рис. 5.12).

Для того, чтобы более наглядно оценить взаимосвязь формы фронта кристаллизации с подобранными оптимальными значениями температур нагревателей были найдены стационарные фронты соответствующие этим значениям (рис. 5.11). Здесь под стационарным фронтом подразумевается фронт, вдоль которого величина

$$\frac{v_{cryst}}{\cos(\mathbf{n}, \mathbf{Z})} = V' = const, \text{ где } v_{cryst} - \text{локальная скорость кристаллизации в данной точке}$$

фронта (см. Приложение В). При этом константа V' не обязана точно совпадать с заданным значением V , то есть суммы скоростей вытягивания и опускания расплава. Это означает, что форма фронта при таком значении $V' \neq V$ будет оставаться постоянной при скорости вытягивания

$$V_{pull} = \left(1 - \frac{\rho_{cryst} r_{theor}^2}{\rho_{melt} R_{cru}^2} \right) V' \text{ (см. Приложение В).} \quad (5.13)$$

Таблица 5.4. Значение величины $\frac{v_{cryst}}{\cos(\mathbf{n}, \mathbf{Z})}$ для стационарных фронтов, показанных на рис. 5.11

Длина кристалла, см	$\frac{v_{cryst}}{\cos(\mathbf{n}, \mathbf{Z})}$, мм/ч
3.4	2.487
4.6	2.521
5.8	2.648
6.9	2.480

Однако как показано в таблице 5.4, отклонение этой величины V' от заданного значения скорости кристаллизации V , равного 2.5 мм/ч, оказывается небольшим - менее 6%. В то же самое время, из рис. 5.11 видно, что чем больше длина кристалла, тем дальше форма стационарного фронта от требуемой. Это говорит о том, что по мере роста кристалла уровень расплава падает и

становится все сложнее удержать фронт от уплощения, вызванного усилением роли вынужденной конвекции. Чтобы поддержать прогиб фронта в расплав необходимо создать такие тепловые условия, при которых вихрь вынужденной конвекции, поднимающийся по центру тигля, был бы достаточно холодным (рис. 5.13). Это достигается за счет охлаждения дна тигля, так чтобы расплав, протекая вдоль него по направлению к центру тигля, избавлялся от избыточного тепла. А охлаждение дна, в свою очередь, требует понижения температуры нижнего нагревателя. Однако его температуру нельзя понижать

слишком сильно из-за опасности переохлаждения расплава и риска появления паразитного кристалла растущего от дна тигля.

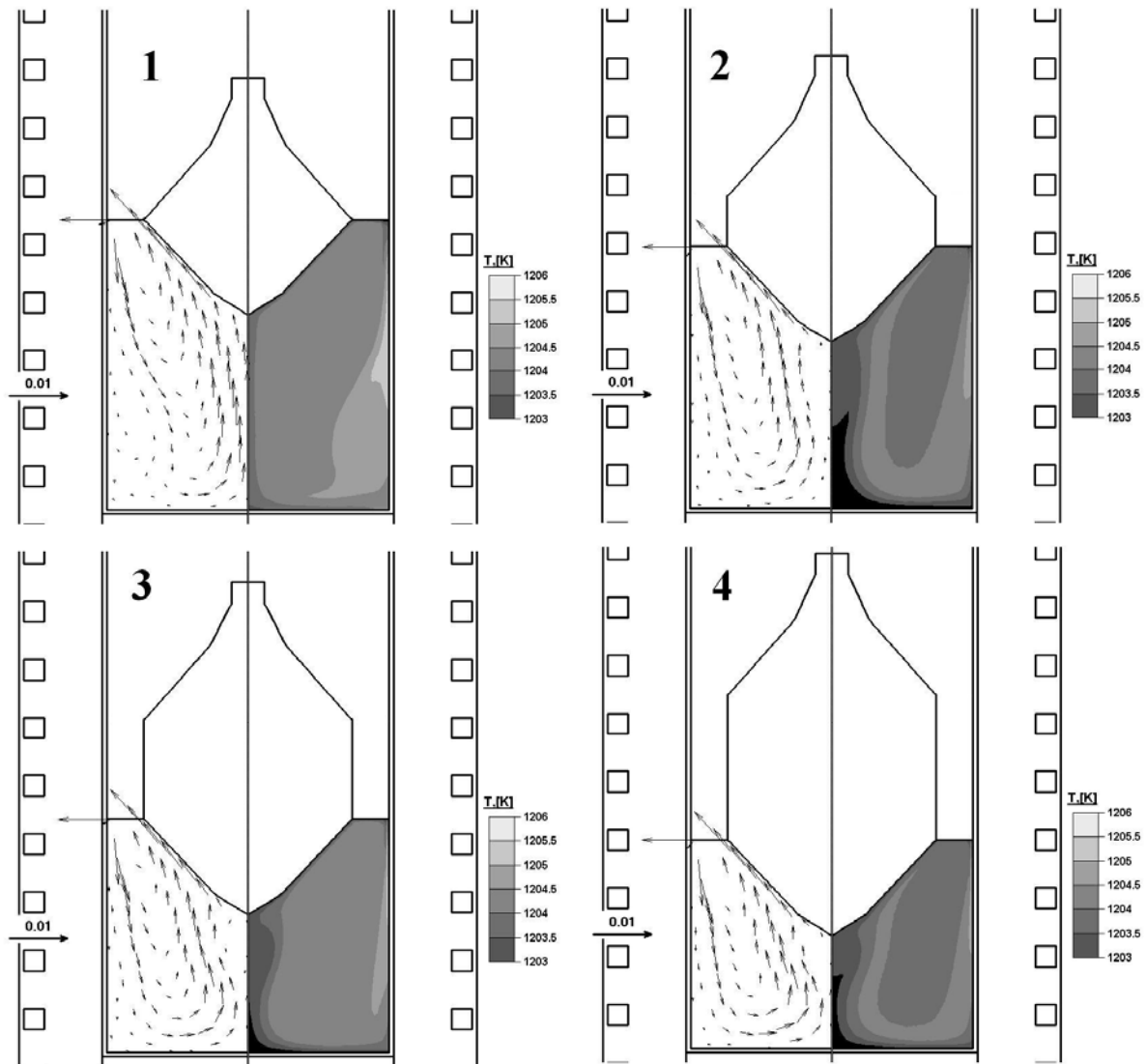


Рис. 5.13. Температурные поля и конвективные потоки в расплаве. (1) длина кристалла 3.4 см, (2) длина кристалла 4.6 см, (3) длина кристалла 5.8 см, (4) длина кристалла 6.9 см. Для оценки скорости течений на каждом рисунке приведен вектор, чья длина соответствует скорости течения 1 см в секунду.

Тем не менее, проведенные расчеты вселили надежду, что предложенный оптимизационный подход для выбора алгоритма управления нагревателями позволяет добиться роста кристалла с фронтом близким к оптимальному на стадии роста кристалла постоянного диаметра. Были выявлены основные тенденции управления нагревателями. Прежде всего, это то, что чем выше находится нагреватель, тем горячее он должен быть по отношению к остальным. Кроме того, температура нижнего нагревателя относительно среднего должна убывать с длиной кристалла, а температура верхнего нагревателя относительно среднего должна наоборот возрастать. Указанные тенденции были

использованы на втором этапе расчетов при прямом моделировании роста кристалла, начиная с момента его затравления, и позволили получить требуемый процесс роста.

5.6.2.2. Второй этап. Динамическое моделирование

Решение оптимизационной проблемы проводилось в статической постановке, в которой не учитываются ни нестационарные эффекты, ни динамика роста, ни влияние системы управления на процесс выращивания. Поэтому, для более глубокого понимания ростовых процессов была проведена серия расчетов по моделированию непосредственно роста кристалла в нестационарной (динамической) постановке. В этих расчетах использовалась описанная выше динамическая модель процесса Чохральского.

В данной серии расчетов использовалась та же система управления, что стоит на реальной установке. В ней управляющие температуры нагревателей $\bar{T}_i$ изменяются по уже приводившемуся выше закону

$$\frac{d\bar{T}_i}{dt} = k_{1,i} \left(\frac{dF}{dt} - \frac{dG}{dt} \right) + \frac{df_i}{dt}, \quad i = 1, 2, 3. \quad (5.14)$$

В расчетах полагалось, что коэффициент $k_{1,i}$ одинаков для всех трех нагревателей и на стадии разращивания убывает как линейная функция площади поперечного сечения заданного кристалла от 3 град/грамм до 0.1 град/грамм. По окончании разращивания, на стадии цилиндрического роста, коэффициент $k_{1,i}$ уже не меняется. Заданный вес G соответствовал кристаллу, который на стадии разращивания растет с постоянным углом наклона боковой поверхности к вертикали равным 45 градусам до тех пор, пока не достигнет диаметра 50 мм, после чего диаметр кристалла остается неизменным. Таким образом, заданная форма кристалла - это конический верх и круговой цилиндр в остальной части. Задаваемое смещение управляющей температуры f_i всегда полагалось кусочно-линейной функцией (следовательно, ее производная - кусочно-постоянная), с двумя линейными участками. Первый участок - это стадия разращивания кристалла, а второй - стадия цилиндрического роста. Причем для среднего нагревателя заданного смещения не было, т.е. $f_2 \equiv 0$. Таким образом, можно говорить не о задаваемом смещении для верхнего или нижнего нагревателей, а о разнице их температур относительно температуры среднего.

Управление тепловыделениями нагревателей осуществлялось по одинаковому для всех закону

$$\frac{dQ_i}{dt} = k_2 \left(\frac{d\bar{T}_i}{dt} - \frac{dT_i}{dt} \right) + \frac{k_2}{\tau} (\bar{T}_i - T_i), \quad (5.15)$$

где Q_i - плотность тепловыделения i -го нагревателя. Такая схема соответствует ПИ (пропорционально интегральному) регулятору, используемому на практике. Коэффициент τ - это время тепловой релаксации регулятора и его значение равное 100 с соответствовало тому, что заложено в реальном ПИ-регуляторе. Значение же второго управляющего коэффициента k_2 было подобрано экспериментально, и оно составляло 10^6 Вт/м³/град.

Чтобы найти начальное состояние системы, то есть распределение температуры во всех элементах установки, конвективные потоки в расплаве и начальную форму межфазной границы, проводилось моделирование «затравления» кристалла. При этом, так же как и в реальном процессе, в момент затравления управляющие температуры всех трех нагревателей полагались равными одному и тому же значению, которое находились из условия, что скорость кристаллизации в тройной точке

$$v_{cryst} = (V_{pull} + V_{melt}) \cos(\mathbf{n}, \mathbf{Z}) (1 + \tan(\mathbf{n}, \mathbf{Z}) \tan \varphi), \quad (5.16)$$

где φ – угол разрачивания кристалла, который во всех расчетах был равен 45 градусам. Это условие соответствует разрачиванию кристалла с углом наклона боковой поверхности к вертикали равным φ^* . Начальный радиус кристалла был взят равным 3 мм, что соответствует реальному размеру затравки.

После нахождения начального состояния запускался алгоритм нестационарного динамического моделирования процесса Чохральского, с помощью которого была проведена целая серия модельных расчетов. В первую очередь моделировался процесс выращивания кристалла со стандартным управлением, когда управляющие температуры всех трех нагревателей совпадали в течение всего процесса роста (рис. 5.14), то есть $f_{top} = f_{bottom} = 0$. Линии роста, приведенные на рис. 5.15 наглядно иллюстрируют суть проблемы сохранения фронта прогнутым в расплав. В то время как в конце стадии разрачивания и начале стадии цилиндрического роста форма фронта кристаллизации

* При заданном угле наклона боковой поверхности кристалла к вертикали скорость смещения тройной точки относительно кристалла $\mathbf{v}_{tri\ junction} = |\mathbf{v}_{tri\ junction}| (\sin \varphi \mathbf{e}_r - \cos \varphi \mathbf{Z})$, где $\mathbf{e}_r$ - единичный вектор, направленный вдоль горизонтальной оси r . При этом вертикальная составляющая данного вектора $-|\mathbf{v}_{tri\ junction}| \cos \varphi = -(V_{pull} + V_{melt})$, а нормальная по отношению к фронту $\mathbf{v}_{tri\ junction} \cdot \mathbf{n} = -v_{cryst}$. Учитывая то, что $\mathbf{e}_r \cdot \mathbf{n} = -\sin(\mathbf{n}, \mathbf{Z})$, получаем желаемое соотношение.

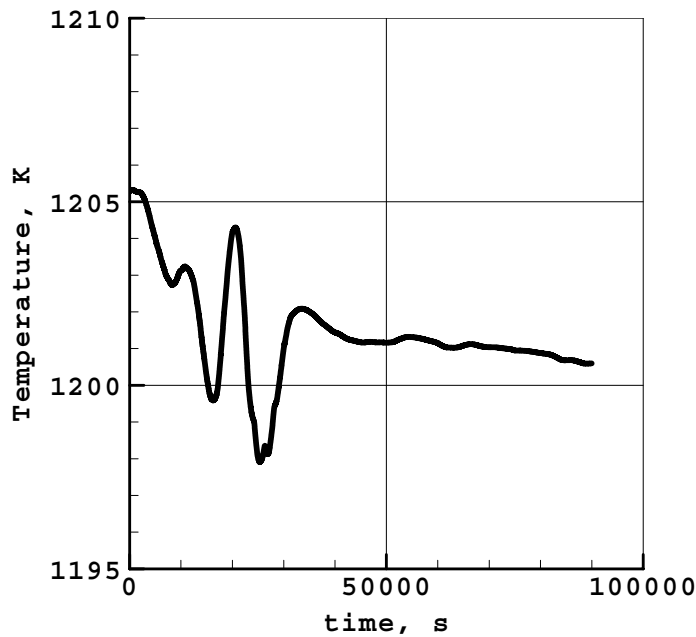


Рис. 5.14. Зависимость управляющей температуры от времени в процессе роста с одинаковым управлением всеми тремя нагревателями

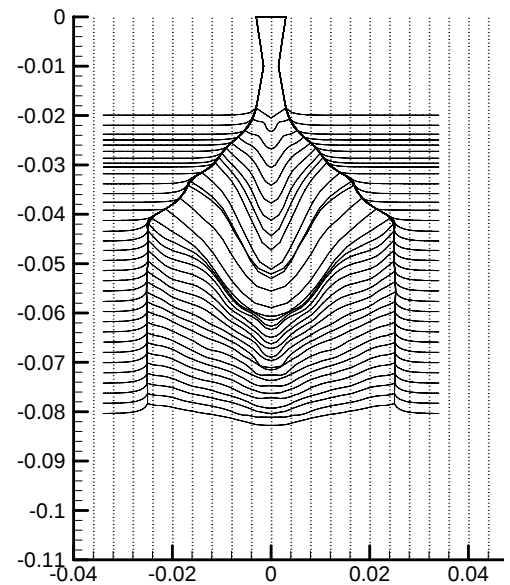


Рис. 5.15. Линии роста кристалла, показывающие изменение формы фронта кристаллизации. Нарисованы не только линии роста, но и положения свободной поверхности расплава в те же моменты времени. Все размеры в метрах

близка к оптимальной, то через 16 часов роста (что соответствует увеличению длины на 4 см, при скорости кристаллизации 2.5 мм в час) фронт кристаллизации становится уже практически плоским. Объясняется этот эффект обычным для метода Чохральского усилением влияния вынужденной конвекции по мере падения уровня расплава (рис. 5.16).

Однако внеся в управление изменения, основанные на результатах оптимизационных расчетов, удалось существенно продвинуться в борьбе с данным негативным явлением. Наилучших результатов удалось добиться, когда на стадии разращивания температура верхнего нагревателя относительно среднего нарастала со скоростью 1.2 град/час, а температура нижнего относительно среднего наоборот падала со скоростью 1.5 град/час. Таким образом, за время разращивания, которое составляло примерно 10 часов, набегала следующая разница температур: +12 градусов для верхнего нагревателя и -15 для нижнего. Затем, на стадии цилиндрического роста изменение относительных температур производилось в том же «направлении», но с меньшей скоростью. При этом за 14 часов (именно столько времени требуется, чтобы при скорости кристаллизации 2.5 мм/ч длина кристалла выросла на 3.5 см) цилиндрического роста разница между верхним и средним достигала 16 градусов, а между нижним и средним -20 градусов (рис. 5.17). Кристалл, выращенный при таком управлении, сохраняет прогнутый в расплав фронт на всем протяжении процесса роста (рис. 5.18). Линии роста на стадии

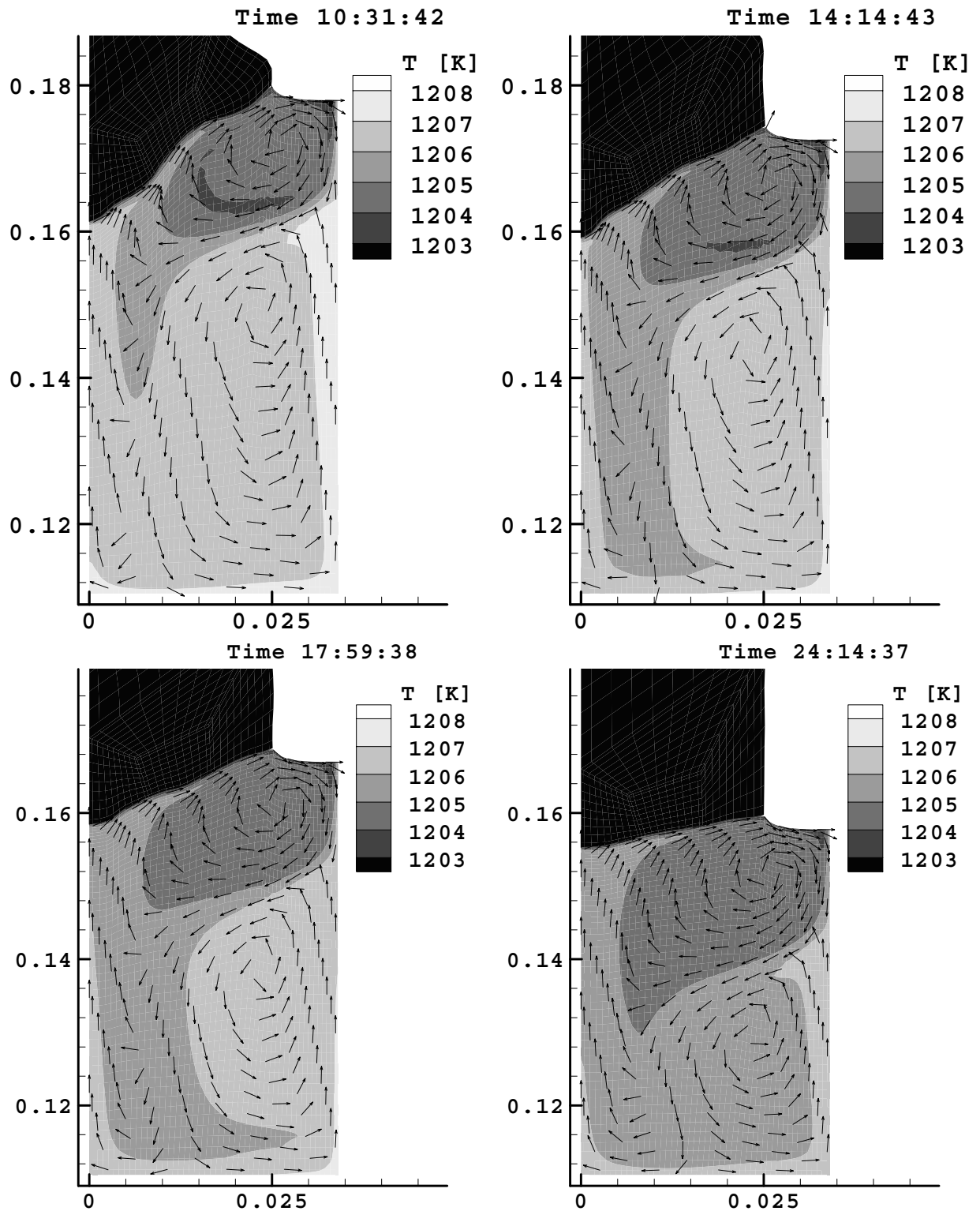


Рис. 5.16. Температурные поля и конвективные потоки в расплаве на разных стадиях цилиндрического роста. В верхнем правом углу указано время от момента затравления

роста кристалла постоянного диаметра параллельны друг другу, что указывает на отсутствие каких-либо колебаний и более-менее быстрых изменений формы фронта. Тем не менее, следует отметить, что прогиб фронта кристаллизации по мере роста все-таки медленно уменьшается и в самом конце процесса оказывается меньше прогиба оптимального фронта, заданного в задаче оптимизации, и составляет 1.5, а не 2.3 см, что

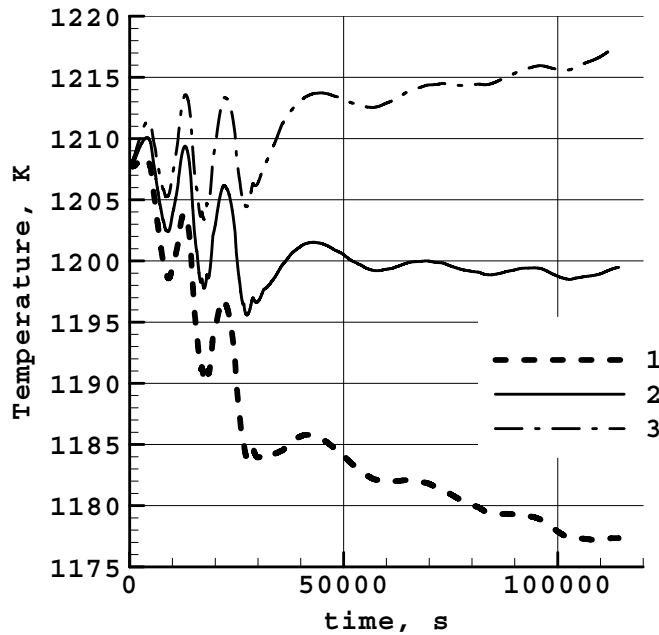


Рис. 5.17. Изменение управляющей температуры нагревателей в течение роста кристалла. 1 – нижний нагреватель, 2 – средний, 3 – верхний

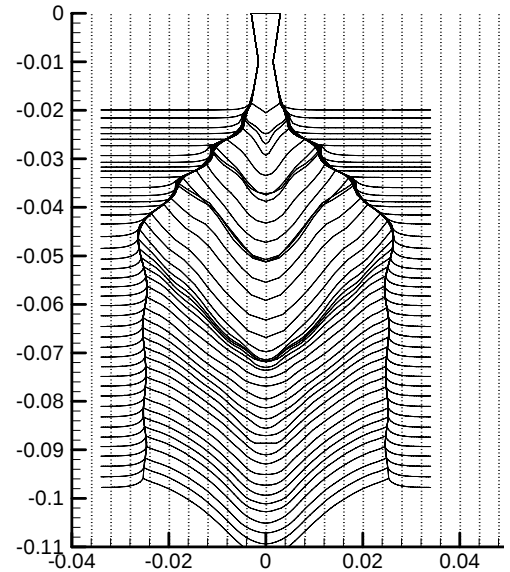


Рис. 5.18. Линии роста кристалла в случае модернизированного алгоритма управления нагревателями

совпадает с прогибом стационарного фронта (рис. 5.11) на заключительной стадии цилиндрического роста.

