МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Получение монокристаллов и полупроводниковых структур

АКАДЕМИЯ НАУК СССР

ОТДЕЛЕНИЕ ИНФОРМАТИКИ,
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ТЕХНИКИ И АВТОМАТИЗАЦИИ
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
им. М. В. КЕЛДЫША

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Получение монокристаллов и полупроводниковых структур

Ответственные редакторы:

академик А. А. САМАРСКИЙ,
доктор физико-математических наук
Ю. П. ПОПОВ,
кандидат физико-математических наук
О. С. МАЖОРОВА

МОСКВА «НАУКА» 1986

УДК 519.6 : 548.5

Математическое моделирование. Получение монокристаллов и полупроводниковых структур.— М.: Наука, 1986.

Статьи, представленные в данном сборнике, знакомят читателей с современным состоянием математического моделирования на ЭВМ в задачах, связанных с технологией получения полупроводниковых материалов. Они написаны ведущими специалистами в этой области и охватывают основные технологические процессы, используемые в настоящее время в промышленности.

Содержащиеся в сборнике результаты численного моделирования, а также их сопоставление с экспериментальными данными позволяют выявить детальную картину рассматриваемых технологических процессов и наметить пути их оптимизации.

Оригинальные вычислительные алгоритмы решения возникающих здесь математических задач имеют самостоятельное значение.

Издание представляет интерес для специалистов в области вычислительной математики и математической физики, технологов, студентов и аспирантов соответствующих специальностей.

Рецензенты:

С. П. КУРДЮМОВ, В. М. ПАСКОНОВ

М $\frac{1502000000-262}{042(02)-86}$ 119-86—III

© Издательство «Наука», 1986 г.

ПРЕДИСЛОВИЕ

Бурное развитие и внедрение электроники в современное народное хозяйство и научные исследования требуют большого промышленного производства полупроводниковых материалов. В связи с этим важное значение приобретает разработка совершенных методов их получения. Определяющую роль в формировании объемных монокристаллов и полупроводниковых структур с заданными электрофизическими свойствами играют процессы тепло- и массопереноса. Исследование этих процессов до последнего времени проводилось специалистами-технологами в основном экспериментальными методами. Однако современное приборостроение, требуя расширения производства монокристаллов и полупроводниковых структур, предъявляет все более высокие и разнообразные требования к их свойствам и качеству. Это приводит к резкому возрастанию сложности экспериментальных исследований, их стоимости и трудоемкости. Естественно, что в этих условиях возникает необходимость привлечения к исследованиям, направленным на совершенствование и оптимизацию промышленных способов получения полупроводниковых материалов, методов вычислительного эксперимента.

Вычислительный эксперимент как мощное средство теоретического исследования убедительно продемонстрировал свою высокую эффективность в различных областях науки и техники, и прежде всего в физике. Идеологической базой вычислительного эксперимента является математическое моделирование, методологической — теория вычислительных алгоритмов, технической — современные электронные вычислительные машины.

С точки зрения применения методов вычислительного эксперимента задачи современной технологии представляются более сложными, чем, например, традиционные фундаментальные исследования в физике. Дело в том, что в области технологии расчетно-теоретические исследования не должны ограничиваться анализом качественной стороны явлений, а призваны обеспечить достаточно точные и надежные рекомендации, необходимые для проектирования оптимальных конструкций и режимов работы установок. Это вынуждает рассматривать большое число взаимосвязанных процессов, учитывать детали геометрии, достаточно точно описывать свойства изучаемых сред и т. д. Все это существенно усложняет математическую модель и затрудняет ее исследование. В таких условиях особое значение приобретает конструирование эффективных численных методов, которые позволили бы получить необходимые результаты при использовании существующей вычислительной техники. Настоящий сборник посвящен вопросам построения

математических моделей, разработке вычислительных алгоритмов и применения методов вычислительного эксперимента в задачах полупроводниковой технологии. В сборнике представлены работы сотрудников Института прикладной математики им. М. В. Келдыша АН СССР, Института «Гиредмет» Министерства цветной металлургии, Вычислительного центра Латвийского государственного университета и Института проблем механики АН СССР. В этих организациях уже продолжительное время ведутся работы в указанных областях, накоплен значительный опыт, который дает возможность говорить о новом направлении в теоретических исследованиях процессов получения полупроводников — вычислительной технологии.

