

УДК 536.421

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОФИЛЬНЫХ КРИВЫХ МЕНИСКОВ ДЛЯ ПРОЦЕССА ВЫРАЩИВАНИЯ КРИСТАЛЛОВ ПО СПОСОБУ СТЕПАНОВА

© 2009 г. С. Н. Россоленко, В. Н. Курлов, А. А. Асрян

Учреждение Российской академии наук
Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка
E-mail: kurllov@issp.ac.ru; ross@issp.ac.ru

Исследовано поведение профильных кривых менисков расплава для случая выращивания способом Степанова сапфировых труб различных диаметров. Рассмотрены случаи внешних и внутренних круговых менисков, образуемых кристаллической трубой. Исследован случай положительных углов контакта профильной кривой с рабочей поверхностью формообразователя.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время актуальными задачами совершенствования технологии выращивания профилированных кристаллов сапфира являются расширение диапазона получаемых поперечных размеров кристаллов (как в сторону увеличения, так и в сторону уменьшения) и повышение качества получаемых монокристаллов (например, для оптических приложений).

В настоящей работе проведено численное исследование поведения профильных кривых менисков расплава при выращивании сапфировых труб различного диаметра. Знание характеристик профильных кривых менисков требуется для их дальнейшего использования в автоматизированных системах управления процессами выращивания с использованием датчика веса.

Известно немалое число работ [1–7], посвященных изучению влияния формы менисков на процессы кристаллизации. В данной работе исследованы мениски с положительным углом θ_d наклона касательной к профильной кривой. Рассмотрено правое сечение вертикального сечения кристаллического стержня и образованного им мениска. При этом угол θ_d определяется как угол между касательной к профильной кривой мениска и горизонталью в точке контакта мениска с краем формообразователя. Такие углы возможны для случая скошенных рабочих поверхностей формообразователя, которые используются для управления формой фронта кристаллизации с целью оптимизации распределения дефектов в растущем кристалле и его блочной структуры [8]. Определен минимальный угол скоса рабочей поверхности формообразователя, при котором может образоваться мениск с положительным углом θ_d . Изучение профильных кривых менисков с по-

ложительным углом θ_d является новым исследованием по сравнению с известными работами.

Изучение профильных кривых менисков расплава проведено на основе численного решения капиллярного уравнения Лапласа [9] с различными параметрами и краевыми условиями, соответствующими условию зацепления мениска за край формообразователя:

$$z''r + z'(1 + z'^2) \pm 2(H_d - z)(1 + z'^2)^{3/2}r = 0, \quad (1)$$

где z — текущая высота мениска, r — текущий радиус мениска, H_d — внешнее давление, обусловленное разницей уровней расплава в тигле и основания мениска. В рассматриваемых процессах выращивания сапфира способом Степанова обычно поверхность расплава в тигле находится ниже основания мениска, т.е. $H_d < 0$, поэтому в данной работе рассматриваются значения внешнего давления, меньше нуля или близкие к нулю ($H_d \leq 0$). Уравнение (1) записано в безразмерном виде с нормировкой на капиллярную постоянную. Далее все величины, получаемые при решении этого уравнения, также находятся в безразмерном виде с нормировкой на капиллярную постоянную.

Краевые условия для уравнения (1) могут быть определены различными образами. В представленных расчетах в основном используем следующие краевые условия:

$$z(R_d) = 0, \quad -\arctg z'(r_c) = \pi/2 - \varepsilon, \quad (2)$$

где r_c — радиус кристалла, R_d — радиус рабочей поверхности формообразователя, ε — угол роста, который для сапфира составляет приблизительно 13° [5, 10].

Таким образом, на рабочей поверхности формообразователя задается нулевая высота мениска, а на конце мениска, контактирующем с краем

кристалла, задается условие, связанное с постоянством угла роста.

Численные значения для краевых условий при решении уравнения Лапласа, а именно: радиусы кристалла и формообразователя, внешнее давление, угол роста — брались близкими к реальным на основе экспериментальных данных процессов выращивания профилированных кристаллов.

Были проанализированы следующие четыре фактора: исследование зависимости профильных кривых менисков от радиуса кристалла, от внешнего давления, от угла θ_d контакта мениска с краем формообразователя, от радиусов кристалла и формообразователя с постоянным зазором между ними.

Исследование профильных кривых менисков в зависимости от угла θ_d и от радиусов кристалла и формообразователя с постоянным зазором между ними осуществляется впервые.

ВНЕШНИЕ КРУГОВЫЕ МЕНИСКИ

Исследование зависимости профильных кривых менисков от радиуса кристалла

На рис. 1а изображены типичные профильные кривые внешних круговых менисков, рассчитанные для различных значений внешнего радиуса кристаллической трубы и положительного угла θ_d .