Чтобы понять, за счет чего удалось столь существенно ослабить эффект уплощения фронта, следует сравнить картину температурных полей и течений в расплаве для стандартного (рис. 5.16) и оптимизированного (рис. 5.19) процессов. Видно, что в последнем варианте вихрь вынужденной конвекции ничуть не слабее, однако, имеет место эффект сильного охлаждения придонной области расплава. За счет этого поднимающийся по центру поток расплава имеет очень низкую температуру близкую к температуре кристаллизации. Поэтому он не способен существенно проплавить кристалл в центральной части и тем самым заметно уменьшить прогиб фронта в расплав. Но здесь проявляет себя и главная опасность при выращивании кристаллов с оптимизированным управлением – внутри объема расплава возникают переохлажденные области. Они расположены в придонной области тигля и на протяжении большей части процесса выращивания их объем не слишком значителен, но в последние часы часть расплава, которая находится ниже температуры кристаллизации, уже настолько велика, что может достигать фронта. Это говорит о риске зарождения паразитного кристалла, растущего со дна тигля. Таким образом, при выборе оптимального управления в реальном процессе лучше немного перестраховаться и на последних этапах роста использовать то управление, которое не приводит к столь существенному охлаждению расплава.

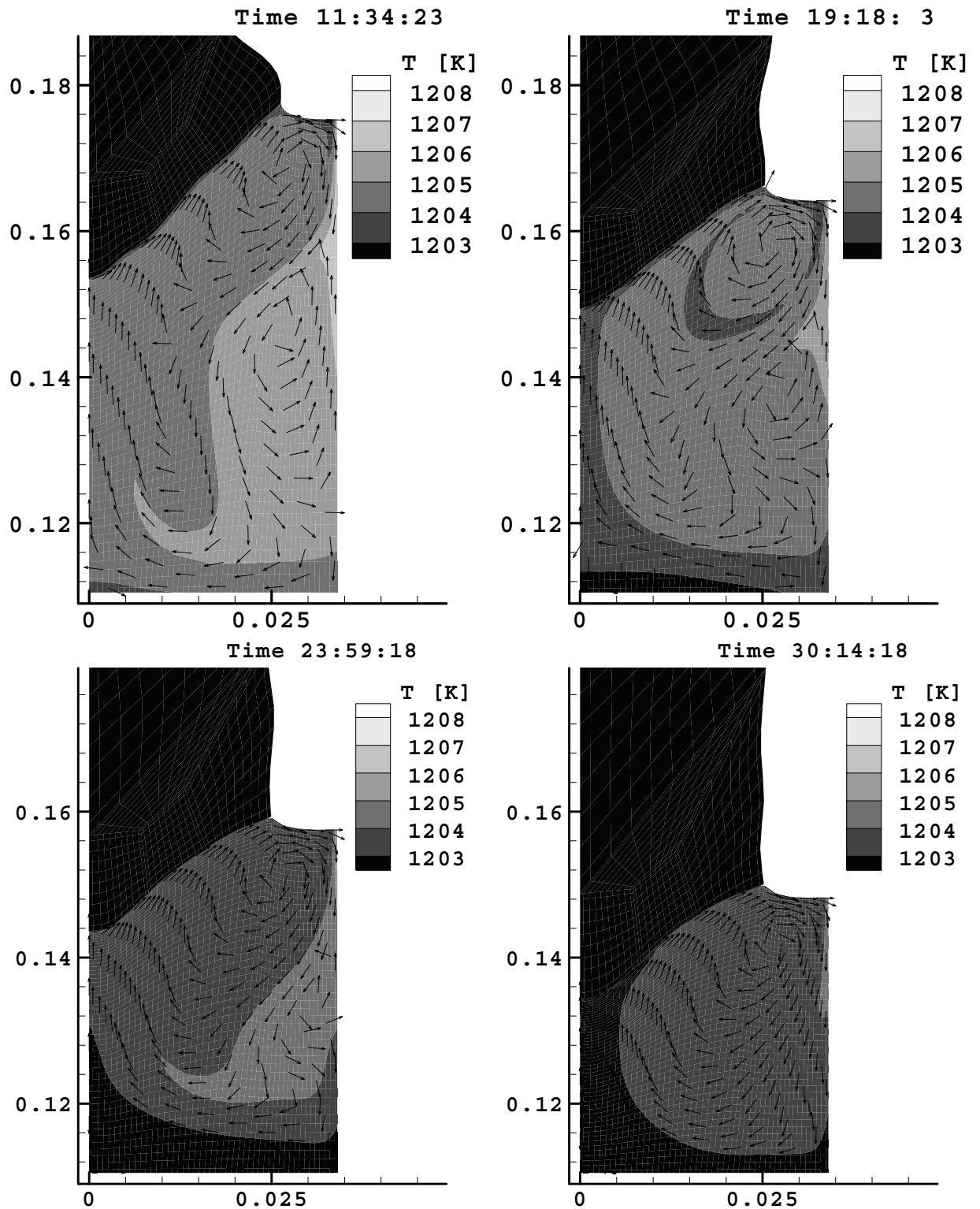


Рис. 5.19. Температурные поля и конвективные потоки в расплаве на разных стадиях цилиндрического роста в случае модернизированного алгоритма управления нагревателями

Заметим, что вполне удовлетворительная форма кристалла говорит о том, что как динамическая модель процесса Чохральского, так и модель управления ростом кристалла в целом правильно отражают реальный процесс роста. С другой стороны, и в этом, и в других подобных расчетах, на стадии разращивания наблюдались сильные колебания управляющей температуры, гораздо сильнее, чем в реальных процессах. Скорее всего, это

связано с тем, что на практике кристалл германосилленита имеет форму достаточно далекую от осесимметричной из-за сильного ограничения фронта кристаллизации. Колебания управляющей температуры тесно связаны с отклонением формы кристалла от заданной. При росте осесимметричного кристалла отклик системы (в виде изменения формы) на управляющее воздействие (температуры нагревателей) происходит медленнее, чем для кристалла, не обладающего осевой симметрией, поскольку угол наклона боковой поверхности кристалла тесно связан с мениском расплава и эта связь у осесимметричного кристалла оказывается сильнее. Таким образом, виртуальная, расчетная система обладает большей инерционностью и поэтому может быть подвержена более сильным колебаниям управляющего воздействия при параметрах управления соответствующих реальной, менее инерционной, системе.

5.6.2.3. Выводы по результатам расчетов

Прежде всего, расчеты показывают, что путем введения дополнительных поправок в систему управления многосекционным нагревателем **можно существенно повлиять** на форму фронта кристаллизации в течение роста кристалла. В стандартном ростовом процессе, при равных температурах нагревателей, фронт достаточно быстро уплощается, что связано с нарастанием роли вынужденной конвекции по мере падения уровня расплава. Было показано, что избежать сильного уменьшения прогиба фронта можно за счет выставления на нагревателях температур в порядке, противоположном тому, что обычно используется: нижний нагреватель (который, вроде бы, должен плавить расплав!) – самый холодный, верхний – самый горячий. При этом требуемый эффект (поддержание заданной формы фронта) достигается не за счет усиления естественной конвекции и ослабления вынужденной. При таком соотношении диаметра тигля и радиуса кристалла, и при таком объеме расплава на заключительных стадиях роста вынужденная конвекция всегда играет доминирующую роль. Главная причина состоит в охлаждении вихря вынужденной конвекции. Холодный вихрь уже не в силах существенно проплавить кристалл. Однако следует помнить, что борьба за охлаждение расплава приводит к опасности возникновения в нем переохлажденных областей. Это может негативно повлиять как на внутренне качество кристалла, так и привести к появлению паразитного кристалла, растущего от дна тигля.

5.7. Экспериментальная проверка

На основе рекомендаций, полученных в результате моделирования, было предложено попробовать вырастить кристалл германосилленита по новой, отличной от стандартной, программе управления. Начиналась эта программа также как стандартный процесс роста, с одинакового для всех трех нагревателей значения управляющей температуры – температуры затравления. Затем на протяжении всей стадии разрачивания между верхним и средним, а также нижним и средним нагревателями разница температур нарастала так, чтобы к концу разрачивания температура верхнего нагревателя была на 7.5 градусов выше, а температура нижнего на 10 градусов ниже, чем температура среднего. После, на стадии цилиндрического роста, перепад температур продолжал равномерно увеличиваться. Через 6 часов разница между верхним и средним нагревателями составляла уже 11 градусов, а между средним и нижним 14.5 градусов.

По новой программе было выращено несколько кристаллов. Один процесс был проведен от начала до конца (рис. 5.20), а два других заканчивались в самом конце разрачивания, в начале стадии цилиндрического роста (рис. 5.21).

Можно видеть, что форма фронта кристаллизации несколько отличается от заложенной в расчет оптимальной. Отношение глубины прогиба фронта кристаллизации в расплав к диаметру кристалла лежит в пределах 0.3-0.32, в то время как для оптимального фронта указанное соотношение составляет $23/50 = 0.46$. Это можно объяснить несколькими моментами. Во-первых, ограничением фронта. Ограниченный фронт должен иметь, по всей видимости, более уплощенную форму, чем фронт округлый, из-за неравномерности переохлаждения граней. Во-вторых, в данных экспериментах были заложены не оптимальные, а несколько меньшие перепады температур между нагревателями. Это было сделано из осторожности, памятуя о вероятности слишком сильного переохлаждения расплава. Ну и, кроме того, нельзя забывать, что расчет - это расчет, а эксперимент – это эксперимент, и значения многих физических параметров точно неизвестны, поэтому результаты моделирования могут отличаться от того, что имеет место на практике.

Тем не менее, несмотря на отличие в глубине прогиба, в другом, более важном аспекте, наблюдается хорошее совпадение результатов. Форма фронта на протяжении всей стадии цилиндрического роста остается практически неизменной. При этом предварительный анализ показывает достаточно высокое качество кристаллов – во всяком случае, по пузырькам и включениям.



Рис. 5.20.

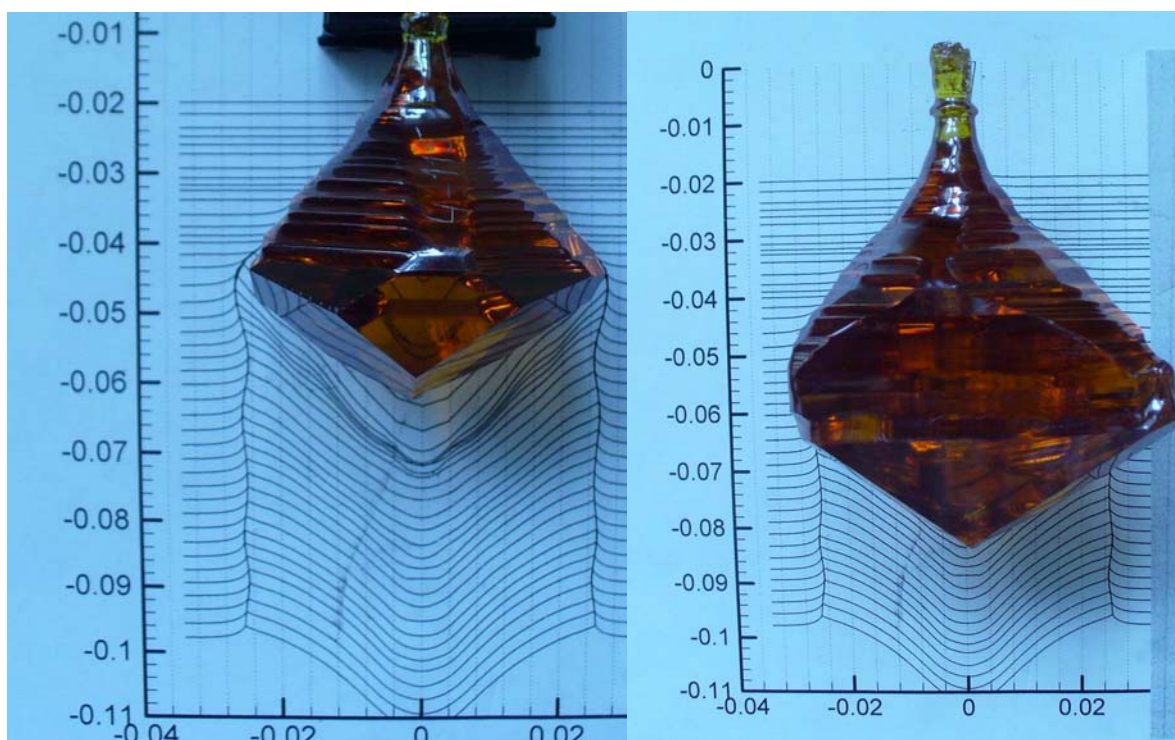


Рис. 5.21.

5.8. Выводы

В рамках данной работы впервые предложен научно обоснованный подход к нахождению режима управления многосекционным нагревателем путем решения специальной задачи оптимизации. С помощью данного подхода проведено исследование роста кристалла германосилленита и найден такой режим управления, который позволил получать более качественные кристалла. Кроме того, было установлено, что

1. Путем корректировки тепловых условий на нагревателях **можно управлять** формой фронта кристаллизации
2. При равных температурах нагревателей фронт быстро уплощается по мере своего роста и падения уровня расплава из-за усиления роли вынужденной конвекции
3. Борьба за уменьшение прогиба фронта приводит к тому, что нижний нагреватель становится самым холодным, а верхний – самым горячим
4. Требуемый эффект (поддержание заданной формы фронта) достигается не за счет усиления естественной конвекции и ослабления вынужденной, поскольку на заключительных стадиях роста **вынужденная конвекция всегда играет доминирующую роль**. Причина состоит в охлаждении вихря вынужденной конвекции. Холодный вихрь уже не в силах сильно проплавить кристалл
5. Охлаждение расплава приводит к опасности возникновения переохлажденных областей в придонной области, что может вызвать появление паразитного кристалла.

Результаты численных исследований, представленных в данной главе, опубликованы в работах [66] и [67].

6. Моделирование тепловых полей и оптимизация тепловой зоны при выращивании лент сапфира (Al_2O_3) методом Степанова

В данной главе приведены результаты исследований процесса выращивания базисноограниченных (БО) лент сапфира методом Степанова в Физико-техническом институте им. А.Ф. Иоффе. Как уже отмечалось выше (см. «Введение»), БО-ленты сапфира (то есть ленты, чья плоскость параллельна кристаллографической плоскости (0001)) представляют большой практический интерес, но выращивать их значительно сложнее, чем ленты сапфира других ориентаций, поскольку в БО-лентах очень трудно предотвратить образование блоков.

Известно, что дефектная структура (остаточные напряжения, блочность, дислокации) в кристаллах, выращиваемых из расплава, связана, главным образом, с пластической деформацией под действием термических напряжений, появляющихся вследствие нелинейности температурного поля в растущем кристалле. Особенно сильно это проявляется при выращивании профилированных кристаллов в форме лент, поскольку термические напряжения увеличиваются пропорционально квадрату ширины ленты и обратно пропорционально ее толщине. Кроме того, касательные компоненты термических напряжений, действующие в системах скольжения, в лентах сильно зависят от кристаллографической ориентации.

В работах [98], [99] и [100] методами избирательного химического травления и рентгеновской дифракционной топографии было изучено образование дислокационной и блочной структуры в БО лентах и предложена модель, объясняющая образование в них блоков. Оказалось, что в рассматриваемом случае не работает легкая базисная система скольжения, которая в других ориентациях, с одной стороны, снимает возникающие термические напряжения, а, с другой, не дает дислокаций, образующих блочные границы. В результате в БО и близких к ним лентах (угол разориентации меньше 3 градусов) работает более жесткая призматическая система скольжения, дающая дислокации, которые пересекают плоскость базиса и образуют границы экспериментально наблюдаемых блоков. Таким образом, чтобы предотвратить образование дислокаций в призматической системе скольжения и, следовательно, предотвратить образования блоков, требования к однородности распределения температуры по ширине вытягиваемой БО ленты и к кривизне температурного поля в ней должны быть существенно выше, чем в лентах другой ориентации, и необходимо предпринимать специальные меры, чтобы

удовлетворить этим требованиям. Именно по этой причине, базисно ограниченные ленты растут блочными в обычных тепловых зонах, в которых легко выращиваются ленты других ориентаций. Кроме того, необходимо отметить, что на образование блоков влияют также термически активированные движения дислокаций путем переползания. Поэтому для противодействия образованию блоков может оказаться полезным также ограничение времени пребывания кристалла при очень высоких температурах.

В работе моделировалось выращивание лент сапфира шириной 30 и 50 мм. Особенность ситуации состоит в том, что для 30 мм лент экспериментатором удалось найти такую конфигурацию тепловых экранов, которая позволяет выращивать безблочные ленты, а для 50 мм - нет. Первоначально, для выращивания БО-лент лейкосапфира шириной 30 мм использовалась обычная тепловая зона с системой горизонтальных экранов (рис. 6.1а), применяемая для выращивания лент других ориентаций. Однако оказалось, что в этой тепловой зоне ленты всегда получаются блочными [73]. Как уже отмечалось выше, образование блочной структуры связано с высоким уровнем термических напряжений в районе фронта кристаллизации, что в свою очередь объясняется сильной кривизной температурного поля вследствие значительного отвода тепла из объема кристалла посредством излучения [70], [73], [71], [72]. Чтобы уменьшить эту кривизну, тепловая зона была модифицирована путем замены горизонтальных экранов наклонными (рис. 6.1б). Предполагалось, что при такой модификации зоны усилится приток теплового излучения от нагревателя к области кристалла вблизи межфазной границы, в результате чего кривизна распределения температуры в этой области станет меньше. Предложенная модификация оказалась удачной и ленты, выращиваемые в такой зоне, не имели блоков и обладали достаточно высоким структурным совершенством.

Однако применение аналогичной модификации для выращивания 50 мм лент не привело к желаемому результату. Стабильного, повторяемого процесса выращивания безблочных 50 мм лент получить не удалось. Поэтому, была сформулирована следующая задача:

- разработать численную модель глобального теплообмена при выращивании лент сапфира;
- с ее помощью провести численное изучение распределений температуры и термоупругих напряжений в лентах в зависимости от конструктивных особенностей тепловой зоны и выяснить различия в тепловых условиях роста БО лент шириной 30 и 50 мм;

- найти такую конструкцию теплового узла, которая позволила бы существенно снизить уровень термоупругих напряжений в 50 мм ленте (прежде всего в самой горячей, нижней, ее части).

При этом, в соответствии с техническими условиями, возможные изменения в тепловом узле ограничивались практически лишь системой тепловых металлических экранов, расположенных вокруг ленты.

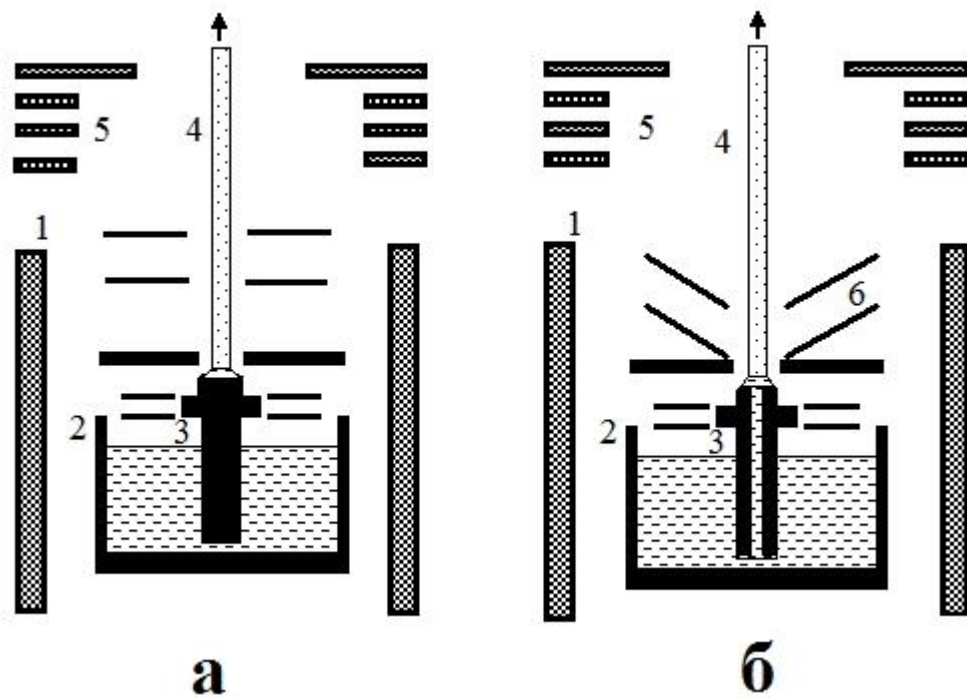


Рис. 6.1. Схемы тепловых зон для выращивания БО-ленты, шириной 30 мм. *а* – только горизонтальные тепловые экраны, *б* – установлены новые наклонные экраны над закрывающими тигель горизонтальными: 1 – нагреватель, 2 – тигель с расплавом, 3 – формообразователь, 4 – кристалл (сечение БО-ленты), 5 – графитовые экраны, 6 – молибденовые экраны.