В большинстве статей, представленных в сборнике, основу математической модели составляют уравнения тепловой и концентрационной конвекции в приближении Буссинеска. Применительно к реальным технологическим процессам явления конвективного тепло- и массопереноса имеют свои особенности, которые необходимо учитывать при конструировании соответствующих численных алгоритмов.

Возникающие здесь трудности связаны с большими значениями чисел Рейнольдса, Грасгофа, Прандтля, наличием фазовых переходов и сложных нелинейных граничных условий, с исследованием длительных нестационарных процессов и т. д. Все это требует от исследователей большого искусства при построении математических моделей, с тем чтобы модель, с одной стороны, была достаточно полна и могла обеспечить требуемую точность и надежность результатов, а с другой — реализуема на существующих ЭВМ. Это возможно лишь при глубоком знании как физического существа изучаемых явлений и объектов, так и соответствующих разделов современной прикладной математики.

Работы, представленные в сборнике, хорошо демонстрируют эти черты вычислительного эксперимента.

Сборник содержит следующие разделы: выращивание монокристаллов из расплава; получение монокристаллических пленок методами газо- и жидкофазовой эпитаксии; конструирование и исследование новых алгоритмов для математического моделирования перечисленных технологических процессов.

В сборнике широко представлены работы по математическому моделированию наиболее распространенного промышленного способа получения монокристаллов — метода Чохральского.

Значительное место принадлежит статьям, в которых исследуется процесс тепло- и массопереноса в расплаве. Детальный анализ полученных в расчетах тепловых и концентрационных полей проводится в целях обеспечения условий устойчивого роста монокристаллов, получения равномерного радиального распределения в них легирующих примесей; рассматриваются также вопросы управления движением расплава.

С практической точки зрения важное значение имеет изучение процессов теплообмена в системе расплав—кристалл, определение

полей напряжений и плотности дислокаций в слитке. Представленные в сборнике работы по этим вопросам — первые шаги на пути построения математической модели метода Чохральского, достаточно полно учитывающей физические процессы, существенно влияющие на рост монокристаллов и их свойства. Однако уже сейчас на основе проведенных вычислительных экспериментов удалось дать конкретные рекомендации по усовершенствованию технологического процесса.

В сборнике нашли свое отражение работы по математическому моделированию зонной плавки. В статье, посвященной этому технологическому процессу, в результате решения одномерной нестационарной задачи о кристаллизации и плавлении бинарной системы определяются распределения температуры и концентрации в жидкой и твердой фазах в зависимости от теплового режима печи и начальных условий для концентрации. Полученные здесь результаты способствуют более глубокому пониманию происходящих явлений.

Представленные в сборнике статьи по численному исследованию процессов жидко- и газофазовой эпитаксии позволяют тщательно проанализировать особенности тепло- и массопереноса в существующих установках, исследовать влияние различных параметров технологического процесса на условия роста эпитаксиальных структур, наметить пути их оптимизации.

Как было отмечено выше, задачи, возникающие при математическом моделировании большинства технологических процессов, представляют значительные трудности с точки зрения их численной реализации. Конкретные результаты в этой области стали возможны лишь благодаря созданию специальных методов их решения. Поэтому практически все статьи сборника содержат подробное описание используемых численных алгоритмов.

Кроме того, в сборник включены работы, целиком посвященные конструированию методов решения соответствующих задач математической физики. В основном здесь рассматриваются алгоритмы для численного исследования уравнений Навье—Стокса и процессов тепло- и массопереноса. Эта часть сборника представляет самостоятельный интерес и является дальнейшим развитием соответствующих разделов вычислительной математики.

Представленные здесь методы расчета нелинейных многомерных систем дифференциальных уравнений будут полезны широкому кругу специалистов по математическому моделированию в различных областях науки и техники.

I. АЛГОРИТМЫ ЧИСЛЕННЫХ РЕШЕНИЙ

УДК 519.63

ОБ ОДНОМ ЧИСЛЕННОМ МЕТОДЕ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ НАВЬЕ—СТОКСА НА НЕРЕГУЛЯРНЫХ СЕТКАХ

А. Л. Гончаров, И. В. Фрязинов

Введение

В работе построена монотонная разностная схема на нерегулярных сетках для нестационарных двумерных уравнений Навье—Стокса в приближении Буссинеска [1, с. 261] в декартовых координатах. Уравнения рассматриваются в переменных вихрь—функция тока—температура. Сеточные уравнения относительно искомых функций на верхнем временном слое являются линейными, неявными, обладают свойством диагонального преобладания и записываются на пятиточечном шаблоне.