Результаты расчетов свидетельствуют, что если варьировать угол θ_d приблизительно от $-\pi/2$ до $+\pi/2$, то выполнению краевых условий (2) соответствуют два решения уравнения Лапласа (1): одно — в области отрицательных углов θ_d , другое — в области положительных углов.

Какой из этих вариантов будет реализован в действительности, зависит от типа формообразователя: в случае горизонтальных рабочих кромок угол θ_d будет иметь отрицательное значение, в случае достаточно сильного наклона кромок — более вероятно образование менисков с положительными значениями угла θ_d .

Исследование зависимости профильных кривых менисков от внешнего давления

Из рис. 1б видно, что с ростом внешнего давления от $H_d = -8$ до $H_d = -2$ высота профильных кривых менисков растет, а кривизна уменьшается. Это связано с тем, что с уменьшением абсолютной величины внешнего давления уменьшается и величина давления кривой поверхности расплава, которое уравнивается внешнее. В связи с этим сила, прижимающая мениск к рабочей поверхности формообразователя, уменьшается.

Высота профильных кривых менисков растет тем быстрее, чем ближе абсолютная величина внешнего давления к нулю.

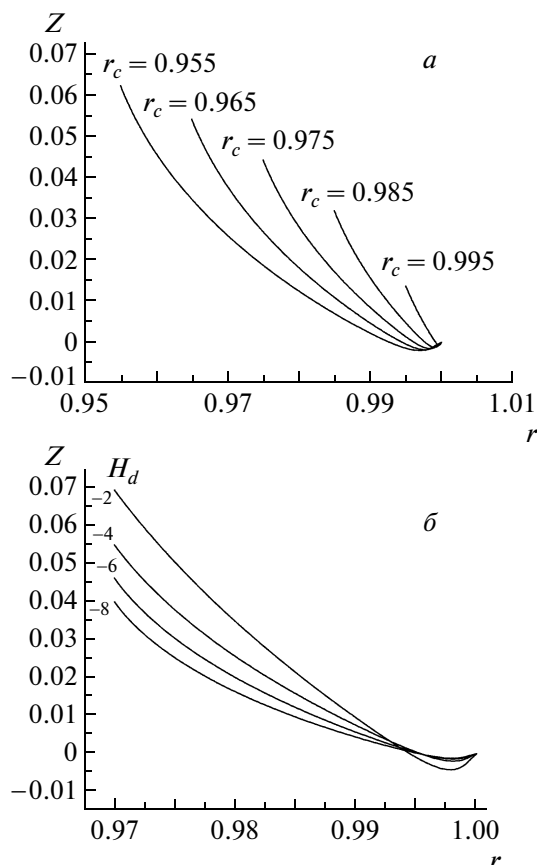


Рис. 1. Профильные кривые внешних круговых менисков: а — при изменении радиуса кристалла, б — при изменении внешнего давления.

Исследование зависимости профильных кривых менисков от угла θ_d контакта мениска с краем формообразователя

Оценка диапазона изменения угла θ_d необходима для расчета программной массы растущего кристалла, который производится при автоматизированном управлении процессом роста с использованием датчика веса.

Для фиксированных радиусов кристалла и рабочих кромок формообразователя проводили расчеты профильных кривых при различных углах θ_d . Согласование профильной кривой мениска с условием постоянства угла роста вблизи края кристалла не требовалось. Результаты расчета представлены на рис. 2а, б.

Данные, использованные при построении рис. 2б, позволяют определить диапазон реальных углов θ_d . Действительно, если иметь в виду, что угол роста для различных материалов находится в диапазоне от 0° до 20° , что соответствует изменению углов θ_c от -90° до -70° , то, как видно из рис. 2б, этому диапазону изменения углов θ_c (для заданных параметров моделирования) соот-