6.1. Постановка задачи и алгоритм численного решения

На рис. 6.2 приведена схема кристаллизационного узла, для которого проводились численные исследования. Данная кристаллизационная установка, в целом, обладает цилиндрической симметрией. Исключение составляет только ее центральная часть, которая содержит графитовый нагреватель, тигель, формообразователь, сам кристалл и систему молибденовых экранов вокруг него. Снаружи эти компоненты установки окружены термоизоляцией, состоящей из полых графитовых экранов, заполненных углеграфитовым войлоком. Вся эта конструкция находится внутри замкнутой стальной камеры, стенки которой постоянно охлаждаются практически до комнатной температуры.

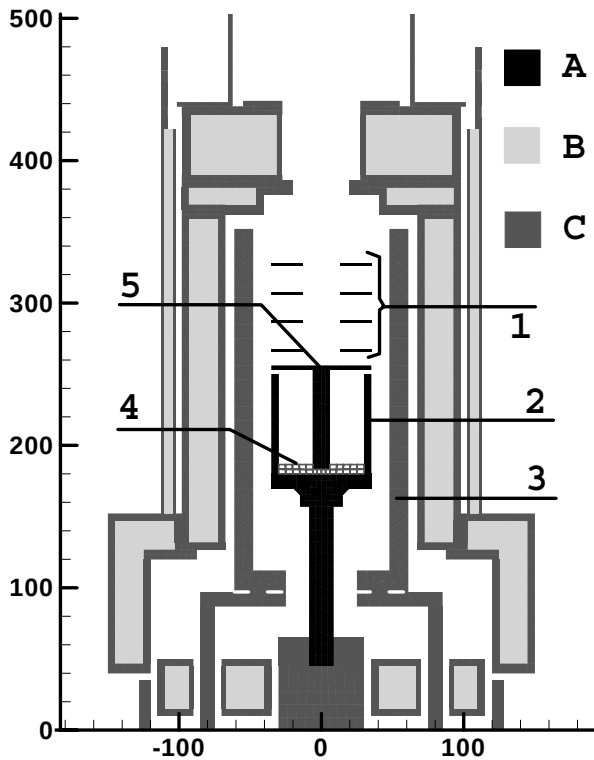


Рис. 6.2. Схема установки. 1 – экранирующая система, 2 – тигель, 3 – нагреватель, 4 – расплав, 5 – формообразователь. Буквами и цветом обозначены материалы узла: А – молибден, В – углеграфитовый войлок, С – графит.

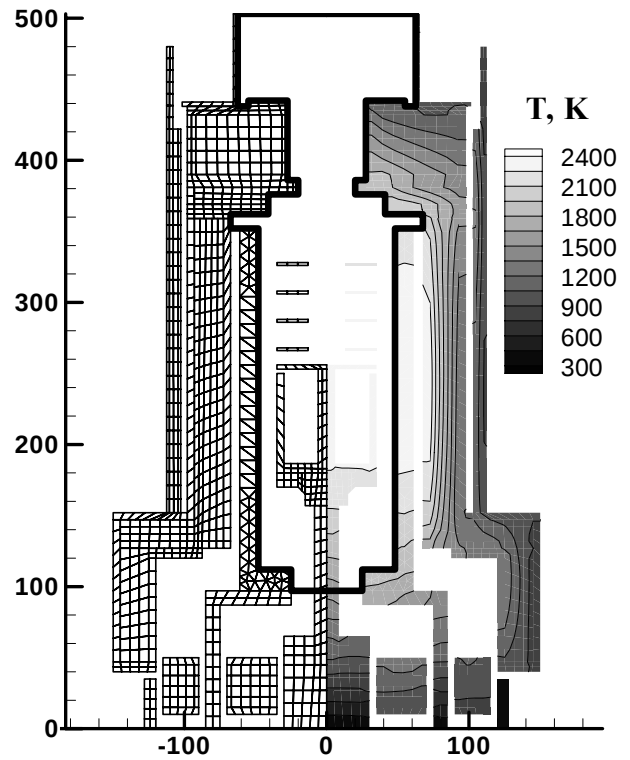


Рис. 6.3. Слева – расчетная сетка осесимметричной задачи, а справа – температурные поля для этого же случая. Жирная линия очерчивает область решения трехмерной задачи.

Проведение расчетов в полностью трехмерной постановке представляется чрезвычайно трудоемким. Сама геометрия установки подталкивает к тому, чтобы использовать трехмерную постановку только для проведения расчетов в центральной части кристаллизационного узла. В этой связи моделирование разбивалось на два этапа. На первом из них с помощью коммерческого пакета CGSim [69] решалась задача глобального теплообмена во всей установке в осесимметричном приближении. В этом случае лента сапфира исключалась из рассмотрения, а система металлических экранов заменялась на систему, состоящую из осесимметричных кольцевых экранов. Найденные на первом этапе температурные поля служили для задания краевых условий на втором этапе, на котором решалась задача радиационно-кондуктивного теплообмена (РКТ) уже в трехмерном приближении, но не во всей установке, а только во внутренней ее части (рис. 6.3 и 6.4). Эта область включала в себя ленту сапфира, формообразователь, тонкий

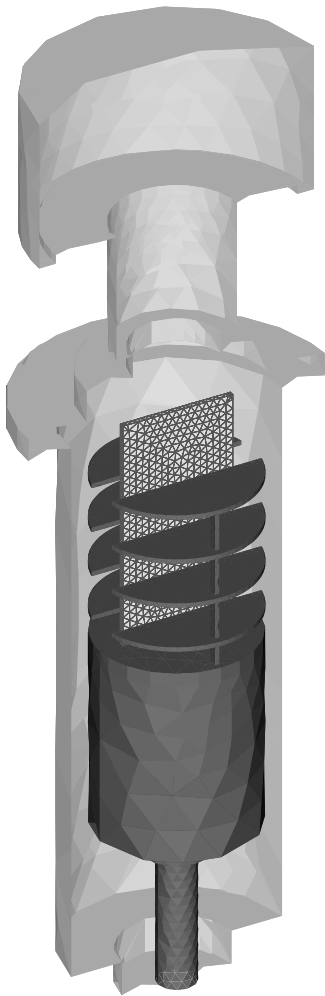


Рис. 6.4. Расчетная область трехмерной задачи в разрезе

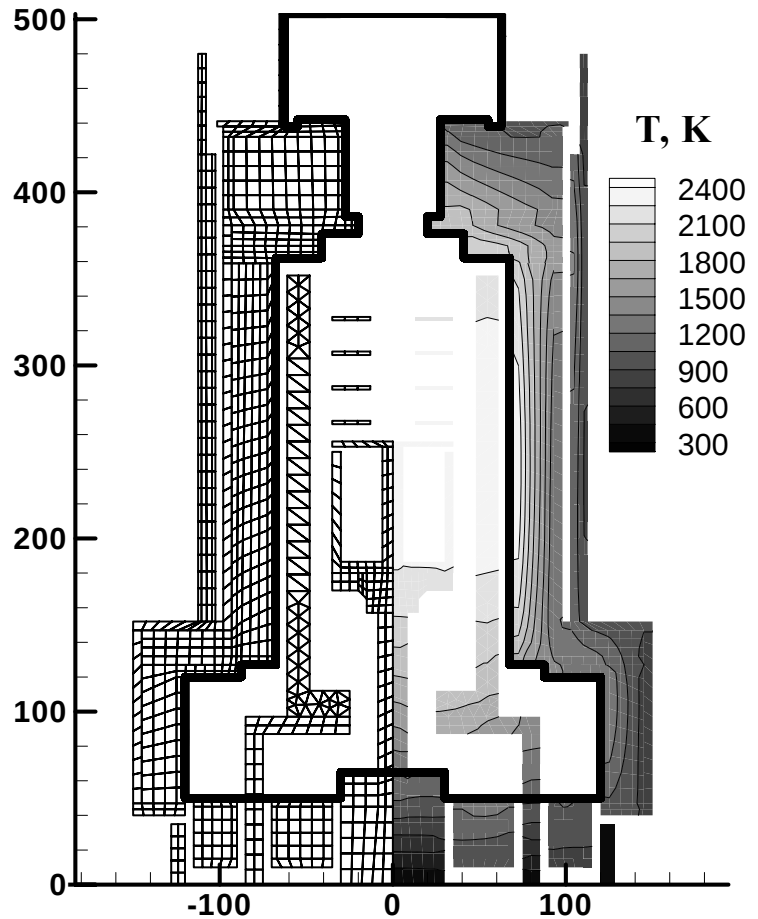


Рис. 6.5. Жирной линией очерчена расширенная расчетная область трехмерной задачи

слой расплава между формообразователем и кристаллом, систему молибденовых экранов, тигель с расплавом и часть свободного пространства внутри тепловой зоны. Моделирование теплообмена на втором этапе проводилось с помощью специально разработанной для этой цели программы расчета глобального радиационно-кондуктивного теплообмена в трехмерных областях. Перенос тепла излучением внутри ленты и в свободном пространстве около нее вычислялся с использованием метода, описанного в главе 2, а распределение температуры в расплаве и твердых блоках тепловой зоны находилось из решения уравнения теплопроводности. Конвекцией в расплаве пренебрегалось. Необходимо подчеркнуть, что подобное моделирование было выполнено впервые. До сих пор трехмерные задачи РКТ применительно к росту кристаллов нигде в мире не рассматривались.

Первоначально, в нескольких пробных расчетах, для решения задачи в трехмерной постановке использовалась расширенная область, включающая в себя еще и графитовый резистивный нагреватель (рис. 6.5 и 6.6). Предполагалось, что хотя форма нагревателя и обладает цилиндрической симметрией, его температура может быть распределена

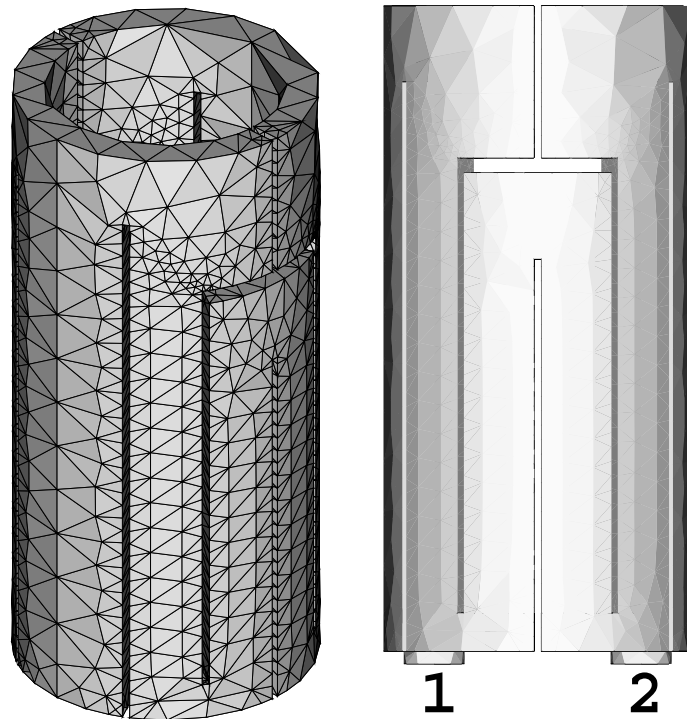


Рис. 6.6. Резистивный нагреватель. Справа – вид сбоку. 1 и 2 – тоководы.

неосесимметрично. Дело в том, что поверхность нагревателя покрыта сложной системой разрезов (рис. 6.6), которая приводит к сильной неоднородности распределения плотности электрического тока и джоулева тепловыделения. Однако, как показали численные расчеты (см. Приложение С), отклонения от цилиндрической симметрии в распределении температуры нагревателя оказались весьма незначительными. Причиной тому служит, прежде всего, высокая теплопроводность графита (см. табл. 6.1), которая сильно ослабляет влияние неоднородности распределения объемного тепловыделения. Кроме того, степень черноты графита близка к единице. Это приводит к тому, что температуры на разных краях узких вертикальных разрезов оказываются близкими друг к другу, что делает распределение температуры в радиальном направлении еще более равномерным. Поэтому в дальнейшем все расчеты выполнялись в предположении однородного и осесимметричного распределения тепловыделения в нагревателе, что позволило существенно сократить область решения трехмерной задачи.

Наличие тонкого слоя расплава между лентой сапфира и формообразователем учитывалось следующим образом. Поскольку толщина этого слоя мала (порядка десятых долей миллиметра), то прямой расчет теплообмена в нем не производился. Вместо этого граница кристалл-формообразователь «расщеплялась» на две. На одной из них, смежной с лентой сапфира, накладывалось условие на равенство температуры температуре плавления T_{melt}

$$T = T_{melt}. \quad (6.1)$$

Таблица 6.1. Теплофизические свойства материалов тепловой зоны и параметры роста лент сапфира в методе Степанова

Теплопроводность графита, Вт/(см К)	0.4	Скрытая теплота плавления, Дж/см ³	4264
Теплопроводность углеграфитового войлока, Вт/(см К)	0.01	Скорость вытягивания ленты, мм/мин	0.7
Теплопроводность молибдена, Вт/(см К)	1.1	Показатель преломления кристалла сапфира	1.78
Теплопроводность кристалла сапфира, Вт/(см К)	0.03	Коэффициент поглощения кристалла сапфира, см ⁻¹	0.2
Теплопроводность расплава сапфира, Вт/(см К)	0.03	Степень черноты графита	0.9
Температура плавления сапфира, К	2323	Степень черноты молибдена	0.2
Толщина слоя расплава в центре формообразователя, мм	0.15	Степень черноты поверхности расплава	0.9
Плотность кристалла сапфира, г/см ³	3.5		

На другой стороне (смежной с формообразователем), ставилось условие на тепловой поток

$$-k_{Mo} \frac{\partial T}{\partial n} = Q_{res}, \quad (6.2)$$

где нормаль $\mathbf{n}$ является внешней по отношению к поверхности формообразователя, k_{Mo} - коэффициент теплопроводности молибденового формообразователя, а тепловой поток в правой части равенства (6.2) выражался как

$$Q_{res} = -k_{crys} \frac{\partial T_{cr}}{\partial n} + \mathbf{q}^r \cdot \mathbf{n} - L V_{cr}, \quad (6.3)$$

где k_{crys} – это теплопроводность кристалла сапфира, T_{cr} - температура кристалла, $\mathbf{q}^r$ – вектор плотности потока теплового излучения в кристалле, L – скрытая теплота плавления сапфира, а V_{cr} – скорость вытягивания ленты.

Радиационный поток $\mathbf{q}^r$ находился из решения трехмерной задачи радиационно-кондуктивного теплообмена в области, показанной на рис. 6.3 и 6.4. При этом полагалось, что расплав непрозрачен, фронт кристаллизации черный, поверхность молибденовых элементов зеркально отражает тепловое излучение, поверхность ленты также зеркально отражающая и преломляющая (френелевская), а все остальные поверхности – диффузные. Полагалось также, что коэффициент поглощения сапфира не зависит от длины волны и температуры (то есть при моделировании радиационного теплопереноса использовалось односкоростное, серое приближение). Последнее

предположение основано на том, что, во-первых, температура в ленте меняется не слишком сильно, и, во-вторых, коэффициент поглощения слабо зависит от длины волны в районе максимума излучения абсолютно черного тела для рассматриваемого диапазона температур. Поэтому, в расчетах для сапфира использовалось усредненное по Планку при температуре равной температуре плавления значение коэффициента поглощения.

Поскольку толщина слоя расплава h_{melt} мала, ее можно оценить выражением

$$h_{melt} = k_{melt} \frac{\Delta T}{Q_{res}}, \quad (6.4)$$

где ΔT равна разнице температур между верхней кромкой формообразователя и температурой плавления сапфира T_{melt} , а k_{melt} – теплопроводность расплава.

Выражение (6.4) использовалось при моделировании для того, чтобы оценить толщину слоя расплава h_{melt} в средней части верхней кромки формообразователя (или, что то же самое, в средней части фронта кристаллизации). Эта толщина зависит от тепловыделения в нагревателе, которое, как уже упоминалось выше, полагалось однородным по объему. При этом значение плотности тепловыделения изначально не известно и должно быть как-то подобрано. В приведенных расчетах, тепловыделение подбиралось таким образом, чтобы толщина расплава в центре фронта равнялась заданной величине (табл. 6.1).

После подбора нужного тепловыделения нагревателя проводилось моделирование теплообмена во всей ростовой установке. Затем, найденное распределение температуры в ленте использовалось для расчета термоупругих напряжений. Именно с помощью последних и оценивалось «качество» той или иной тепловой зоны. Предполагалось, что чем выше термоупругие напряжения и чем больше они превосходят критические напряжения, соответствующие началу пластической деформации, тем тепловая зона «хуже».

Напряжения находились из решения стационарной трехмерной анизотропной задачи термоупругости в рамках классической линейной теории. Система определяющих уравнений относительно трех неизвестных физических полей: перемещений, деформации и напряжений состоит из трех групп уравнений: кинематических соотношений, определяющих уравнений и уравнений равновесия в области тела. При отсутствии начальных напряжений в теле эта система может быть записана в следующем символьно-матричном виде:

$$\mathbf{e} = \mathbf{D}\mathbf{u}, \quad (6.5a)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} \left(\mathbf{e} - (T - T_{ref}) \boldsymbol{\alpha} \right), \quad (6.5b)$$

$$\mathbf{D}^T \boldsymbol{\sigma} + \rho_{cryst} \mathbf{g} = 0, \quad (6.5c)$$

где $\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_x \\ u_y \\ u_z \end{bmatrix}$, $\mathbf{e} = \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \\ 2e_4 \\ 2e_5 \\ 2e_6 \end{bmatrix}$, $\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix}$ – матричные вектора перемещений, деформаций и

напряжений, соответственно; нижние цифровые индексы соотносятся с кристаллофизическими координатами x, y, z^* так, как это показано в табл. 6.2;

$$\mathbf{D}^T = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} & 0 & \frac{\partial}{\partial x} & 0 & \frac{\partial}{\partial z} \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial z} & 0 & \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} \end{bmatrix} - \text{символическая матрица, состоящая из частных}$$

производных; $\mathbf{C}$ – симметричная матрица упругих модулей; $\boldsymbol{\alpha} = \begin{bmatrix} \alpha \\ \alpha \\ \alpha \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$, где α – коэффициент

температурного расширения среды; $\mathbf{g} = \begin{bmatrix} g_x \\ g_y \\ g_z \end{bmatrix}$ – вектор ускорения свободного падения,

ρ_{cryst} – плотность кристалла сапфира.

Замечание. Здесь и далее кристаллофизические координаты обозначаются строчными буквами x, y, z , а глобальные координаты заглавными X, Y, Z . При этом ось X ортогональна к плоскости ленты, ось Y горизонтальна и лежит в плоскости ленты, а ось Z направлена вертикально вверх.

* Лейкосапфир относится к тригональной сингонии, кристаллографический класс -3m. Кристаллофизические оси были выбраны таким образом, что направление оси z совпадает с $[0001]$, оси y с $[01-10]$, а ось x ортогональна z и y . Напомним, что поскольку плоскость ленты совпадает с плоскостью базиса, ось z направлена перпендикулярно плоскости ленты.

Таблица 6.2. Связь индексов с кристаллофизическими координатами

Индекс	1	2	3	4	5	6
Пара кристаллофизических координат	xx	yy	zz	yz	zx	xy

Уравнение (6.5b) представляет собой закон Гука, в котором учтено термическое расширение среды. При этом в качестве температуры T_{ref} использовалось значение температуры в самой верхней точке ленты. Именно в этом месте располагалась точка жесткого закрепления кристалла. На всей остальной поверхности ленты предполагалось отсутствие какого-либо внешнего воздействия (что означает равенство нулю нормальных компонент тензора напряжений).

Матрица упругих модулей для сапфира имеет вид [101]:

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{22} & c_{13} & -c_{14} & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ c_{14} & -c_{14} & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & c_{14} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{14} & \frac{c_{11} - c_{12}}{2} \end{bmatrix}. \quad (6.6)$$

При этом в расчетах использовались следующие значения коэффициентов жесткости в кристаллофизической системе координат [101]:

$$\begin{aligned} c_{11} &= 49.68 \cdot 10^4 \text{ Н/мм}^2, \\ c_{33} &= 49.81 \cdot 10^4 \text{ Н/мм}^2, \\ c_{44} &= 14.74 \cdot 10^4 \text{ Н/мм}^2, \\ c_{12} &= 16.36 \cdot 10^4 \text{ Н/мм}^2, \\ c_{13} &= 11.09 \cdot 10^4 \text{ Н/мм}^2, \\ c_{14} &= 2.35 \cdot 10^4 \text{ Н/мм}^2, \end{aligned} \quad (6.7a)$$

а коэффициент температурного расширения брался равным

$$\alpha = 10^{-5} \text{ К}^{-1}. \quad (6.7b)$$

Замечание. Следует отметить, что приведенные выше значения коэффициентов жесткости и температурного расширения соответствуют кристаллу корунда при температуре 25°С. За неимением более точных данных, пришлось использовать именно эти величины.