Для решения сеточных уравнений на каждом временном слое в данной работе используются и сравниваются итерационные процессы (ICCG) [2] и локальной релаксации (LR) [3, 4]. Приводятся результаты численных экспериментов решения задачи о течении жидкости в косоугольной каверне при больших числах Рейнольдса и Грасгофа. При отсутствии векторного процессора предпочтение отдается итерационному методу локальной релаксации.

Операторы Лапласа и члены переноса аппроксимируются так же, как и в [5]. Сеточные аналоги смешанных производных, появляющиеся при аппроксимации операторов Лапласа на нерегулярных сетках и в косоугольных координатах в косоугольной каверне, сносятся на предыдущий временной слой. В сеточное уравнение для температуры вводится дополнительная монотонизующая искусственная температуропроводность. Как и в [6, 7], сеточные аналоги членов переноса в уравнении для вихря представляются в виде суммы двух слагаемых, содержащих разности от вихря, направленного по и против потока. Последние берутся с предыдущего временного слоя. После этих процедур сеточные уравнения относительно искомых функций на верхнем временном слое получают указанные выше свойства. Расчет вихря на границе осуществляется по явной аппроксимации Тома, что приводит к ограничению на временной шаг τ. Отметим, что в методе, описанном в [8], ограничение на шаг отсутствует.

Предложенный в данной работе метод решения уравнений Навье—Стокса, как нам представляется, надежен, прост и достаточно эффективен.

1. Постановка исходной задачи

Пусть G — ограниченная область в плоскости x_1x_2 с границей Γ, $\bar{G}=G\cap\Gamma$, $Q_{t_0}=G\times(0<t\leqslant t_0)$, $\Gamma_{t_0}=\Gamma\times(0<t\leqslant t_0)$. В области Q_{t_0} будем рассматривать уравнения Навье—Стокса в приближении Буссинеска:

$$\omega_t+(u_1\omega)_{x_1}+(u_2\omega)_{x_2}=\mathrm{Re}^{-1}\Delta\omega+F,\quad \Delta\psi=-\omega,$$
$$T_t+(u_1T)_{x_1}+(u_2T)_{x_2}=\mathrm{Pe}^{-1}\Delta T,\quad (x,t)\in Q_{t_0},\tag{1}$$
$$x=(x_1,x_2).$$

Здесь $F=\mathrm{Gr}\,\mathrm{Re}^{-2}(\cos(\widehat{g,x_1})T_{x_2}-\cos(\widehat{g,x_2})T_{x_1})$; g — ускорение свободного падения; $u_\alpha=(-1)^{3-\alpha}\psi_{x_{3-\alpha}}$, $\alpha=1,2$ — компоненты вектора скорости; ψ — функция тока; ω — вихрь; T — температура; Re, Pe, Gr — числа Рейнольдса, Пекле, Грасгофа. На границе области зададим температуру и вектор скорости $u_0=(u_{0,n},u_{0,s})$, где $u_{0,n}=\partial\psi/\partial S$, $u_{0,s}=-\partial\psi/\partial n$ — его нормальная и касательная компоненты, определяющие на Γ значение функции тока и ее нормальной производной $\left(\int\limits_\Gamma u_{0,n}dS=0\right)$. Итак, к уравнениям (1) добавим граничные

$$\psi=\psi_0,\quad \partial\psi/\partial n=\bar{\psi}_0,\quad T=T_0,\quad (x,t)\in\Gamma_{t_0}\tag{2}$$

и начальные условия

$$\psi=\psi^0,\quad \omega=\omega^0=-\Delta\psi^0,\quad T=T^0,\quad x\in G,\quad t=0.\tag{3}$$