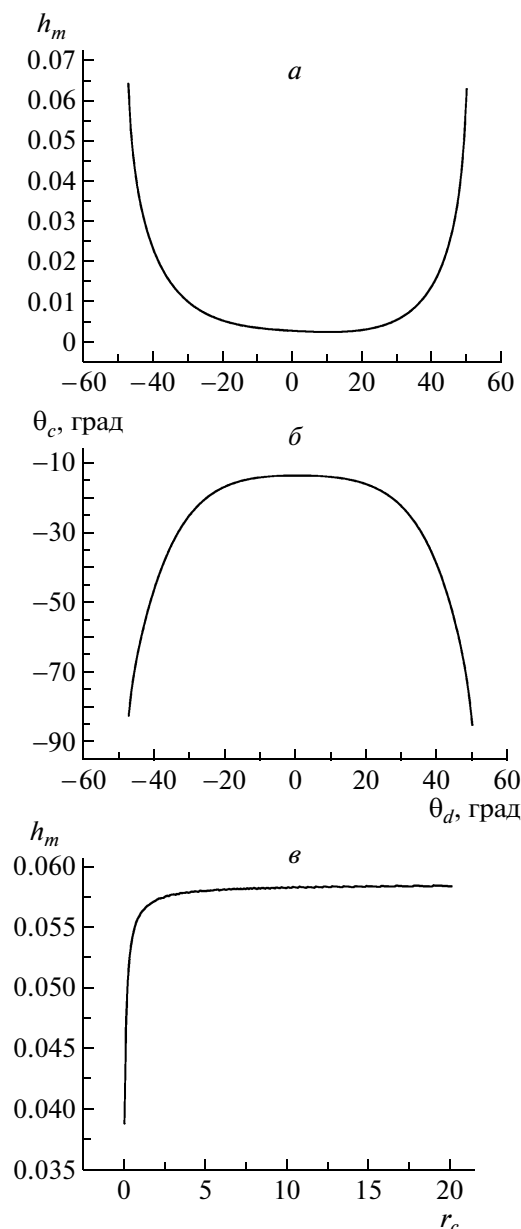


Рис. 2. Зависимость высоты h_m мениска (а) и угла θ_c мениска в тройной точке (б) от угла θ_d контакта мениска с краем формообразователя, зависимость высоты мениска от радиуса кристалла при неизменной разности радиусов формообразователя и кристалла, для случая внешних круговых менисков (в).

ветствуют следующие приблизительные области изменения углов θ_d : от -50° до -45° в случае отрицательных углов и от 45° до 50° в случае положительных углов θ_d .

По известному диапазону значений угла θ_d по графику, представленному на рис. 2а, находится диапазон значений высоты мениска h_m . Значения угла θ_d и высоты h_m мениска используются в программном уравнении наблюдения автоматизиро-

ванной системы управления выращиванием кристаллов.

Кроме того, для расчета программной массы необходимо знать знак угла θ_d . Как уже упоминалось ранее, на обычных (нескошенных) формообразователях этот угол отрицательный, в то время как на скошенном формообразователе более вероятно образование мениска с положительным углом, при условии, что рабочая поверхность формообразователя скошена под углом, превышающим абсолютную величину угла θ_d .

Исследование зависимости профильных кривых менисков от радиусов кристалла и формообразователя с постоянным зазором между ними

Проведены расчеты при одновременном изменении радиуса r_c кристалла и радиуса R_d рабочих кромок формообразователя.

Как показано на рис. 2в, основное изменение высоты мениска происходит при изменении радиуса кристалла (и соответственно радиуса формообразователя) в пределах одной капиллярной постоянной. При дальнейшем увеличении радиусов кристалла и формообразователя высота мениска почти не меняется.

Угол θ_d так же, как и высота мениска, меняется значительно при изменении радиуса кристалла (и соответственно радиуса формообразователя) в пределах одной капиллярной постоянной. Абсолютная величина угла θ_d растет с увеличением радиусов кристалла и формообразователя. Это связано с увеличением высоты мениска, что требует более «резкого» подъема профильной кривой вблизи рабочих кромок формообразователя и соответственно большей абсолютной величины этого угла.

Из приведенной на рис. 2в кривой, хорошо видна разница в поведении менисков между случаями «больших» и «малых» радиусов кристалла. При «переходе» радиуса через величину, примерно равную капиллярной постоянной, кардинальным образом меняется характер зависимостей высоты мениска и угла при формообразователе.

ВНУТРЕННИЕ КРУГОВЫЕ МЕНИСКИ

Анализ поведения внутренних круговых менисков осуществлялся для случаев, аналогичных исследованиям внешних круговых менисков.

Профильные кривые, рассчитанные для внутренних менисков, в общем-то похожи на кривые, показанные на рис. 1, относящиеся к внешним круговым менискам. Небольшие различия связаны с тем, что азимутальная кривизна (второй член уравнения (1)), входящая в анализируемое

уравнение Лапласа, для внутреннего мениска имеет положительный знак, в то время как для внешнего мениска знак этой кривизны отрицательный. Из-за этого для одних и тех же значений радиусов профильные кривые внутренних менисков идут чуть выше профильных кривых внешних менисков при одинаковых остальных параметрах моделирования.

Для фиксированных радиусов кристалла и формообразователя и внешнего давления проводились также расчеты при различных углах θ_d — без согласования с условием постоянства угла роста вблизи края кристалла. Зависимости основных характеристик менисков также похожи на соответствующие зависимости, показанные на рис. 2а, б для случая внешних круговых менисков.