В процессе решения серии задач термоупругости для лент сапфира с разными ориентациями кристаллографических осей выяснилось, что при одном и том же распределении температуры величина компонент тензора термоупругих напряжений слабо зависит от ориентации ленты (см. работу [98], а также Приложение D). Напомним, что это не противоречит утверждению об ответственности термоупругих напряжений за

возникновение блоков в БО-лентах, поскольку данные расчеты проводились без учета пластичности материала. А во всех лентах, кроме БО, работает базисная система легкого скольжения с низким уровнем критических напряжений. В этой системе скольжения легко возникают пластические деформации сдвига, значительно снижающие общий уровень напряжений.

Поскольку значения компонент тензора термоупругих напряжений слабо зависят от ориентации ленты, то для относительного сопоставления вариантов экранировки далее в качестве критерия «качества» используется нормальная составляющая σ_{xx} тензора напряжений. Именно эта компонента имеет наибольшие значения в самой горячей области вблизи фронта кристаллизации, где порог пластической деформации оказывается наименьшим и наиболее вероятно образование дефектов.

6.2. Результаты расчета для базисноограниченных лент шириной 30 мм

Расчеты были выполнены для трех тепловых зон, представленных на рис. 6.7. Первые две зоны соответствуют реальным тепловым зонам, которые уже упоминались выше (см. рис. 6.1), а конфигурация третьей зоны была предложена по результатам моделирования теплообмена в первых двух зонах. Длина лент во всех случаях была равна 90 мм, что соответствует ситуации, когда верхний конец ленты выходит из горячей области тепловой зоны (области тепловых экранов) и распределение температуры вблизи фронта кристаллизации перестает зависеть от длины ленты. Необходимо отметить, что реальные системы экранировок несколько отличаются от модельных, поскольку на практике неудобно использовать полукруглые экраны и вместо них применялись стандартные прямоугольные. Тем не менее, едва ли этот факт имеет существенное значение. Как показано ниже, полученные численные результаты находятся в хорошем соответствии с экспериментальными данными.

Результаты расчетов термоупругих напряжений показаны на рис. 6.8 и 6.9. Видно, что для экранировки I компонента σ_{xx} тензора напряжений достигает в центре фронта значения -40 МПа, затем меняет знак на противоположный и на расстоянии 7 мм от фронта достигает 18 МПа. В результате, касательные напряжения в призматической системе скольжения существенно превосходят критические значения, что должно приводить к образованию дислокаций и формированию блочной структуры в ленте. Таким образом, проведенные расчеты подтвердили непригодность тепловой зоны с горизонтальными экранами для выращивания безблочных базисно ограниченных лент.

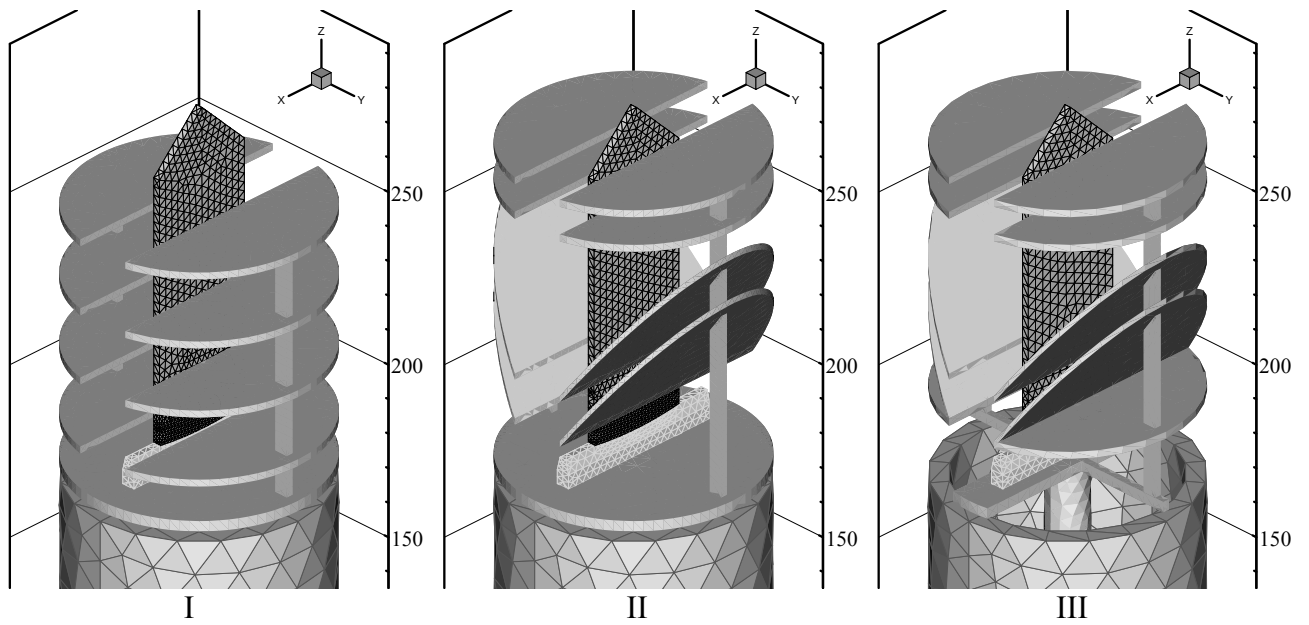


Рис. 6.7. Ленты шириной 30 мм. Расчетные экранировки

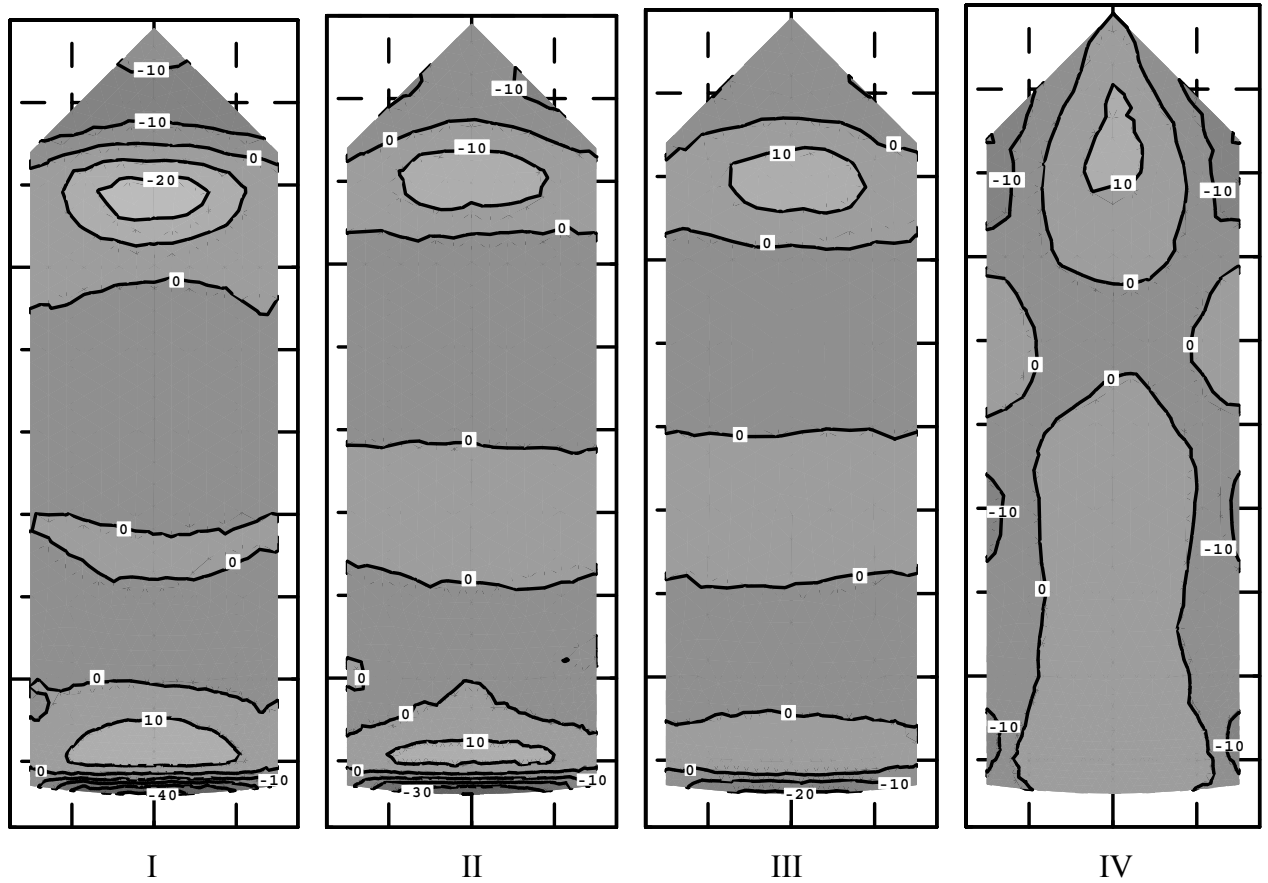


Рис. 6.8. Распределение термоупругих напряжений в ленте. I, II, III – XX компонента тензора напряжений для экранировки I, II и III, соответственно. IV – ZZ компонента для экранировки II

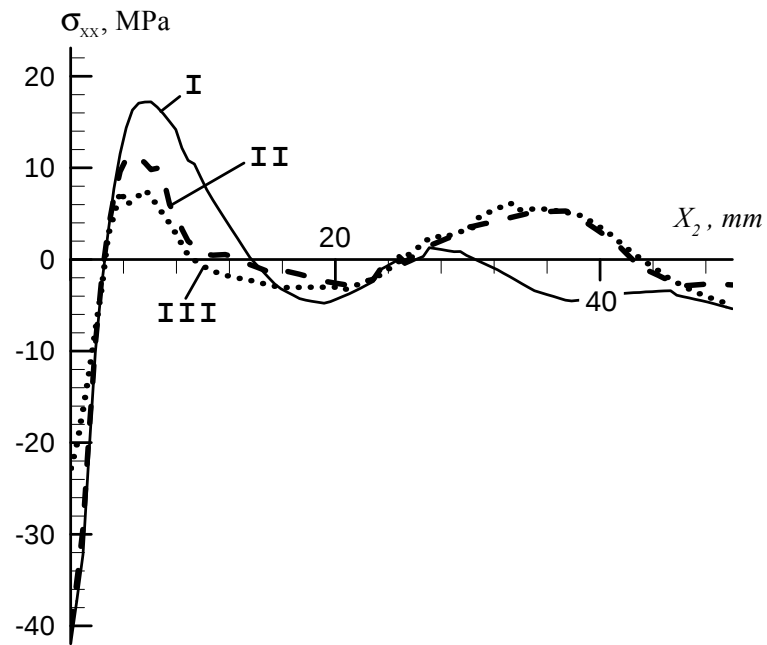


Рис. 6.9. Распределение XX компоненты расчетных термоупругих напряжений вдоль оси выращивания ленты для трех примененных экранировок. X_2 – расстояние от нижнего края ленты

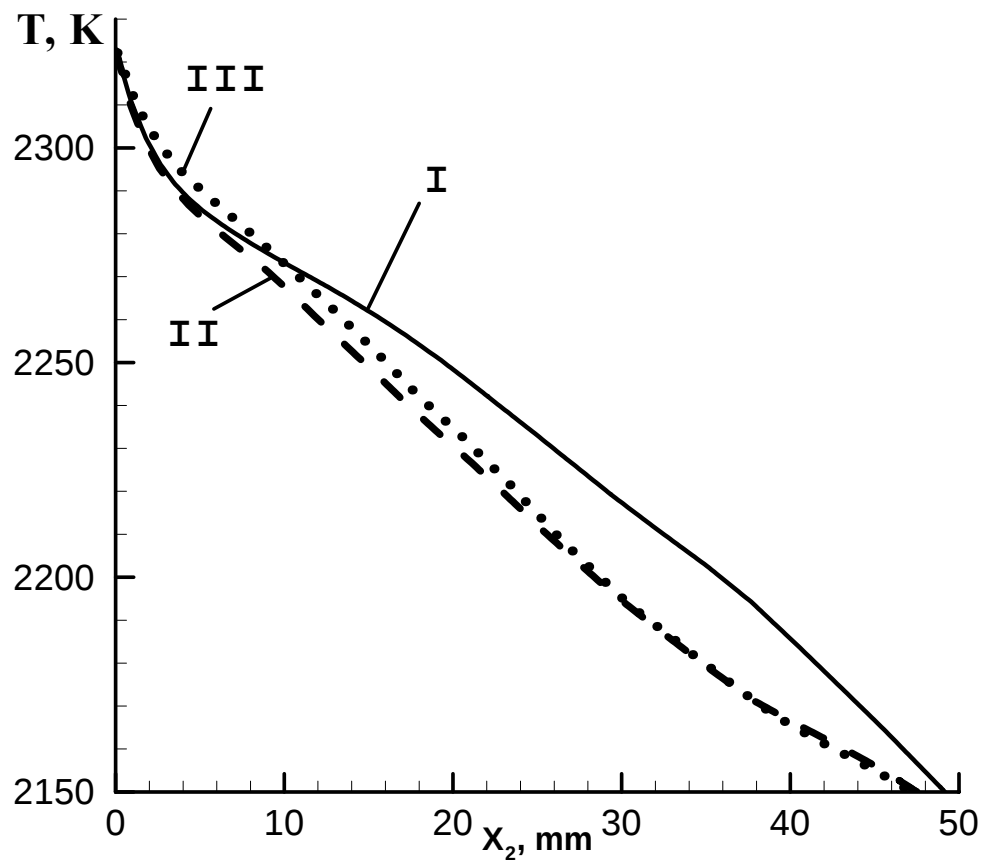


Рис. 6.10. Распределение температуры вдоль оси выращивания ленты для трех примененных экранировок. X_2 – расстояние от нижнего края ленты

Причина появления столь высоких напряжений в районе фронта кристаллизации хорошо известна – это сильная кривизна температурного поля кристалла в непосредственной близости от фронта.

Чтобы уменьшить эту кривизну, тепловая зона в ростовой установке была изменена путем перехода от горизонтальных экранов к наклонным (рис. 6.1б и вариант II на рис. 6.7). Как уже отмечалось выше, предполагалось, что это усилит приток теплового излучения от нагревателя к области кристалла вблизи межфазной границы и кривизна температурного поля у фронта снизится. Результаты расчетов для варианта II (рис. 6.8 и 6.9) показали, что в новой экранировке напряжение σ_{xx} действительно существенно снижается, но не у фронта, как предполагали, а начиная с расстояния 4-5 мм от него. Оказалось, что наклонные экраны не уменьшили кривизну температурного поля около фронта, а защитили среднюю часть ленты от горячего нагревателя (рис. 6.10), что привело к более быстрому охлаждению ленты по ее длине, которое, в свою очередь, вызвало понижение кривизны температурного поля в средней части ленты и общее заметное снижение термических напряжений до уровня, когда блоки перестают образовываться.

По результатам моделирования было предложено использовать для подогрева прифронтной области ленты (а, следовательно, и для снижения там кривизны температурного поля) излучение, идущее не от нагревателя, а от расплава. С этой целью был убран массивный диск, закрывавший тигель с расплавом, и введен дополнительный горизонтальный экран чуть выше верхней кромки формообразователя (рис. 6.7, экранировка III). В результате, удалось получить относительно линейное температурное поле в диапазоне от температуры плавления до $\sim 1500^\circ\text{C}$ при значительном увеличении среднего градиента температуры (рис. 6.10) и более чем вдвое снизить уровень термических напряжений (рис. 6.8-6.9).

6.2.1. Экспериментальная проверка

По результатам численного моделирования было проведено выращивание БО-лент сапфира сечением 30 x 1.5 мм и длиной до 250 мм в новой (третьей по счету) тепловой зоне (рис. 6.11), модифицированной в соответствие с экранировкой III на рис. 6.7. Выращенные таким путем ленты оказались безблочными и высокого качества. Чтобы провести количественное сравнение качества лент, выращенных в различных тепловых зонах, были измерены поля остаточных напряжений в лентах поляризационно-оптическим методом [102], который позволяет оценить величины максимальных скалывающих

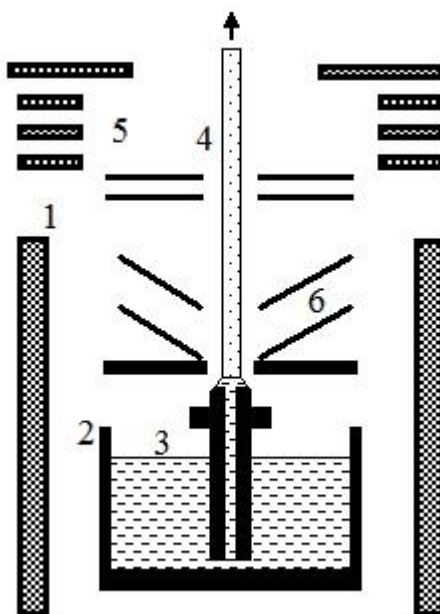


Рис. 6.11. Схема модифицированной тепловой зоны для выращивания БО-ленты, шириной 30 мм, у которой горизонтальные экраны перенесены в верхнюю часть тепловой зоны. Обозначения те же, что и на рис. 6.1.

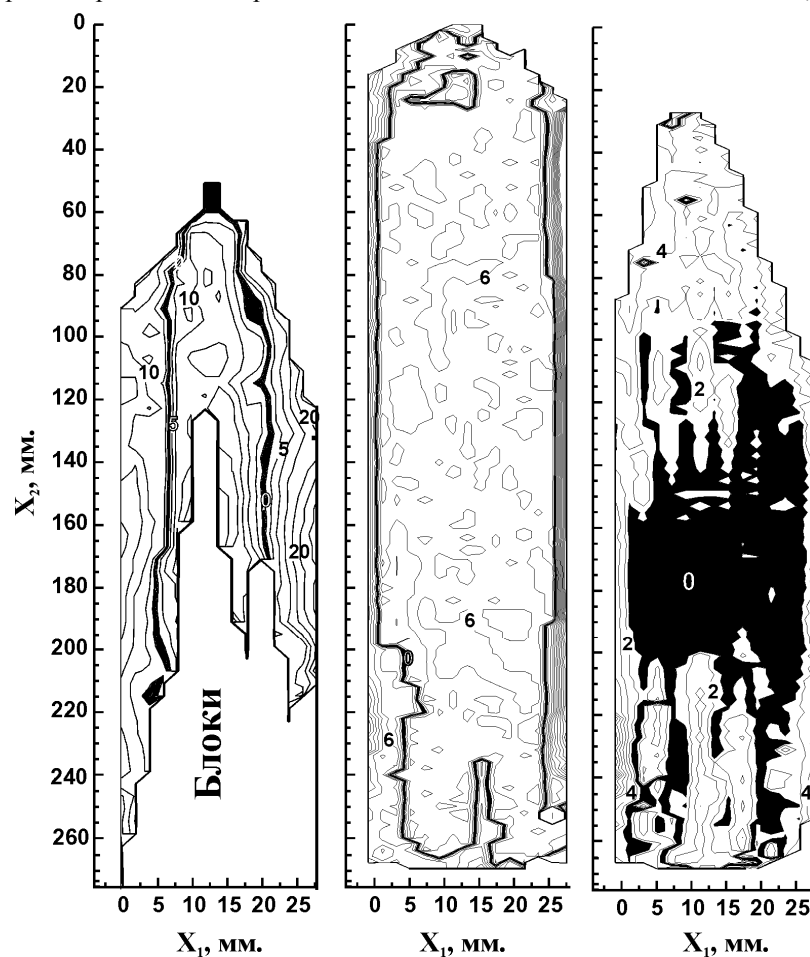


Рис. 6.12. Эпюры остаточных напряжений в лентах, выращенных в тепловых зонах, соответствующих рис. 6.1a (слева), рис. 6.1б (в центре) и рис. 6.12 (справа). Цифрами обозначены значения разности главных напряжений в МПа. Шаг изолиний составляет 5 МПа (слева) и 2 МПа (в центре и справа).

напряжений (то есть разности квазиглавных напряжений) в теле кристалла. Необходимо отметить, что указанные измерения можно провести только в базисноограниченных лентах,

поскольку их поверхность является зеркально гладкой. В лентах других ориентаций поверхность ленты оказывается шероховатой и измерить остаточные напряжения в таких лентах оказывается невозможным. Эпюры разности главных напряжений в БО-лентах, выращенных в трех различных тепловых зонах, представлены на рис. 6.12. Результаты измерений позволяют сделать следующие выводы:

- 1) в зоне с плоскими горизонтальными экранами БО-ленты всегда растут блочными, а уровень остаточных напряжений достигает 25 МПа в середине ленты. В этом месте всегда начинает развиваться блочная структура [98]. Причина – высокий уровень термоупругих напряжений, связанный с большой кривизной температурного поля у фронта кристаллизации. Возможно так же, что перестройке дислокационной структуры с образованием границ блоков способствует медленное снижение температуры в горячей зоне;
- 2) применение наклонных экранов приводит к существенному перераспределению остаточных напряжений в выращиваемых лентах: в середине ленты напряжения не превышают 3–7 МПа, но на краях, по-прежнему, могут достигать больших значений до 30 МПа. В этой тепловой зоне были получены первые БО-ленты без блоков. График распределения температуры в этом случае (рис. 6.10) стал ближе к линейному и на первых 50 мм от фронта кристаллизации проходит ниже предыдущего случая. Однако высокий уровень остаточных напряжений говорит о том, что в лентах, выращенных при этой экранировке, все же имела место интенсивная пластическая деформация. Она могла происходить у самого фронта, где осталась область со значительной кривизной температурного поля и высоким уровнем термических напряжений. Возможно, что получение безблочных лент в этом случае связано с уменьшением времени пребывания кристалла в горячей зоне, что затруднило перестройку дислокационной структуры и формирование границ с большой разориентацией. С другой стороны, можно также предположить, что высокие остаточные напряжения на краях ленты связаны с дислокациями, возникшими под действием осевой компоненты тензора напряжений σ_{zz} . Эта компонента у фронта кристаллизации равна нулю вследствие граничных условий, но, начиная с расстояния, примерно равного ширине ленты, она становится наибольшей в тензоре напряжений (см. рис. 6.8, IV). При этом ее максимальные значения имеют место именно на краях ленты. Температура в этой области ниже и, возможно, подвижность дислокаций недостаточна для формирования границ блоков;

- 3) третий вариант экранировки позволил наиболее сильно снизить уровень термоупругих напряжений, что привело к уменьшению интенсивности генерации новых дислокаций, а уменьшение времени пребывания кристалла в горячей зоне затруднило их перестройку в границы блоков. В результате данная тепловая зона позволяет устойчиво выращивать безблочные БО-ленты с очень низким уровнем остаточных напряжений (не более 3 МПа по всей ленте).

6.3. Результаты расчета для базисно ограниченных лент шириной 50 мм

Базисно ограниченные ленты сапфира шириной 30 мм являются модельным материалом. С практической точки зрения нужны ленты шириной не менее 50 мм. Как уже указывалось выше, все попытки вырастить 50 мм безблочные БО ленты в зоне, аналогичной зоне с наклонными экранами для 30 мм лент на рис. 6.1б, оказались неудачными. Основные закономерности образования дефектной структуры в 50 мм лентах оказались теми же. Однако более широкие ленты гораздо чувствительнее к тепловым условиям выращивания, поскольку в одинаковых условиях выращивания в таких лентах всегда выше плотность дефектов, так как термоупругие напряжения возрастают пропорционально квадрату ширины ленты. Поэтому добиться существенного снижения термических напряжений в этом случае гораздо сложнее, чем для 30 мм лент.

Было рассмотрено порядка десяти вариантов внутренней экранировки, шесть из которых представлены на рис. 6.13. Так же, как и в случае 30 мм лент, размеры нагревателя и формообразователя оставались неизменными, а варьировались только форма и расположение тепловых экранов, регулирующих отвод тепла от расплава и теплообмен ленты с окружающей средой. Варианты сравнивали между собой по осевому распределению температуры в ленте и по распределению σ_{xx} составляющей тензора термоупругих напряжений (рис. 6.14). Оценка допустимого уровня напряжений, при котором, по-видимому, еще можно избежать появления блоков, была получена следующим образом. При проведении аналогичных расчетов для лент шириной 30 мм оказалось, что для тепловой зоны, в которой стабильно выращивают безблочные ленты, расчетное максимальное значение напряжения не превосходило 20 МПа непосредственно у фронта кристаллизации, поэтому это значение и было взято в качестве ориентира для оценки качества экранирования.

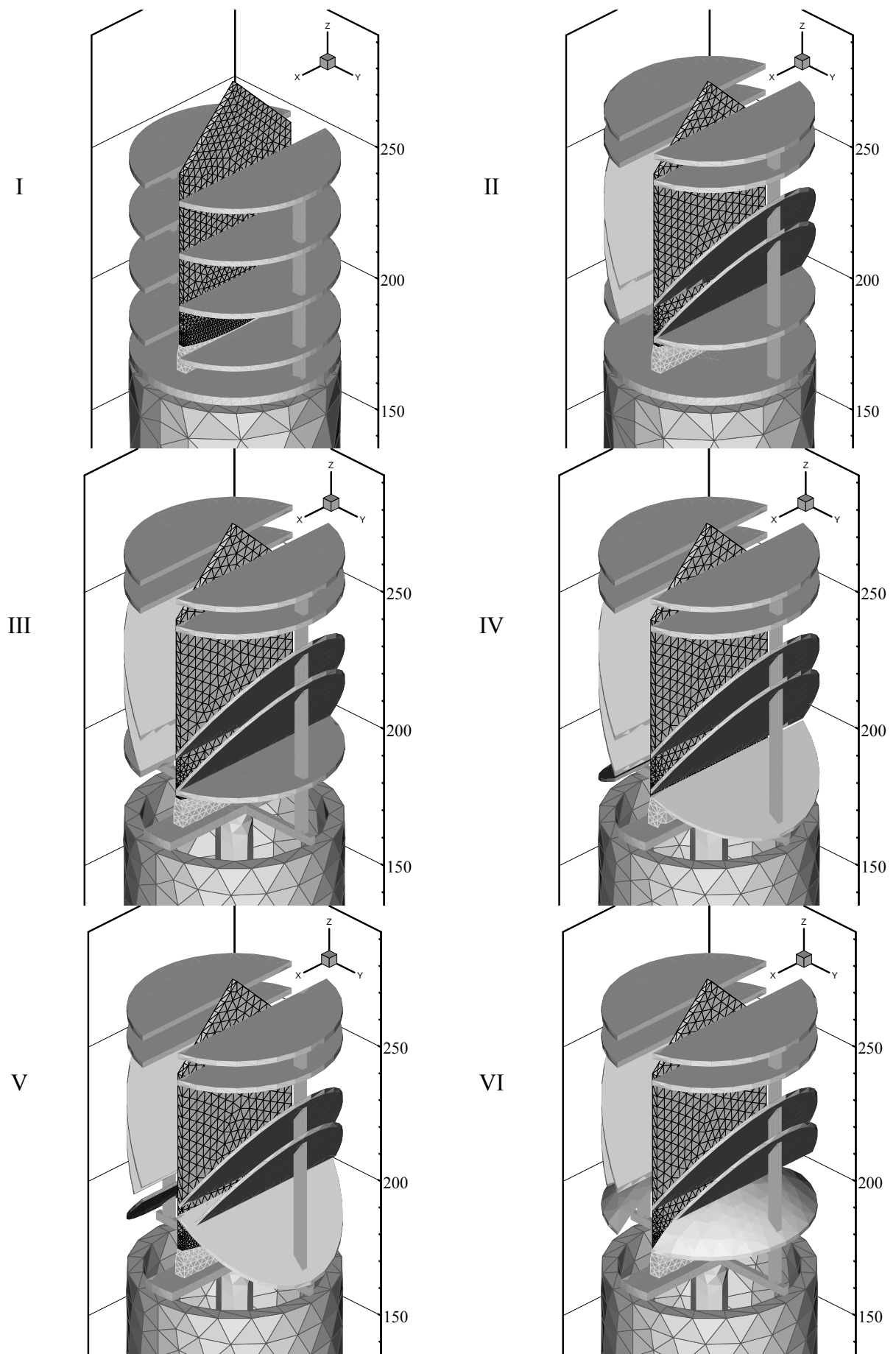
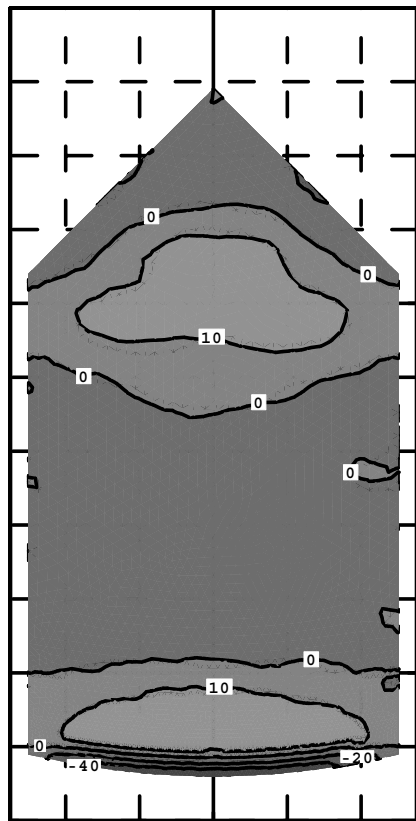
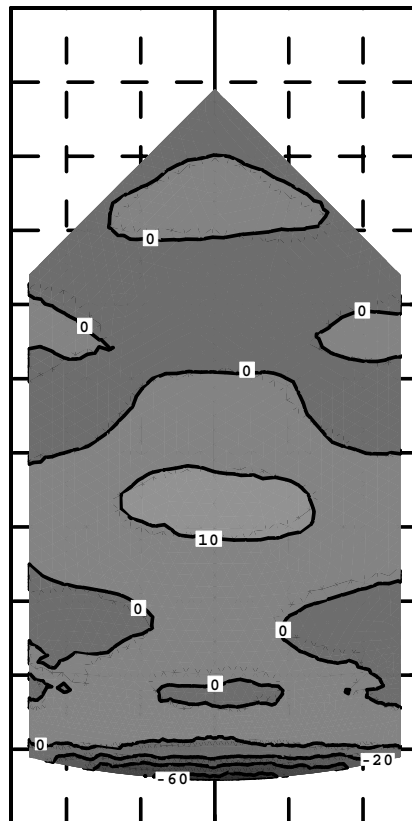


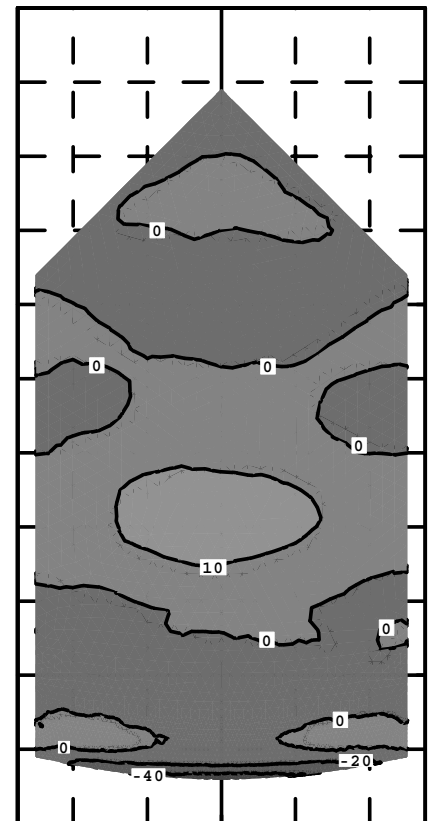
Рис. 6.13. Варианты взаимного расположения ленты сапфира, формообразователя и экранирующей системы



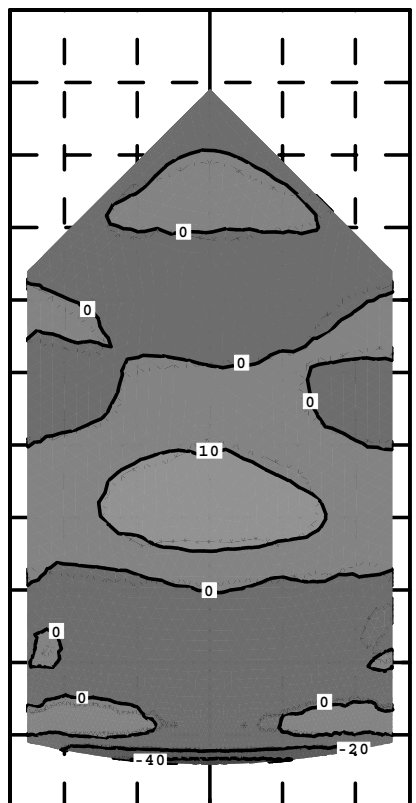
I



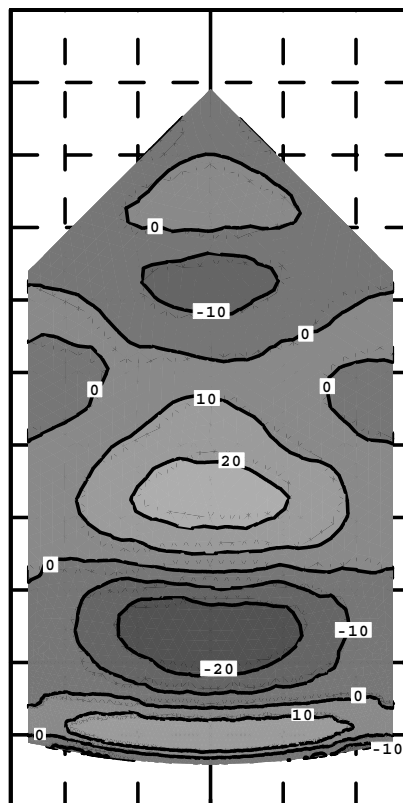
II



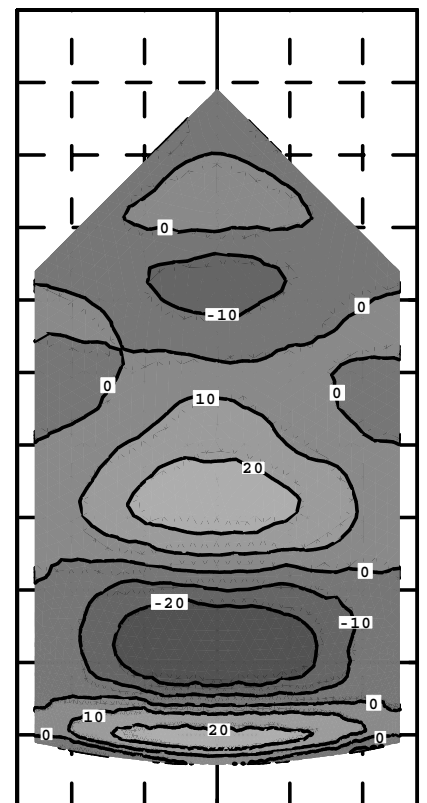
III



IV



V



VI

Рис. 6.14. Распределение XX компоненты тензора напряжений в ленте сапфира шириной 50 мм при различных вариантах экранировки (в МПа)

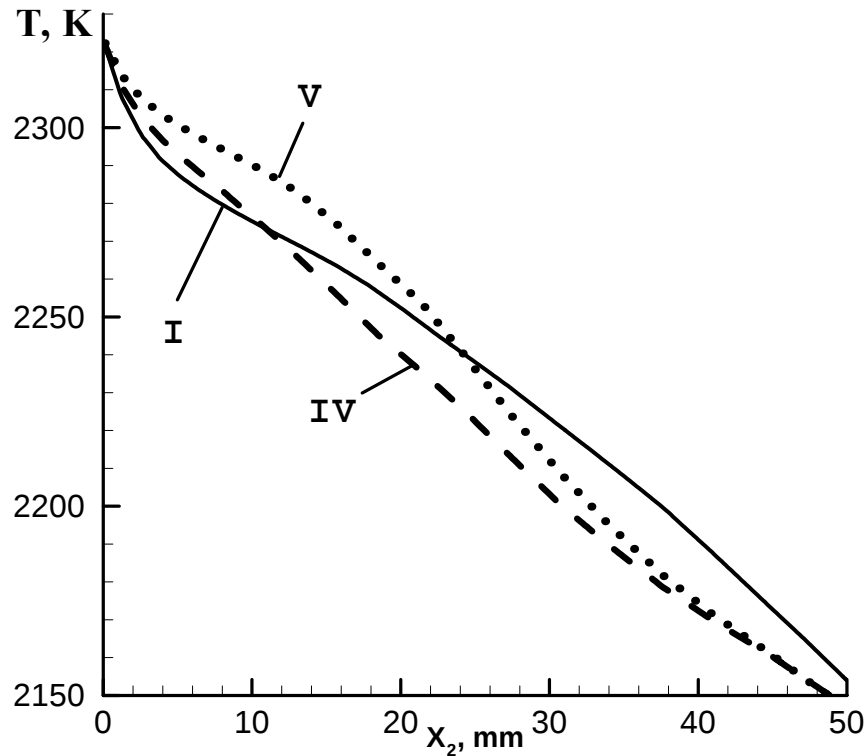


Рис. 6.15. Распределение температуры вдоль оси выращивания ленты для трех примененных экранировок

Расчеты показали, что при всех видах экранировки в ленте вблизи фронта кристаллизации наблюдается весьма сильный изгиб температурного поля, связанный со значительным отводом тепла посредством излучения (рис. 6.15). Сильная кривизна температурного поля приводит к тому, что в базовом варианте I с горизонтальными экранами термоупругие напряжения вблизи фронта кристаллизации оказываются весьма большими и достигают величин порядка 50–60 МПа. Замена части горизонтальных экранов на наклонные (вариант II) приводит к некоторому перераспределению напряжений в ленте, но в нижней ее части уровень термоупругих напряжений остается столь же высоким (рис. 6.14).

Следуя той же логике, что и в случае лент шириной 30 мм, первым делом было решено избавиться от массивного диска, на котором крепился формообразователь. Этот диск полностью закрывал тигель с расплавом и тем самым закрывал как ленту, так и экраны от горячего излучения со свободной поверхности расплава. Применение экранирующей системы III, которая позволила в случае 30 миллиметровых лент вдвое понизить уровень максимальных напряжений, привело к снижению термических напряжений и для 50 миллиметровых лент. Однако это снижение уровня напряжений оказалось недостаточным - всего лишь до 40-50 МПа. По всей видимости, горизонтальный нижний экран не обеспечивал требуемого подвода тепла к области кристалла около

фронта. Поэтому дальнейшая модификация теплового узла состояла в замене горизонтального нижнего экрана наклонным. Угол наклона и высота расположения этого экрана предполагались такими, чтобы отражать излучение, идущее от расплава на нижнюю часть ленты и тем самым препятствовать ее охлаждению.

В первоначальном варианте IV добиться существенного снижения уровня напряжений по сравнению с предыдущими конфигурациями снова не удалось. По-видимому, угол наклона экрана был еще недостаточен для того, чтобы отразить на нижнюю часть кристалла достаточную долю горячего излучения от расплава. Кроме того, возможно, что увеличение подогрева ленты со стороны нижнего дополнительного экрана компенсировалось отводом тепла через зазор между верхней парой наклонных экранов.

Когда был выбран вариант экранировки V с достаточно крутым нижним наклонным экраном, который перекрывал зазор между верхними экранами, кривизна температурного фронта в окрестности фронта кристаллизации существенно уменьшилась (рис. 6.14), и напряжения вблизи фронта снизились до уровня 10–20 МПа. Однако за это пришлось заплатить появлением заметной кривизны температурного поля на расстоянии 25–30 мм от фронта кристаллизации, что привело к возникновению в этом месте напряжения более 20 МПа (рис. 6.14). Уменьшить напряжения ниже 20 МПа в нижней части ленты путем дальнейшего изменения положения экранов не удалось.

Замечание. При численном исследовании были найдены конфигурации экранирующей системы, которые позволяли уменьшить напряжения около фронта почти до нуля. В частности, примером такого варианта экранировки является вариант VI, в котором вместо наклонного нижнего экрана используется полусферический. Однако подобный вариант имеет скорее иллюстративное, чем практическое значение, поскольку изготовление криволинейных экранов в лабораторных условиях представляется неоправданно трудоемким.

Проведенный анализ показывает, что при выращивании лент шириной 50 мм в круговой тепловой зоне можно путем подбора тепловых экранов и перераспределения радиационных потоков тепла внутри зоны существенно снизить кривизну температурного поля в ленте вблизи фронта кристаллизации и за счет этого в 2–3 раза уменьшить термоупругие напряжения до уровня 20 МПа. Исходя из опыта выращивания лент шириной 30 мм, можно предполагать, что этого уже будет достаточно для предотвращения образования блоков. С другой стороны, необходимо отметить, что ни в одном из вариантов конструкции тепловых экранов не удалось получить распределение

температуры в ленте близкое к линейному в пределах всей горячей части зоны и понизить уровень напряжений ниже 20 МПа, поэтому имеются определенные сомнения, что предлагаемые меры могут оказаться достаточными для создания устойчивого воспроизводимого процесса получения безблочных лент. По-видимому, надежное решение этой проблемы требует более существенных изменений конструкции, а наиболее перспективен переход к тепловой зоне с плоской геометрией.

Основные результаты, представленные в данном разделе диссертации, опубликованы в работах [70-74].

Заключение

Подводя итоги, перечислим главные новые результаты, которые были достигнуты в процессе работы над данной диссертацией.

1. Впервые при моделировании радиационного теплообмена в процессах выращивания оксидных кристаллов был применен метод дискретного переноса. Показано, что этот метод позволяет эффективно учитывать специфику тепловых процессов характерных для роста оксидов (в частности, сложный характер поведения излучения на границах различных сред). Кроме того, данная численная схема не предъявляет чрезмерных требований к вычислительным ресурсам, что чрезвычайно важно для практического использования. Метод реализован в двух вариантах – в самом общем трехмерном, и в осесимметричном, наиболее значимом с практической точки зрения.

2. Впервые для оксидных кристаллов была разработана полностью нестационарная динамическая модель процесса Чохральского. Модель позволяет отслеживать не только изменение формы кристалла, уровня расплава, формы фронта кристаллизации в процессе роста кристалла, но и работу автоматической системы управления по весовому датчику. Таким образом, впервые для оксидов создан виртуальный процесс Чохральского, который дает возможность смоделировать на компьютере весь процесс роста кристалла от момента затравления до окончания процесса вытягивания.

3. С помощью разработанной динамической модели процесса Чохральского впервые проведено исследование явления инверсии фронта кристаллизации на стадии разрачивания гадолиний-галлиевого граната. Показано, что имеется хорошее соответствие между рассчитанными и наблюдаемыми полосами роста в выращенном кристалле. Установлено, что радиационные свойства свободной поверхности полупрозрачного кристалла и конвекция Марангони существенно влияют на форму межфазной границы и ее вариации в процессе роста. Выдвинуто предположение, что увеличение высоты мениска расплава приводит к усилению инерционных свойств ростового процесса.