Для внутренних круговых менисков также проводили расчеты при одновременном изменении радиуса r_c кристалла и радиуса R_d рабочих кромок формообразователя (при постоянной разнице между этими радиусами).

Зависимость высоты внутренних менисков носит слабо убывающий характер, тогда как высота внешних менисков возрастает.

Это объясняется тем, что азимутальная кривизна в рассматриваемых случаях имеет разные знаки. При малых внутренних менисках эта кривизна достаточно велика и ее положительная добавка к высоте мениска существенна. Затем, по мере увеличения радиусов кристалла и формообразователя, влияние азимутальной кривизны падает, вследствие чего высота внутренних менисков уменьшается.

Основное изменение угла θ_d , как и высоты внутренних менисков, приходится в основном на изменение радиусов кристалла и формообразователя в пределах одной капиллярной постоянной. Изменение угла θ_d для внутренних менисков незначительно по сравнению с аналогичными углами для внешних менисков. При этом абсолютная величина угла немного уменьшается, в то время как для внешних менисков она возрастает.

ВЫВОДЫ

На основе численного решения капиллярного уравнения Лапласа был проведен анализ формы профильных кривых и их характеристик при положительном знаке угла θ_d , характерных для случая скошенных рабочих поверхностей формообразователей.

Обнаружено существование двух решений уравнения Лапласа для случая стационарного роста — с положительным и отрицательным значениями угла θ_d контакта мениска с формообразователем.

Выявлены различия в высотах внешних и внутренних менисков трубы при прочих равных

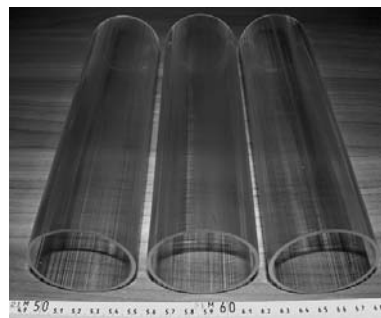


Рис. 3. Сапфировые трубы внешним диаметром 55 мм, выращенные автоматизированным способом Степанова.

условиях. Это объясняется тем, что для внешнего и внутреннего менисков азимутальная кривизна имеет разные знаки и соответственно по-разному влияет на высоту мениска в том или ином случае.

Установлены прямо противоположные поведения высот внешних и внутренних менисков в зависимости от одновременного изменения радиусов кристалла и формообразователя с постоянным зазором между ними. Главным образом это также объясняется разным знаком азимутальной кривизны внешних и внутренних менисков.

Получено сходство поведения высоты менисков с различными знаками углов зацепления за край формообразователя в зависимости от величины внешнего давления. Эта зависимость носит нелинейный характер.

Построены зависимости высоты менисков и углов профильных кривых вблизи края кристалла от углов θ_d , не требующих согласования менисков вблизи края кристалла с условием постоянства угла роста. Для рассмотренных параметров моделирования процесса выращивания цилиндрической трубы найден диапазон значений угла θ_d , соответствующий реальным условиям формообразования, в соответствии с которым абсолютная величина реального угла θ_d может быть в пределах от 45° до 50° . Значение этого угла необходимо задавать в автоматизированной системе управления процессом роста кристаллов для определения программной массы, взвешиваемой датчиком веса.

В качестве примера использования расчетов профильных кривых менисков в автоматизированном управлении процессом выращивания кристаллов с использованием датчика веса можно привести выращивание крупногабаритных сапфировых труб с внешним диаметром 55 мм (рис. 3).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Цивинский С.В. // Инж.-физ. журн. 1962. Т. 5. № 9. С. 59.
2. Татарченко В.А. Устойчивый рост кристаллов. 1988. М.: Наука, 1988. 240 с.
3. Щелкин Ю.Ф. // Физика и химия обраб. материалов. 1971. Т. 3. С. 29.
4. Surek T., Chalmers B., Mlavsky A.I. // J. Cryst. Growth. 1977. V. 42. P. 453.
5. Kuandykov L.L., Antonov P.I. // J. Cryst. Growth. 2001. V. 232. P. 852.
6. Rossolenko S.N. // J. Cryst. Growth. 2001. V. 231. P. 306.
7. Rossolenko S.N., Zhdanov A.V. // J. Cryst. Growth. 1990. V. 104. P. 8.
8. Перов В.Ф., Панков В.С., Иванов И.А. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1979. Т. 43. № 9. С. 1977.
9. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика сплошных сред. М.: Гостехтеориздат, 1953.
10. Satunkin G.A. // J. Cryst. Growth. 2003. V. 255. P. 170.