4. Впервые предложен научно обоснованный подход к выработке алгоритма управления многосекционным нагревателем. Подход основан на процедуре оптимизации тепловых условий в районе фронта кристаллизации, с тем, чтобы минимизировать отклонения фронта от заданной формы в течение всего процесса выращивания. При этом для проверки и обкатки предлагаемых алгоритмов управления многосекционным нагревателем, используется динамическая модель процесса Чохральского. Таким образом, реальному эксперименту предшествует стадия эксперимента виртуального.

5. С помощью описанного подхода разработан алгоритм управления секциями нагревателя в процессе выращивания кристалла германосилленита низкоградиентным методом Чохральского. Данный алгоритм обеспечил сохранение требуемой формы фронта кристаллизации на протяжении всего ростового процесса, что позволило устойчиво получать кристаллы, обладающие высоким качеством по всей своей длине. Следует подчеркнуть, что режим управления нагревателями, найденный с помощью предложенного подхода, оказался весьма нетривиальным и дойти до него без численного эксперимента представляется крайне сомнительным.

6. Разработана модель глобального радиационно-кондуктивного теплообмена в установке по выращиванию базисноограненных лент сапфира методом Степанова. Моделирование роста оксидных кристаллов в столь сложной трехмерной области, включающей в себя систему молибденовых экранов никогда раньше не производилось.

7. С помощью предложенной модели впервые проведено исследование влияния различных систем экранировок на распределение термоупругих напряжений в теле монокристаллической ленты шириной 30 и 50 мм.

8. Показано, что дефектная блочная структура лент, растущих в стандартной тепловой зоне, с горизонтальными экранами связана с высоким уровнем термических напряжений в нижней самой горячей части зоны.

9. Для лент шириной 30 мм по результатам численных экспериментов была предложена новая конфигурация тепловой зоны, обеспечивающая, как показал расчет, значительно более низкий уровень термических напряжений в горячей части ленты. Дальнейшая экспериментальная проверка показала, что в такой тепловой зоне стабильно растут безблочные ленты с очень низким уровнем остаточных напряжений (по сравнению с лентами, выращенными в других тепловых зонах).

10. Объяснено, почему в тепловой зоне, обеспечивающей стабильный рост лент сапфира шириной 30 мм, ленты шириной 50 мм растут блочными. Выяснено, что в такой зоне для более широких лент характерны существенно более высокие термоупругие напряжения. Тем не менее, проведенный анализ показал, что и при выращивании лент шириной 50 мм в круговой тепловой зоне можно путем подбора тепловых экранов и перераспределения радиационных потоков тепла существенно снизить кривизну температурного поля в ленте вблизи фронта кристаллизации и за счет этого в 2–3 раза уменьшить термоупругие напряжения.

Список цитированных источников

- [1] Оцисик М.Н. Сложный теплообмен. М.: Мир, 1976. 616с.
- [2] Q.Xiao, J.J. Derby. Three-dimensional melt flows in Czochralski oxide growth // J. Crystal Growth, 1995, Vol.152, P.169-181.
- [3] M. Kobayashi, T.Tsukada, M.Hozawa. Effect of internal radiative heat transfer on transition of flow modes in Cz oxide melt // J. Crystal Growth, 2000, Vol.208, P.459-465.
- [4] K. Takagi, T. Fukazava, M. Ishii. Inversion of the direction of the solid-liquid interface on the Czochralski growth of GGG crystals // J. Crystal Growth, 1976, Vol.32, P.89-94
- [5] Б.В. Милль, А.В. Буташин. Смена формы фронта кристаллизации при выращивании монокристаллов неодим-галлиевого граната методом Чохральского // Кристаллография, 1982, т. 27, С.574-577
- [6] M. Kobayashi, T. Hagino, T.Tsukada, M.Hozawa. Effect of internal radiative heat transfer on interface inversion in Czochralski crystal oxide growth // J. Crystal Growth, 2002, Vol.235, P.258-270.
- [7] Р.Зигель, Дж. Хауэлл, Теплообмен излучением: Пер. с англ. - М.:Мир, 1975, 934с.
- [8] F.Dupret, P.Nicodeme, Y. Ryckmans. Numerical method for reducing stress level in GaAs crystals // J. Crystal Growth, Vol.97, Iss.1, 1 Sept. 1989, P.162-172.
- [9] P.D.Thomas, J.J.Derby, L.J.Atherton, R.A.Brown. Dynamics of Liquid-Encapsulated Czochralski Growth of Gallium Arsenide: Comparing Model with Experiment // J. Crystal Growth, 1989, Vol.96, P.135-152.
- [10] Васильев М.Г., Юфеев В.С. Решение задачи Стефана при наличии радиационного охлаждения фронта кристаллизации в прозрачных кристаллах, вытягиваемых из расплава // Журн. техн. физики, 1982, т.52, в.2, С.204-208.
- [11] S.Brandon, J.J.Derby. Internal radiative transport in the vertical Bridgman growth of semitransparent crystals // J. Crystal Growth, 1991, Vol.110, P.481-500.
- [12] Q.Xiao, J.J. Derby. The role of internal radiation and melt convection in Czochralski oxide growth: deep interfaces, interface inversion, and spiraling // J. Crystal Growth, 1993, Vol.128, P.188-194.
- [13] Q.Xiao, J.J. Derby. Heat transfer and interface inversion during the Czochralski growth of yttrium aluminum garnet and gadolinium gallium garnet // J. Crystal Growth, 1994, Vol.139, P.147-157.
- [14] Nunes E.M., Naraghi M.H.N., Zhang H., Prasad V. A volume radiation heat transfer model for Czochralski crystal growth processes // J. Crystal Growth. - 2002. - Vol.236. - P.596-608.
- [15] A.Hayashi, M.Kobayashi, C.Jing, T.Tsukada, M.Hozawa, Numerical simulation of the Czochralski growth process of oxide crystals with a relatively thin optical thickness // International J. Heat and Mass Transfer, 47 (2004) 5501-5509.
- [16] T. Tsukada, K. Kakinoki, M. Hozava, N. Imaishi, Effect of internal radiation within crystal and melt on Czochralski crystal growth of oxide // Int. J. Heat Mass transfer, 1995, Vol.38, P.2707-2714.
- [17] T.Tsukada, M.Kobayashi, C.Jing, A global analysis of heat transfer in the Cz crystal growth of oxide: Recent developments in the model // Int. J. Heat and Mass Transfer, 2007, Vol.303, P.150-155.
- [18] С.Ф.Бурачас, Б.Л.Тиман, В.Г.Бондарь, Ю.В.Горишний, В.И.Кривошеин, Влияние характера теплоотвода от кристалла на форму его боковой поверхности при выращивании кристаллов германата висмута методом Чохральского // Кристаллография, 1990, т.35, №1, С.181-184
- [19] O. Budenkova, M.Vasiliev, V. Mamedov, V. Yuferev, V. Kalaev. Effect of internal radiation on the solid-liquid interface shape in low and high thermal gradient Czochralski oxide growth. // J. Crystal Growth, 2007, Vol.303, P.156-160.

- [20] S.A.Rukolaine, M.G.Vasilyev, V.S.Yuferev, A.O.Galyukov. Numerical solution of axisymmetric radiative transfer problems in arbitrary domains using the characteristic method // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 2002, Vol.73, P.205-217.
- [21] С.А. Руколайне, М.Г. Васильев, В.С. Юферев, В.М. Мамедов. Численный метод решения осесимметричных задач радиационного теплопереноса в произвольных осесимметричных областях, заполненных поглощающей, излучающей и рассеивающей средой с переменными оптическими свойствами // *Труды Третьей Российской Национальной Конференции по Теплообмену*, 21-25 октября 2002 года, Москва, том 6 (Интенсификация теплообмена. Радиационный и сложный теплообмен), С.316-319.
- [22] H.Kopetsch. Numerical simulation of the interface inversion in Czochralski growth of oxide crystals // *J. Crystal Growth*, 1990, Vol.102, P.505-528
- [23] R.Viskanta, M.P.Menguc. Radiative heat transfer in combustion systems // *Progr. Energy Combust. Sci.*, 1987, Vol.13, P.97.
- [24] V.S. Yuferev, O.N. Budenkova, M.G. Vasiliev, S.A. Rukolaine, V.N. Shlegel, Ya.V. Vasiliev, A.I. Zhmakin, Variations of solid-liquid interface in the BGO low thermal gradients Cz growth for diffuse and specular crystal side surface // *J. Crystal Growth*, 2003, Vol.253, P.383-397.
- [25] C.W. Lan. Three-dimensional simulation of floating- zone growth of oxide crystals. *J. Crystal Growth*, 2003, vol.247, P.597-612.
- [26] B.J. van der Linden. Radiative heat transfer in glass: the Algebraic Ray Trace method. Thesis, Techn. Univ. Eindhoven, 2002, 157 pp.
- [27] S.A. Rukolaine, M.G. Vasilyev, V.S. Yuferev, V.M. Mamedov. A numerical scheme for the solution of axisymmetric radiative transfer problems in irregular domains filled by media with opaque and transparent diffuse and specular boundaries // *J. Quantitive Spectroscopy & Radiative Transfer*, 2004, Vol.84, P.371-382.
- [28] В.М. Мамедов, С.А. Руколайне. Численное решение задач радиационного теплопереноса в областях нерегулярной формы с зеркальными (френелевскими) границами. Осесимметричный случай // *Математическое моделирование*, т.16, №10, 2004, С.15-28.
- [29] Л.П.Басс, А.М.Волощенко, Т.А.Гермогенова. Методы дискретных ординат в задачах о переносе излучения. М., ИПМ им. М.В. Келдыша, 1986.
- [30] W.A.Fiveland, J.P. Jessee. Comparison of discrete ordinates formulations for radiative heat transfer in multidimensional geometries // *J. Thermophysics and Heat Transfer*, 1995, Vol.9, P.47
- [31] M.Sakami et al. Radiative heat transfer in three-dimensional enclosures of complex geometry by using the discrete ordinates method // *J.Quant.Spectrosc.Radiat.Transfer*, 1998, Vol.59, P.117
- [32] M.A.Ramankutty, A.L.Crosbie. Modified discrete ordinates solution of radiative transfer in three-dimensional rectangular enclosures // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 1998, Vol.60, P.103-134.
- [33] D. Balsara. Fast and accurate discrete ordinate methods for multidimensional radiative transfer. Part I, basic methods // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 2001, Vol.69, P.671-707.
- [34] W. Fiveland. A finite element method of the discrete ordinate method for multidimensional geometries // *ASME paper HTD*, 1993, Vol.244, P.41-48.
- [35] J.R.Mahan. Radiation Heat Transfer: A Statistical Approach. Wiley, 2002, 504 pp.
- [36] M.C. Sanchez. Uncertainty and confidence intervals of the Monte-Carlo Ray Trace method in radiation heat transfer. PhD Thesis, Virginia Polytechn. Institute and State Univ., 2002, 109 pp.
- [37] S.Maruyama, T. Aihira. Radiation heat transfer of arbitrary three-dimensional absorbing, emitting and scattering media and specular and diffuse surfaces // *J. Heat Transfer*, 1997, Vol.119, P.129-136.

- [38] S.Kochuguev, D.Ofengeim, A.Zhmakin. Axisymmetric radiative heat transfer simulation by Ray Tracing Method // Proc. 3rd European Conf. on Numerical Mathematics and Advanced Applications, World Scientific, Singapore, 2000, P.579-586.
- [39] S. Kochuguev, D. Ofengeim, A. Zhmakin, A. Galyukov. Ray tracing method for axisymmetric global heat transfer simulation // CFD Journal, 2001, Vol.II-33, P.440-448.
- [40] S.W. Baek, D.Y. Byun, S.J. Kang. The combined Monte-Carlo and finite-volume method for radiation in a two-dimensional irregular geometry // Int. J. Heat Mass Transfer, 2000, Vol.43, P.2337-2344.
- [41] J.J.Derby, R.A.Brown. On the Dynamics of Czochralski Crystal Growth// J. Crystal Growth, 1987, Vol.83, P.137-151.
- [42] J.J. Derby, L.J. Atherton, P.D. Thomas, R.A. Brown. Finite-Element Methods for Analysis of the Dynamics and Control of Czochralski Crystal Growth // J. Scientific Computing, 1987, Vol.2, No. 4, P.297-343.
- [43] N. Van den Bogaert, F. Dupret. Dynamic Global Simulation of the Czochralski process. I. Principles of the method // J. Crystal Growth, 1997, Vol.171, P.65-76.
- [44] N. Van den Bogaert, F. Dupret. Dynamic Global Simulation of the Czochralski process. II. Analysis of the growth of a germanium crystal // J. Crystal Growth, 1997, Vol.171, P.77- 93.
- [45] A.Raufeisen, M.Breuer, T.Botsch, A.Delgado. Transient 3D simulation of Czochralski crystal growth considering diameter variations // J. Crystal Growth, 2009, Vol.311, P.695-697.
- [46] S.Rukolaine, M.G. Vasiliev, V.S. Yuferev, O.N. Budenkova, A.B. Fogelson, V.M. Mamedov, I.Yu. Evstratov, A.I. Zhmakin, V.N. Shlegel, Ya.V. Vasiliev. Numerical study of heat transfer in growing oxide crystal by Czochralski method // Proceedings of Fourth International Conference "Single Crystal Growth and Heat & Mass Transfer", 24-28 september 2001, Obninsk, Vol.3, P.669-679.
- [47] I.Yu. Evstratov, S. Rukolaine, V.S. Yuferev, M.G. Vasiliev, A.B. Fogelson, V.M. Mamedov, V.N. Shlegel, Ya.V. Vasiliev, Yu.N. Makarov, Global analysis of heat transfer in growing BGO crystals ($\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$) by low-gradient Czochralski method // J. Crystal Growth, 2002, Vol.235, P.371-376
- [48] Budenkova O.N., Vasilyev M.G., Rukolaine S.A., Yuferev V.S.. Radiative heat transfer in axisymmetric domains of complex shape with Fresnel boundaries //J. Quant. Spectroscopy and Rad. Transfer, 2004, Vol.84, P.451-463
- [49] O.N. Budenkova, V.M. Mamedov, M.G. Vasiliev, V.S. Yuferev, Yu.N. Makarov. Effect of internal radiation on the crystal-melt interface shape in Czochralski oxide growth // J. Crystal Growth, 2004, Vol.266, P.96-102.
- [50] Г.И.Марчук, В.И.Лебедев. Численные методы в теории переноса нейтронов. - М.: Атомиздат, 1981, 456 с.
- [51] S.L. Chang, K.T. Rhee, Blackbody radiation functions. // Int.Comm.Heat and Mass Trans., 1984, Vol.11, №5, P.451-455.
- [52] Chui E.H., Raithby G.D., Hughes P.M.J., Prediction of Radiative Transfer in Cylindrical Enclosures with the Finite Volume Method. // J. Thermophysics Heat Transfer, 1992, Vol.6, P.605-611.
- [53] Л.П.Басс, О.В.Николаева. Улучшенная схема расчета переноса излучения в сильно гетерогенных средах и пустотах. // Матем. моделирование, 1997, т.9, с.63-72.
- [54] Rukolaine S.A., Yuferev V.S. Discrete ordinates quadrature schemes based on the angular interpolation of radiation intensity // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 2001, Vol.69, P.257-275.
- [55] Васильев М.Г., Юферев В.С. Влияние радиационного переноса тепла на форму фронта кристаллизации на стадии разрастания базисно-ограниченных лент сапфира // Изв. РАН. Серия физическая, 2004, Т. 68, № 6, С. 814.
- [56] В.М. Мамедов, В.С.Юферев. Численное решение задач радиационного теплопереноса в трехмерных областях нерегулярной формы с зеркальными (френелевскими) границами // Теплофизика высоких температур, 2006г, т.44, №4, С.568-576.

- [57] S. Rukolaine, M. Vasilyev, V. Yuferev, V. Mamedov. A numerical scheme for the solution of axisymmetric radiative transfer problems in complex domains filled by participating media with opaque and transparent diffuse and specular boundaries // Proceedings of Eurotherm 73 on Computational Thermal Radiation in Participating Media, 15-17 April 2003, Mons, Belgium. Vol.2, P.1-10.
- [58] Mamedov V.M., Rukolaine S.A., Yuferev V.S. A numerical method for the solution of radiative heat transfer problems in irregular domains with Fresnel interfaces: axisymmetric problems // Proceedings of the Fourth International Symposium on Radiative Transfer, Istanbul, Turkey, June 20-25, 2004, P.69-78.
- [59] Mamedov V.M., Rukolaine S.A., Yuferev V.S. Numerical solution of radiative heat transfer problems in three-dimensional irregular domains with Fresnel interfaces // The Fourth International Symposium on Radiative Transfer, Istanbul, Turkey, June 20 – 25, 2004, Poster abstracts, P.32–34.
- [60] V.M. Mamedov, S.A. Rukolaine, V.S. Yuferev. A numerical method for the solution of radiative heat transfer problems in irregular domains // Тезисы Шестого Международного Конгресса по Математическому Моделированию, 20-26 сентября 2004 года, Нижний Новгород, С.206.
- [61] В.М. Мамедов. Численное решение задач переноса излучения в осесимметричных и трехмерных областях сложной формы гибридным методом дискретных ординат и трассировки лучей // Вопросы математической физики и прикладной математики. Материалы семинара 16 июня 2005 года, Санкт-Петербург, 2005, С.198-207.
- [62] M.G.Vasiliev, O.N.Budenkova, V.S.Yuferev, V.V.Kalaev, V.N.Shlegel, N.V.Ivannikova, Ya.V.Vasiliev and V.M.Mamedov. Effect of heat shield on the shape of the solid–liquid interface and temperature field in the BGO-eulithine LTG Cz growth // J. Crystal Growth, 2005, Vol.275, P.745-750.
- [63] S.E.Demina, E.N.Bystrova, M.A.Lukanina, V.V.Kalaev, V.M.Mamedov, V.S.Yuferev, E.V.Eskov, M.V.Nikolenko, V.S.Postolov. Numerical analysis of sapphire crystal growth by the Kyropoulos technique // J. Optical Materials, Vol.30, issue 1, September 2007, P.62-65.
- [64] В.М. Мамедов, В.С. Юфереv. Нестационарная модель процесса выращивания оксидных кристаллов из расплава методом Чохральского// Известия РАН. Серия физическая, 2009, том 73, № 10, С.1486–1490.
Английский вариант: V.M. Mamedov, V.S. Yuferev, Time-Dependent Model of the Growth of Oxide Crystals from Melt by the Czochralski Method // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics, 2009, Vol.73, No. 10, P.1402–1405.
- [65] В.М. Мамедов, В.С. Юфереv. Нестационарная модель процесса выращивания оксидных кристаллов из расплава методом Чохральского // Труды XVIII Петербургских чтений по проблемам прочности и роста кристаллов, 21-24 октября 2008 г., Санкт-Петербург, т.1, С.62-64.
- [66] М. Г. Васильев, В. М. Мамедов, С. А. Руколайне, В. С. Юфереv, Оптимизация тепловыделения в многосекционном нагревателе при выращивании кристаллов германата висмута низкоградиентным методом Чохральского // Известия РАН. Серия физическая, 2009, том 73, № 10, С.1491–1495.
Английский вариант: M.G. Vasiliev, V.M. Mamedov, S. A. Rukolaine, and V. S. Yuferev, Heat Source Optimization in a Multisection Heater for the Growth of Bismuth Germanate Crystals by the Low-Gradient Czochralski Method // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics, 2009, Vol.73, No. 10, P.1406–1409.
- [67] М.Г. Васильев, В.М. Мамедов, С.А. Руколайне, В.С. Юфереv, Оптимизация тепловыделения в многосекционном нагревателе при выращивании кристаллов германата висмута низкоградиентным методом Чохральского // Труды XVIII Петербургских чтений по проблемам прочности и роста кристаллов, 21-24 октября 2008 г., Санкт-Петербург, т.1, С.65-67.

- [68] В.М. Мамедов, В.С. Юферев, Численная визуализация процесса инверсии фронта кристаллизации при выращивании оксидных кристаллов из расплава методом Чохральского // Письма в ЖТФ, 2008, том 34, вып. 14, С.75-81.
Английский вариант: V.M. Mamedov, V.S. Yuferev, Numerical Simulation of the Crystallization Front Inversion in Oxide Single Crystals Grown from Melt using the Czochralski Method // Technical Physics Letters, 2008, Vol.34, No. 7, P.622–625.
- [69] CGSim Flow Module, Ver. 3.10, Theory Manual, STR Group, Russia, 2009, www.str-soft.com.
- [70] V.M. Mamedov, V.S. Yuferev, S.I. Bakholdin, and Yu.G. Nosov. Investigation of the Heat Exchange Processes during Growth of Basal-Plane-Faceted Sapphire Ribbons by the Stepanov Method // Crystallography Reports, 2008, Vol.53, No. 7, P.1194–1202.
- [71] В.М. Мамедов, В.С. Юферев, С.И. Бахолдин, В.М. Крымов, Ю.Г. Носов, Моделирование тепловых полей и оптимизация тепловой зоны при выращивании базисноограниченных лент сапфира шириной 50 мм // Известия РАН. Серия физическая, 2009, том 73, № 10, С.1441–1444.
Английский вариант: V.M. Mamedov, V.S. Yuferev, S.I. Bakholdin, V.M. Krymov, and Yu.G. Nosov, Thermal Field Simulation and Heat Zone Optimization for the Growth of 50 mm Basal-Plane-Faceted Sapphire Ribbons // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics, 2009, Vol.73, No. 10, P.1360–1363.
- [72] В.М. Мамедов, В.С. Юферев, С.И. Бахолдин, В.М. Крымов, Ю.Г. Носов, Моделирование тепловых полей и оптимизация тепловой зоны при выращивании базисноограниченных лент сапфира шириной 50 мм // Труды XVIII Петербургских чтений по проблемам прочности и роста кристаллов, 21-24 октября 2008 г., Санкт-Петербург, т.1, С.49-51.
- [73] В. М. Крымов, А. В. Денисов, М. И. Саллум, С. И. Бахолдин, В. М. Мамедов, В. С. Юферев, А. А. Русанов, П. В. Смирнов, Управление температурным полем и остаточными напряжениями при выращивании базисноограниченных сапфировых лент // Известия РАН. Серия физическая, 2009, том 73, № 10, С.1436–1440.
Английский вариант: V.M. Krymov, A.V. Denisov, M.I. Sallum, S.I. Bakholdin, V.M. Mamedov, V.S. Yuferev, A.A. Rusanov, and P.V. Smirnov, Control of Temperature Field and Residual Stresses in Growing Basal-Plane-Faceted Sapphire Ribbons // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics, 2009, Vol.73, No. 10, P.1355–1359.
- [74] В.М. Крымов, С.И. Бахолдин, А.В. Москалев, В.М. Мамедов, В.С. Юферев, П.И. Антонов, А.В. Денисов, М.И. Саллум, Ю.О. Пунин, Управление температурным полем и остаточными напряжениями при выращивании базисноограниченных сапфировых лент шириной 30 мм // Труды XVIII Петербургских чтений по проблемам прочности и роста кристаллов, 21-24 октября 2008 г., Санкт-Петербург, т.1, С.43-45.
- [75] В.Я. Ротач // Теория автоматического управления теплоэнергетическими процессами: Учебник для ВУЗов – М.: Энергоатомиздат. 1985. 296С.
- [76] D.Shah, C.F.Klemenz. Delay-based control model for Czochralski Growth of high-quality oxides // J. Crystal Growth, 2008, Vol.310, P.1448-1454.
- [77] Д.Н.Францев // Адаптивная система управления процессами роста кристаллов для методов Степанова и Чохральского: диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук – С.-Петербург, 2009, 160 С.
- [78] C.D.Brandle. Czochralski growth of oxides // J. Crystal Growth, 2004, Vol.264, P.593-604.
- [79] G.Muller, J.Friedrich. Challenges in modeling of bulk crystal growth // J. Crystal Growth, 2004, Vol.266, P.1-19.
- [80] J.V. Beck, B. Blackwell, Ch.R. Saint-Clair. Inverse Heat Conduction Problems, Wiley-Interscience, New York, 1985.
- [81] В.В.Калаев // Решение сопряжённой задачи гидродинамики и теплообмена в устройствах Чохральского для выращивания кристаллов кремния: диссертация на

- соискание учёной степени кандидата физико-математических наук – С.-Петербург, 2003, 168С.
- [82] Татарченко В.А. Устойчивый рост кристаллов. – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1988. – 240 С.
- [83] О.Н. Буденкова, В.С.Юфеев, И.А.Иванов, А.М.Бульканов, В.М.Калаев. Инверсия фронта кристаллизации при разращивании галлий-гадолиниевого граната в процессе Чохральского // Труды VI Межд. конф. по росту кристаллов и тепломассопереносу, Обнинск, 2005, Т.1, С. 75.
- [84] D.Schwabe, R.R.Sumathi, H.Wilke. The interface inversion process during the Czochralski growth of high melting point oxides // J. Crystal Growth, 2004, Vol.265, P.494-504.
- [85] Каргин Ю.Ф., Бурков В.И., Марьин А.А., Егорышева А.В. Кристаллы $\text{Bi}_{12}\text{M}_x\text{O}_{20\pm\delta}$ со структурой силленита. Синтез, строение, свойства. М.: ИОНХ, 2004. 312 с.
- [86] V.N. Shlegel, D.S. Pantsurkin. Specific Features in Shaping $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$ Crystals Grown by Low Thermal Gradient Czochralski Technique // Crystallography Reports, 2009, Vol.54, No.7, P.1261-1264.
- [87] Bardsley W., Hurle D.T.J. and others, Developments in the weighing method of automatic crystal pulling. // J. of Crystal Growth, 1974, P.369-373.
- [88] A.V.Borodin, I.S.Pet'kov, D.N.Frantsev, Algorithm for Crystal-Profile Control in Automated Crystal Growth by the Czochralski Method // Crystallography Reports, 2003, Vol.48, No3, P.520-523.
- [89] Боуэн Д.К., Таннер Б.К. Высокоразрешающая рентгеновская дифрактометрия и топография С-П.: Наука, 2002, 281с.
- [90] V.M. Skorikov, Yu.F. Kargin, A.V. Egorysheva, V.V. Volkov, M. Gospodinov // Growth of Sillénite-Structure Single Crystals. Inorganic Materials, Vol.41, Suppl. 1, 2005, P.24–46.
- [91] О.Н.Буденкова // Численное исследование особенностей теплообмена при выращивании оксидных кристаллов методом Чохральского: диссертация на соискание ученой степени кандидата физ.-мат. наук – С.-Петербург, 2004, 148 С.
- [92] Burattini E., Cappuccio G., Ferrari M.C., Grandolfo M., Vecchia P., Efendiev Sh.M. Medium infrared transmittance and reflectance spectra of $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$, $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ and $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ single crystals // J. Opt. Soc. America B, 1988, Vol.5, P.714-720
- [93] Fu S., Ozoe H. Growth of $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$ crystal rods and fibers by the improved floating zone method // J. Mat. Science, 1999, Vol.34, P.283-290.
- [94] Berkowski M., Iliev K., Nikolov V., Peshev P., W. Piekarczyk // Conditions of maintenance of a flat crystal/melt interface during Czochralski growth of bismuth germanium oxide single crystals // J. Crystal Growth, 1991, Vol.108, P.225-232.
- [95] Каплун А.Б., Мешалкин А.Б., Шишкин А.В. Вязкость расплава германата висмута // Расплавы.-1997.-N3, С.26-29.
- [96] J.H. Wang, D.H. Kim, J.-S. Huh. Modelling of crystal growth process in heat exchanger method // J. Crystal Growth, 1997, Vol.174, P.13-18.
- [97] Химмельблау Д.М. Прикладное нелинейное программирование. Москва: Мир, 1975, С.163.
- [98] Антонов П.И., Крымов В.М., Носов Ю.Г., Шульпина И.Л. Выращивание базисноограниченных ленточных кристаллов лейкосапфира и изучение их дислокационной структуры // Изв. РАН. Сер. физ. 2004. Т. 68. №6. С.777.
- [99] Куандыков Л.Л., Бахолдин С.И., Шульпина И.Л., Антонов П.И. Модель образования блочной структуры в базисноограниченных лентах сапфира // Изв. РАН. Сер. физ. 2004. Т. 68. № 6. С.784.
- [100] И. Л. Шульпина, С. И. Бахолдин, В. М. Крымов, П. И. Антонов, Исследование реальной структуры базисноограниченных ленточных кристаллов сапфира // Известия РАН. Серия физическая, 2009, том 73, № 10, С.1445–1450.
- [101] Сиротин Ю.И., Шаскольская М.П., Основы кристаллофизики, - М.: Наука, 1979 г.

[102] Денисов А.В., Крымов В.М., Пунин Ю.О. Исследование оптических аномалий и остаточных напряжений в базисноограниченных ленточных кристаллах сапфира, выращенных методом Степанова // Физика твердого тела, 2007, Т.49, Вып.3, С.454-459.

ПРИЛОЖЕНИЯ

А. Эффективный алгоритм трассировки луча в осесимметричном случае

В моделировании реальных процессов время, затрачиваемое на расчёт, играет ключевую роль. Поэтому эффективная реализация численного метода чрезвычайно важна. Предложенный выше подход для решения задачи радиационного теплопереноса использует трассировку большого количества лучей. Неаккуратная реализация алгоритма трассировки может привести к существенному замедлению расчётов. В этой связи в данном разделе приведён пример быстрого алгоритма трассировки с минимальным использованием относительно медленных операций (умножения, деления, извлечение квадратного корня и т.п.) для осесимметричного случая. Трёхмерный случай представляет несколько меньший интерес, так как он, как уже отмечалось, значительно проще осесимметричного как идейно, так и в плане реализации.

А.1. Случай непоглощающей и нерассеивающей среды

Поскольку в рассматриваемой ситуации вещество среды никак не взаимодействует с проходящим сквозь него излучением, то нет необходимости в точном нахождении пересечений каждого луча с внутренними сторонами сетки при отслеживании его траектории. В данном случае алгоритм трассировки луча получает на вход координаты начальной точки и направление луча, а на выходе должен вернуть координаты конечной точки – точки пересечения луча с границей области.

Итак, начальные данные - это координаты начальной точки (x_0, y_0, z_0) и угол θ между направлением распространения излучения и направлением оси z . Напомним, что в силу осевой симметрии, при решении задачи радиационного переноса рассматриваются не все лучи, а только те из них, которые распространяются параллельно плоскости xz . Поэтому координаты точек, лежащих на данном луче, удовлетворяют условию

$$y = y_0 = \text{const}$$

$$z - z_0 = (x - x_0) \operatorname{ctg} \theta$$

Удобно перейти от рассмотрения задачи в трёхмерной постановке в координатах x, y, z , к рассмотрению двумерной задачи в координатах r, z . Поскольку

$$r^2 = x^2 + y^2,$$

а

$$x = x_0 + (z - z_0) \operatorname{tg} \theta$$

то уравнение траектории луча приобретёт вид

$$r^2 - y_0^2 - (z \operatorname{tg} \theta + (x_0 - z_0 \operatorname{tg} \theta))^2 = 0.$$

Введём функцию

$$F(r, z) = r^2 - y_0^2 - (z \operatorname{tg} \theta + (x_0 - z_0 \operatorname{tg} \theta))^2,$$

с помощью которой определим следующие три множества точек на плоскости r, z

$$F^+ = \{ (r, z) \mid (r \geq 0) \cap (F(r, z) > 0) \}$$

$$F^0 = \{ (r, z) \mid (r \geq 0) \cap (F(r, z) = 0) \}.$$

$$F^- = \{ (r, z) \mid (r \geq 0) \cap (F(r, z) < 0) \}$$

Линия F^0 представляет собой ветвь гиперболы и служит границей между областями F^+ и F^- (рис. А.1).

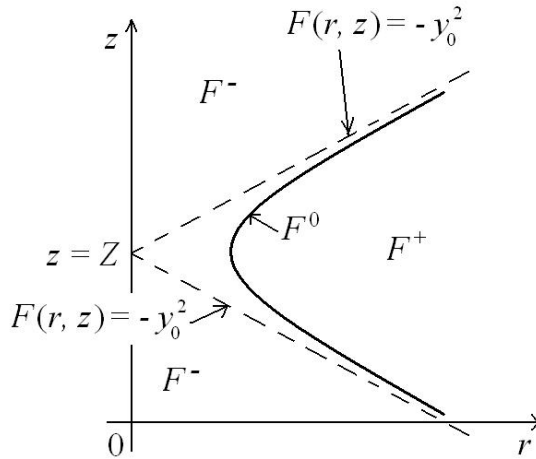


Рис. А.1. Траектория движения луча (линия F^0) в координатах r, z

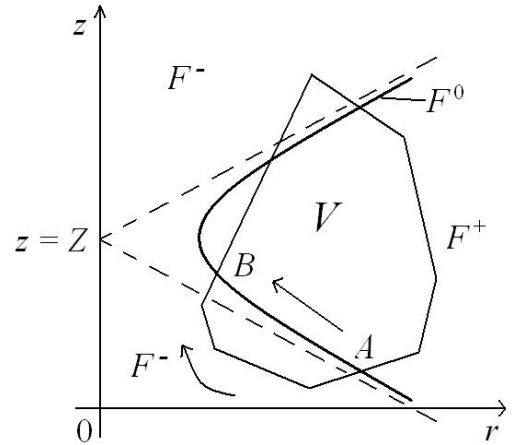


Рис. А.2. Пересечение лучом F^0 ячейки V . Стрелкой указано направление луча (снизу вверх, от A к B). При этом F^+ обходится против часовой стрелки

Приведём теперь один шаг алгоритма трассировки, на котором определяется номер следующей ячейки пересекаемой заданным лучом. Но сначала сразу же оговоримся, что в дальнейшем будут рассматриваться только те сетки, ячейки которых представляют собой выпуклые многоугольники. Это довольно слабое ограничение, так как в реальных расчётах сеток с невыпуклыми ячейками стараются избегать, поскольку они негативно влияют на устойчивость и точность численных решений тепловых задач.

Итак, пусть имеется ячейка сетки - выпуклый многоугольник с вершинами r_i, z_i $i = 1, \dots, M$, и луч

$$r^2 - y_0^2 - (z \operatorname{tg} \theta + (x_0 - z_0 \operatorname{tg} \theta))^2 = 0,$$

про который известно, что он вошёл в данную ячейку через сторону $(r_M, z_M) - (r_1, z_1)$. Задача состоит в том, чтобы найти сторону многоугольника, сквозь которую луч покинул ячейку. После того как такая сторона найдена, переходим в соседнюю смежную с этой стороной ячейку и т.д. до тех пор, пока не достигнем внешней границы рассматриваемой области. Для того, чтобы найти нужную сторону, необходимо ответить на вопрос какие стороны ячейки пересекаются с траекторией луча (линией F^0). Если окажется, что F^0 пересекается только со стороной $(r_M, z_M) - (r_1, z_1)$, и больше ни с какими другими, то это означает, что луч дважды прошёл сквозь $(r_M, z_M) - (r_1, z_1)$ - один раз на входе и один раз на выходе. Однако может оказаться так, что помимо $(r_M, z_M) - (r_1, z_1)$ луч пересекает ещё и другие стороны исходной ячейки. Таким образом, встаёт вопрос о выборе именно той стороны, которая содержит точку выхода луча из ячейки. И чтобы ответить на этот вопрос надо учитывать ещё и направление рассматриваемого луча, которое удобно связать с направлением обхода F^+ (поскольку F^0 - это граница F^+). Покажем, что верно следующее утверждение:

Точка выхода луча из ячейки V – это первая точка пересечения линии F^0 с границей ячейки ∂V при обходе ∂V в том же направлении, что и луч обходит F^+ , начиная от точки входа.

Очевидно, что точка выхода – это первая точка пересечения траектории луча с границей ∂V при движении вдоль линии F^0 , начиная от точки входа (точка A на рис. А.2). Здесь возможны два варианта – либо это первая точка пересечения при обходе ∂V в том же направлении, что и луч обходит F^0 (точка B на рис. А.2), либо это первая точка пересечения при обходе ∂V в обратном направлении. В последнем случае это пересечение (обозначим его как точку C) должно принадлежать участку AB кривой F^0 . Однако участок ∂V от A до C при обходе ∂V в направлении обратном направлению

обхода лучом области F^+ лежит внутри этой области. Следовательно, он должен пересечь не только участок AB кривой F^0 , но и прямолинейный отрезок $[AB]$, что невозможно поскольку ячейка V выпуклая и $[AB] \subset V$.

Таким образом, поиск стороны, содержащей точку выхода луча из ячейки, необходимо осуществлять путём перебора сторон полигона V начиная с $(r_M, z_M) - (r_1, z_1)$ в направлении, совпадающем с направлением следования луча по F^0 при обходе F^+ . Искомая сторона – это первая сторона, пересекающаяся с F^0 . Следовательно, необходим алгоритм ответа на вопрос о существовании такого пересечения. Для этого рассмотрим произвольный отрезок $(r_1, z_1) - (r_2, z_2)$. Поскольку линия F^0 – это внешняя граница выпуклого множества F^+ , то возможны только следующие три варианта:

- 1) F^0 пересекает отрезок $(r_1, z_1) - (r_2, z_2)$ только один раз
- 2) F^0 ни разу не пересекает отрезок $(r_1, z_1) - (r_2, z_2)$
- 3) F^0 пересекает отрезок $(r_1, z_1) - (r_2, z_2)$ дважды

Причём вариант 1) возможен тогда и только тогда, когда $(r_1, z_1) \in F^+$ и $(r_2, z_2) \in F^-$, либо $(r_1, z_1) \in F^-$ и $(r_2, z_2) \in F^+$, а вариант 3) возможен только при $(r_1, z_1) \in F^-$ и $(r_2, z_2) \in F^-$. В том случае, когда $(r_1, z_1) \in F^+$ и $(r_2, z_2) \in F^+$ линия F^0 и отрезок $(r_1, z_1) - (r_2, z_2)$ не пересекаются.

Исходя из вышесказанного, для ответа на вопрос пересекает ли F^0 отрезок $(r_1, z_1) - (r_2, z_2)$ необходимо вычислить значения $F_1 = F(r_1, z_1)$ и $F_2 = F(r_2, z_2)$. Если F_1 и F_2 разных знаков, то имеется единственное пересечение, если же оба этих значения положительны, то пересечения нет. Ситуация отрицательных значений F_1 и F_2 требует особого рассмотрения.

Прежде всего, если точки (r_1, z_1) и (r_2, z_2) лежат по одну сторону горизонтали $z = Z \equiv z_0 - x_0 \operatorname{ctg} \theta$ (то есть когда $z_1 > Z$ и $z_2 > Z$ либо $z_1 < Z$ и $z_2 < Z$), и при этом значения F_1 и F_2 не превосходят $-y_0^2$, то F^0 и $(r_1, z_1) - (r_2, z_2)$ друг друга не пересекают. Действительно,

$$F(r, z) \leq -y_0^2 \Leftrightarrow r \leq |\operatorname{tg} \theta (z - Z)| = l \operatorname{tg} \theta (z - Z),$$

где $l = +1$ либо $l = -1$, в зависимости от знака $\operatorname{tg} \theta (z - Z)$. Таким образом, $r_1 \leq l_1 \operatorname{tg} \theta (z_1 - Z)$ и $r_2 \leq l_2 \operatorname{tg} \theta (z_2 - Z)$. Причём, поскольку $z_1 - Z$ и $z_2 - Z$ одного знака, то $l_1 = l_2$. Следовательно

$$\lambda r_1 + (1 - \lambda) r_2 \leq l_{1,2} \operatorname{tg} \theta (\lambda z_1 + (1 - \lambda) z_2 - Z) = |\operatorname{tg} \theta (\lambda z_1 + (1 - \lambda) z_2 - Z)|$$

для любого $\lambda \in [0, 1]$. А это и означает, что $F(r, z) \leq -y_0^2 < 0$ для любой точки (r, z) отрезка $(r_1, z_1) - (r_2, z_2)$.

Если же точки (r_1, z_1) и (r_2, z_2) лежат по разные стороны горизонтали $z = Z$ и при этом $r_1 \geq y_0$ и $r_2 \geq y_0$, то F^0 и $(r_1, z_1) - (r_2, z_2)$ пересекаются, поскольку в точке отрезка $(r_1, z_1) - (r_2, z_2)$ с координатой $z = Z$ значение $F(r, z) \geq 0$.

Подчеркнём, что рассмотрение этих случаев не требует дополнительных вычислений с применением относительно медленных операций умножения и деления, за исключением вычисления значения y_0^2 , которое для данного луча выполняется только один раз.

И только если рассматриваемая ситуация не попадает ни под один из описанных вариантов, поведение функции F на отрезке $(r_1, z_1) - (r_2, z_2)$ изучается более детально.

Любую точку отрезка $(r_1, z_1) - (r_2, z_2)$ можно записать в следующем виде

$$r = 0.5 (r_1 (1 - t) + (t + 1) r_2)$$

$$z = 0.5 (z_1 (1 - t) + (t + 1) z_2),$$

где $-1 \leq t \leq 1$. Введём функцию

$$f(t) = F(r(t), z(t)),$$

которая представляет собой квадратный многочлен, причём $f(-1) = F_1$, а $f(1) = F_2$. Таким образом отрезок $(r_1, z_1) - (r_2, z_2)$ пересекается с F^0 тогда и только тогда, когда дискриминант $f(t)$ неотрицателен, а корни $f(t)$ лежат в интервале $[-1, 1]$.

С вычислительной точки зрения удобно найти $F_3 = f(0)$, то есть значение функции F в средней точке стороны $(r_1, z_1) - (r_2, z_2)$, а затем уже с помощью этого значения оценивать дискриминант и корни полинома $f(t)$. Дело в том, что как будет показано ниже, вычисление значений F может быть организовано весьма эффективно, с минимальным использованием относительно медленных операций умножения и деления. При этом, если $F_3 = f(0) \geq 0$, то можно сразу же заключить о наличии пересечения F^0 и $(r_1, z_1) - (r_2, z_2)$. В противном случае, записав $f(t)$ как

$$f(t) = 0.5(F_1 + F_2 - 2F_3)t^2 + 0.5(F_2 - F_1)t + F_3,$$

находится дискриминант D квадратного уравнения $f(t) = 0$

$$D = 0.25(F_2 - F_1)^2 - 2(F_1 + F_2 - 2F_3)F_3.$$

Если $D < 0$, то пересечения нет. Если $D > 0$, то корни $t_{1,2}$ данного квадратного уравнения имеют вид

$$t_{1,2} = \frac{F_1 - F_2 \pm 2\sqrt{D}}{2(F_1 + F_2 - 2F_3)}.$$

Условие $-1 \leq t_{1,2} \leq 1$ выполняется тогда и только тогда, когда $|F_1 - F_2| \leq 2|F_1 + F_2 - 2F_3|$ и $D \leq (F_1 + F_2 - 2F_3)^2$. Таким образом, ответить на вопрос о наличии пересечения F^0 и $(r_1, z_1) - (r_2, z_2)$, можно и без вычисления корней $t_{1,2}$, избежав тем самым использования медленной операции извлечения квадратного корня.

Построенная процедура опирается на вычисление значений функции F в узлах и центрах сторон сетки. Это вычисление, как уже отмечалось, может быть организовано весьма эффективно с вычислительной точки зрения. Действительно, для n -го узла с координатами (r, z) можно записать:

$$F_n \equiv F(r, z) = r^2 - y_0^2 - (\tilde{z} - \tilde{Z})^2,$$

где $\tilde{z} = z \operatorname{tg} \theta$, а $\tilde{Z} = z_0 \operatorname{tg} \theta - x_0$. Таким образом, при известных значениях $\tilde{z}$, y_0^2 и $\tilde{Z}$ для вычисления F_n требуется всего одна операция умножения. Величины y_0^2 и $\tilde{Z}$ находятся один раз для каждого луча, а значения $\tilde{z}$ должны быть посчитаны заранее для всех узлов сетки. Однако $\tilde{z}$ зависит только от z -координаты и от полярного угла θ . Поэтому для направлений с одинаковым θ не требуется пересчёта $\tilde{z}$. Следовательно, на вычисление всех значений $\tilde{z}$ потребуется $N_{nodes} \cdot N_\theta$ умножений, где N_{nodes} - количество узлов сетки, а N_θ - количество разбиений по углу θ . При этом общее количество вычислений F можно грубо оценить как величину порядка $N_{nodes} \cdot N_\Omega$, где N_Ω - число рассматриваемых дискретных направлений. Обычно N_Ω существенно больше N_θ . Например, для использовавшейся в расчётах, так называемой S_N схемы выбора дискретных ординат, общее количество рассматриваемых направлений составляет величину порядка N_θ^2 .

* Поскольку $f(-1) < 0$ и $f(+1) < 0$, то либо $|t_1| \leq 1$ и $|t_2| \leq 1$, либо $|t_1| > 1$ и $|t_2| > 1$. Тогда если $|F_1 - F_2| \leq 2|F_1 + F_2 - 2F_3|$ и $D \leq (F_1 + F_2 - 2F_3)^2$, то $\min\{|t_1|, |t_2|\} \leq 1$, а если $|F_1 - F_2| > 2|F_1 + F_2 - 2F_3|$ или $D > (F_1 + F_2 - 2F_3)^2$, то $\max\{|t_1|, |t_2|\} > 1$.

Замечание. Зачастую для расчёта теплообмена излучением в областях, заполненных непоглощающей и нерассеивающей средой, используют метод угловых коэффициентов [45] (view factor метод). К достоинствам данного метода можно отнести, например то, что в нём не задействована внутренняя сетка. Однако этот метод имеет и ряд недостатков. Прежде всего, он хорошо работает только в задачах с диффузными границами. Наличие зеркальных и френелевских областей делает его применение весьма проблематичным. Кроме того, в отличие от метода дискретных ординат, в методе угловых коэффициентов сложнее контролировать скорость счёта и точность решения. В частности, подобный контроль удобно осуществлять, управляя количеством дискретных направлений N_Ω , что невозможно в методе угловых коэффициентов. За счёт выбора N_Ω можно, например, существенно ускорить расчёты, уменьшив количество дискретных направлений в тех областях, где не требуется большая точность решения. Особенно это актуально при решении задач с непостоянной геометрией, поскольку смещение сетки влечёт за собой необходимость пересчёта угловых коэффициентов, что может существенно замедлить расчёт.

А.2. Общий случай

Описанный выше алгоритм позволяет проводить быструю трассировку лучей в тех областях, в которых можно пренебречь рассеянием и поглощением теплового излучения. Если же рассеянием и поглощением пренебречь нельзя, то при трассировке луча через каждую ячейку необходимо не только ответить на вопрос, какой из сторон ячейки принадлежит точка выхода луча из ячейки, но и определить координаты этой точки.

В. Условие постоянства формы фронта

Выведем условие постоянства формы фронта с учётом кристаллизации (плавления) вещества и изменения уровня расплава в тигле в процессе роста.

Пусть $\mathbf{x}(t) = (x, y, z)$ - координаты точки на фронте в момент времени t . В момент времени $t + dt$ эта точка фронта сместится, во-первых, из-за кристаллизации вещества, а во-вторых, из-за вытягивания кристалла вверх со скоростью V_{pull} . Это можно записать как

$$\mathbf{x}(t + dt) = \mathbf{x}(t) - v_{crist} \mathbf{n}(\mathbf{x}) dt + V_{pull} \mathbf{e}_{vert} dt,$$

где v_{crist} - скорость кристаллизации вещества в данной точке в данный момент времени, $\mathbf{n}(\mathbf{x})$ - направленная *внутрь* кристалла нормаль к фронту в точке $\mathbf{x}$, а $\mathbf{e}_{vert}$ - единичный вектор, направленный вертикально вверх. Следует учитывать, что если вещество не кристаллизуется, а плавится, то $v_{crist} < 0$.

В том случае, когда можно пренебречь изменением уровня расплава, форма фронта остаётся неизменной только при условии, что точки фронта не смещаются в нормальном направлении:

$$(\mathbf{x}(t + dt) - \mathbf{x}(t)) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) = 0.$$

Отсюда, учитывая, что $\mathbf{n}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) = 1$, получаем условие

$$\frac{v_{crist}}{\mathbf{e}_{vert} \cdot \mathbf{n}} = V_{pull}.$$

Обозначим угол между вертикалью $\mathbf{e}_{vert}$ и нормалью к фронту $\mathbf{n}$ как θ . Тогда $\mathbf{e}_{vert} \cdot \mathbf{n} = \cos \theta$, а искомое уравнение записывается как

$$\frac{v_{crist}}{\cos \theta} = V_{pull}$$

Когда изменением уровня расплава пренебречь нельзя, то вместо скорости вытягивания кристалла относительно неподвижного тигля V_{pull} , должна стоять скорость

вытягивания относительно уровня расплава. В этом случае условие постоянства формы фронта приобретает следующий вид

$$\frac{v_{crist}}{\cos \theta} = V_{pull} + V_{melt},$$

где V_{melt} – скорость опускания расплава.

Скорость опускания расплава можно найти исходя из того, что приращение массы кристалла равно убыли массы расплава

$$dM_{crist} = -dM_{melt}.$$

Кристаллизация и плавление вещества происходят на фронте:

$$\frac{dM_{crist}}{dt} = \rho_{crist} \int_{S_{fr}} v_{crist} ds,$$

где S_{fr} – поверхность фронта кристаллизации, а ρ_{crist} – плотность кристалла. В осесимметричном случае $ds = 2\pi r \frac{dr}{\cos \theta}$ поэтому

$$\frac{dM_{crist}}{dt} = \rho_{crist} 2\pi \int_0^R \frac{v_{crist}(r)}{\cos \theta} r dr,$$

где R – радиус кристалла. Если форма фронта кристаллизации постоянна, то $\frac{v_{crist}}{\cos \theta} = V_{pull} + V_{melt}$ и

$$\frac{dM_{crist}}{dt} = \rho_{crist} \pi R^2 (V_{pull} + V_{melt}).$$

Для цилиндрического тигля радиуса R_{cru} скорость убыли массы расплава можно записать как

$$-\frac{dM_{melt}}{dt} = \rho_{melt} V_{melt} \pi R_{cru}^2.$$

Т.о. в осесимметричном случае имеем соотношение

$$\rho_{crist} \pi R^2 (V_{pull} + V_{melt}) = \rho_{melt} V_{melt} \pi R_{cru}^2.$$

Откуда

$$V_{melt} = \frac{V_{pull}}{\frac{\rho_{melt} R_{cru}^2}{\rho_{crist} R^2} - 1}$$

$$V_{pull} + V_{melt} = \frac{V_{pull}}{1 - \frac{\rho_{crist} R^2}{\rho_{melt} R_{cru}^2}}.$$

Тогда условие постоянства формы фронта в осесимметричном случае

$$\frac{v_{crist}}{\cos \theta} = \frac{V_{pull}}{1 - \frac{\rho_{crist} R^2}{\rho_{melt} R_{cru}^2}}.$$

С. Расчёт распределения температуры резистивного нагревателя

Температура нагревателя определяется, в первую очередь, тепловыделением, вызванным прохождением сквозь него электрического тока. То есть уравнение теплопроводности в объёме нагревателя имеет вид

$$-\nabla \cdot (k \nabla T) = \mathbf{j} \cdot \mathbf{E}, \quad (\text{C.1})$$

где k – коэффициент теплопроводности графита, $\mathbf{j}$ – вектор плотности электрического тока, $\mathbf{E}$ – напряжённость электрического поля.

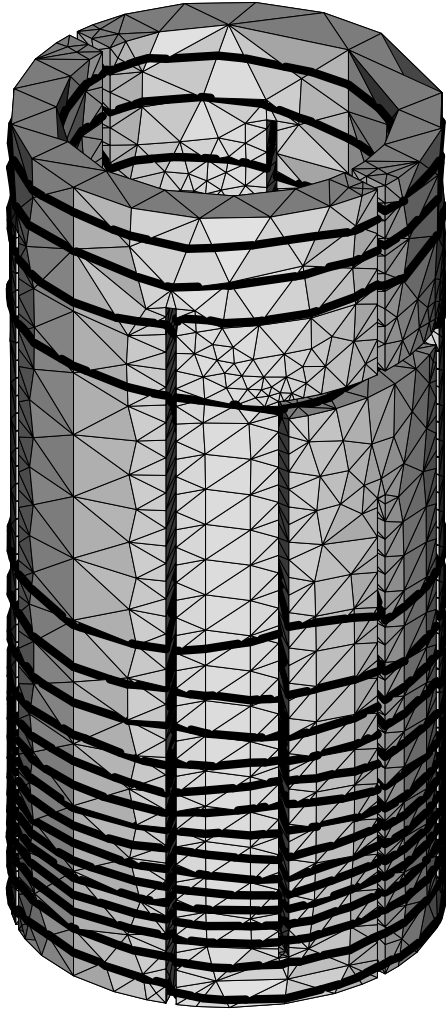


Рис. С.1. Линии изотерм на поверхности нагревателя

Поверхность нагревателя покрыта сложной системой разрезов (рис. 5.6), которая приводит к сильной неоднородности распределения плотности тока $\mathbf{j}$ и, как следствие, вызывает неоднородность тепловыделения.

Для нахождения тепловыделения в нагревателе используем закон Ома

$$\mathbf{j} = \gamma \mathbf{E}, \quad (\text{C.2})$$

где γ – удельное сопротивление графита.

Следовательно

$$\mathbf{j} \cdot \mathbf{E} = \gamma \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} = \gamma E^2. \quad (\text{C.3})$$

Напряжённость электрического поля выражается через электрический потенциал φ

$$\mathbf{E} = -\nabla \varphi. \quad (\text{C.4})$$

В объёме нагревателя φ удовлетворяет уравнению Лапласа

$$\Delta \varphi = 0. \quad (\text{C.5a})$$

Граничные условия для этого уравнения имеют следующий вид:

$$\varphi = \varphi_1, \text{ на токовом } 1, \quad (\text{C.5b})$$

$$\varphi = \varphi_2, \text{ на токовом } 2$$

$$(\text{C.5c})$$

и

$$\frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0, \text{ на всей остальной поверхности}$$

$$\text{нагревателя.} \quad (\text{C.5d})$$

Поскольку для нахождения объёмного тепловыделения необходимо знать только $\nabla \varphi$,

то можно положить $\varphi_1 = 0$, а величиной φ_2 варьировать с тем, чтобы подобрать необходимую величину тепловыделения.

Замечание. При решении задачи (C.5), нет необходимости знать величину γ , поскольку $\mathbf{j} \cdot \mathbf{E} = \gamma E^2 = \gamma \varphi_2 |\nabla \tilde{\varphi}|^2$, где $\tilde{\varphi}$ – это решение задачи (5) с $\varphi_1 = 0$ и $\varphi_2 = 1$. Таким образом, на самом деле при подборе тепловыделения в нагревателе варьируется не φ_2 , а величина $\gamma \varphi_2$.

На рис. С.1 представлено найденное из расчётов распределение температур по нагревателю. Видно, что изотермы расположены практически горизонтально. Таким образом, несмотря на неоднородное распределение объёмных источников $\mathbf{j} \cdot \mathbf{E}$ по нагревателю, температурное поле можно считать практически осесимметричным.

D. Влияние ориентации ленты на термоупругие напряжения

В работе [99] уже было показано, что при одном и том же распределении температуры величина компонент тензора термоупругих напряжений слабо зависит от ориентации ленты. Однако, в данной работе использовалась несколько упрощённая постановка задачи.

Чтобы окончательно снять все вопросы, касающиеся влияния кристаллофизической ориентации, была проведена серия расчётов в более строгой, чем в работе [100] полностью трёхмерной постановке. Моделирование производилось для ленты сапфира шириной 50 мм, толщиной 2 мм, и высотой 90 мм. Все расчёты проводились для одной и той же конфигурации тепловых экранов (рис. D.1). При этом для найденного температурного поля в ленте (рис. D.2), решалась задача термоупругости при различных ориентациях кристаллофизических осей.

На рис. D.3 приведено распределение XX компоненты тензора напряжений для лент трёх разных ориентаций. Вариант I соответствует базисноограниченной ленте. Ось [0001] (оптическая ось) лежит горизонтально, перпендикулярно широкой стороне ленты. Вариант II – случай призматической ленты. Плоскость ленты перпендикулярна [1-210]. Направление вытягивания перпендикулярно оси [0001]. Последний вариант III соответствует росту ромбоэдрической ленты, у которой широкая сторона ленты совпадает с гранью ромбоэдра (10-11). В таблице D.1 приведены координаты орт $\mathbf{e}_x$, $\mathbf{e}_y$, $\mathbf{e}_z$, кристаллофизических осей x, y, z в глобальной системе координат X, Y, Z . Причём $\mathbf{e}_z$ совпадает с [0001], $\mathbf{e}_y$ с [01-10], а ось $\mathbf{e}_x$ ортогональна $\mathbf{e}_z$ и $\mathbf{e}_y$.

Проведённые расчёты ещё раз подтвердили, что при данной матрице жёсткости (5.6)-(5.7), в данной установке влияние ориентации кристаллографических осей на распределение термоупругих напряжений в ленте сапфира хоть и имеет место, но настолько незначительно, что им можно пренебречь.

Таблица D.1. Расположение кристаллофизической системы координат x, y, z относительно глобальной системы X, Y, Z :

Вариант I	Вариант II	Вариант III
$\mathbf{e}_x = \begin{bmatrix} -\sin 30^\circ \\ 0 \\ \cos 30^\circ \end{bmatrix}, \mathbf{e}_y = \begin{bmatrix} \cos 30^\circ \\ 0 \\ \sin 30^\circ \end{bmatrix},$ $\mathbf{e}_z = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$	$\mathbf{e}_x = \begin{bmatrix} -\sin 30^\circ \\ \cos 30^\circ \\ 0 \end{bmatrix}, \mathbf{e}_y = \begin{bmatrix} \cos 30^\circ \\ \sin 30^\circ \\ 0 \end{bmatrix},$ $\mathbf{e}_z = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$	$\mathbf{e}_x = \begin{bmatrix} -1/2 \\ \sqrt{3/7} \\ -3/2\sqrt{7} \end{bmatrix},$ $\mathbf{e}_y = \begin{bmatrix} -\sqrt{3}/2 \\ -1/\sqrt{7} \\ -\frac{1}{2}\sqrt{3/7} \end{bmatrix}, \mathbf{e}_z = \begin{bmatrix} 0 \\ \sqrt{3/7} \\ 2/\sqrt{7} \end{bmatrix}$

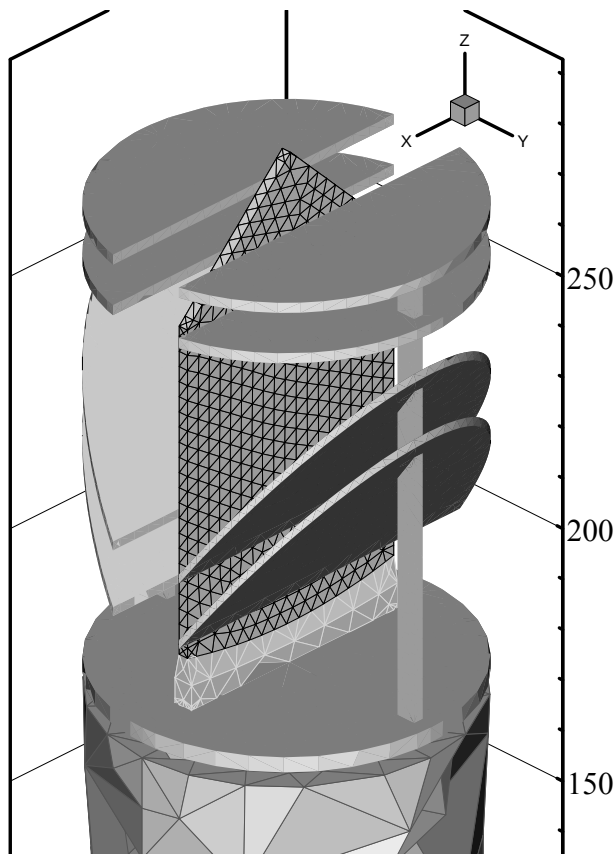


Рис. D.1. Конфигурация задачи

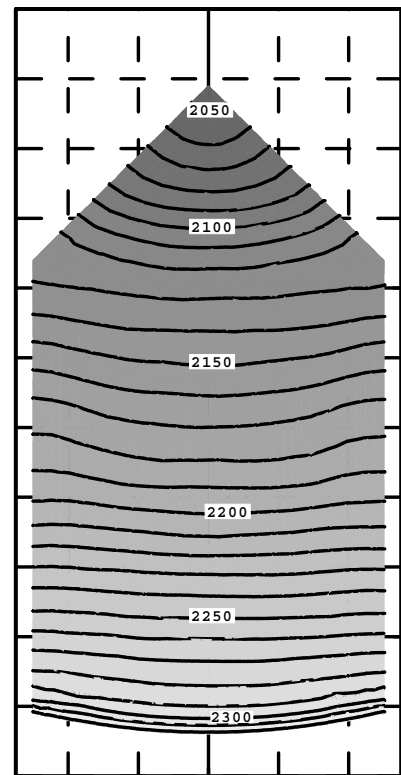


Рис. D.2. Температурное поле в кристаллической ленте сапфира. Изотермы проведены с интервалом в 10 К

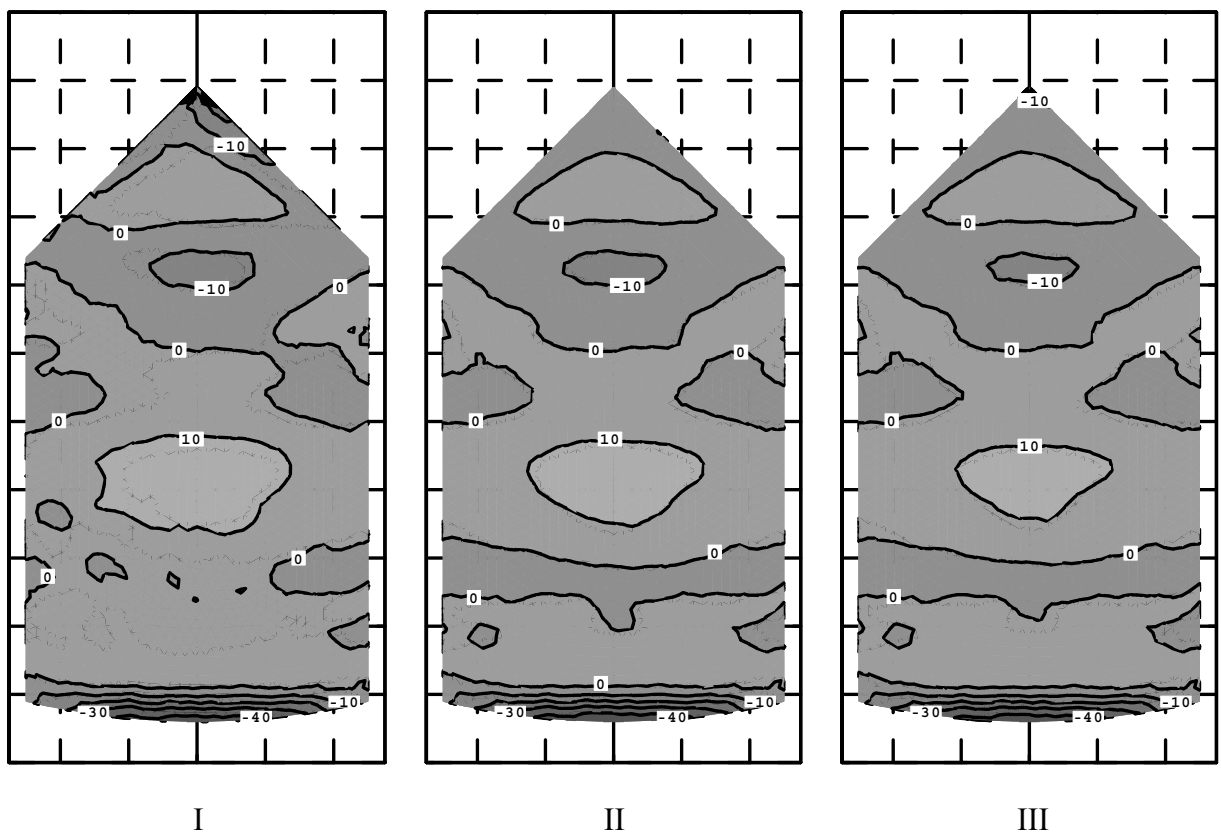


Рис. D.3. Распределение XX компоненты тензора напряжений в ленте сапфира при различных ориентациях кристаллофизических осей. Расстояние между изолиниями 10 МПа