2. Сетка и обозначения

Введем в области $\bar{G}$ сетку $\bar{G}_h=G_h\cup\Gamma_h$, узлы которой — вершины ломаных. Звенья этих ломаных — шаги сетки h_α и $\bar{h}_\alpha$ — соединяют соседние в направлении ξ_α (рис. 1) узлы $x_{i_\alpha,i_{3-\alpha}}$, $x_{i_\alpha+1,i_{3-\alpha}}$ и $x_{i_\alpha-1,i_{3-\alpha}}$, $x_{i_\alpha,i_{3-\alpha}}$. Положим $\bar{h}_{\alpha,i_{3-\alpha}}=h_{\alpha,N_\alpha,i_{3-\alpha}}=0$. Как обычно, $\hbar_\alpha=0{,}5(h_\alpha+\bar{h}_\alpha)$, так что $\hbar_{\alpha 0}=0{,}5h_{\alpha 0}$, $\hbar_{\alpha,N_\alpha}=0{,}5\bar{h}_{\alpha,N_\alpha}$. Индексы часто будем опускать. Всегда считаем, что $x_{i_1,i_2}=x_{i_2,i_1}$. Максимальный шаг сетки обозначим через h. Предполагается, что узлы четырехугольников и шаги сетки удовлетворяют условию $0<\theta_0\leqslant\theta\leqslant\pi-\theta_0$, $0<m_0h\leqslant h_\alpha\leqslant m_0^{-1}h$, где числа θ_0, m_0 не зависят от сеток.

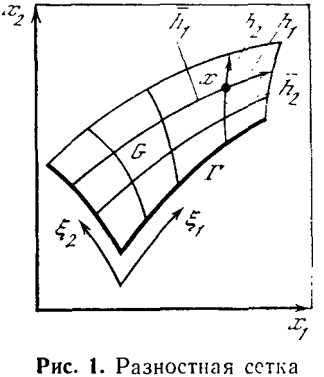


Рис. 1. Разностная сетка

Четырехугольники разобьем диагоналями на треугольники, соединяя узлы x_{i_1,i_2} и x_{i_1+1,i_2+1}. Все величины, соответствующие такому разбиению, снабдим индексом r. Если диагонали соединяют узлы x_{i_1,i_2+1} и x_{i_1+1,i_2}, то все величины снабдим индексом l (правое

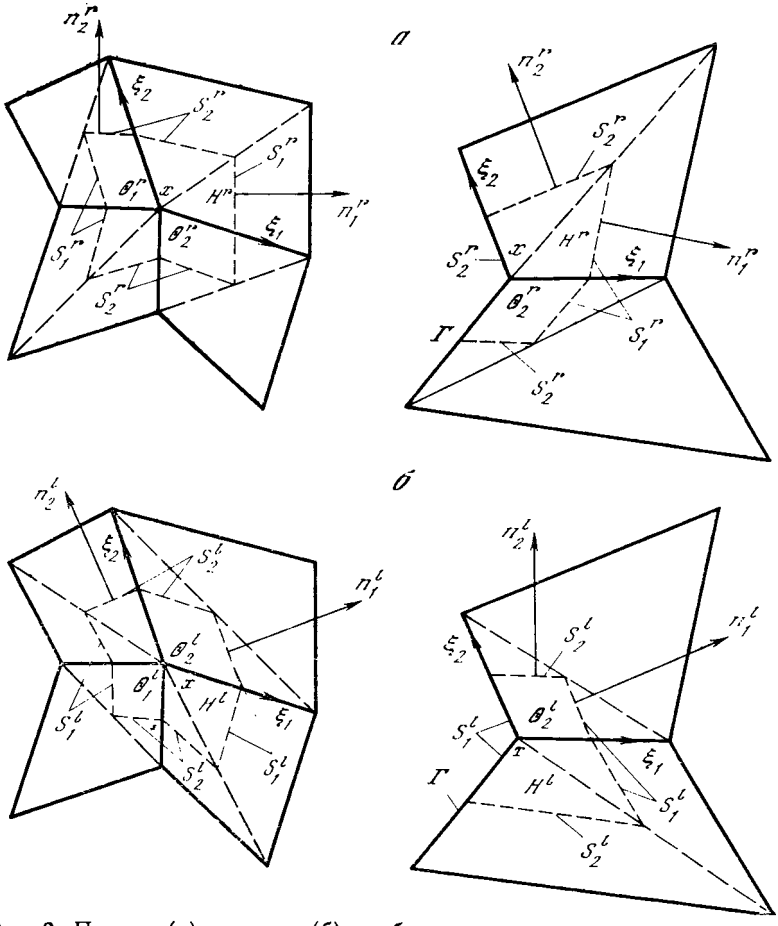


Рис. 2. Правое (*а*) и левое (*б*) разбиения

и левое разбиения, см. рис. 2, *а*, *б*). Из середины диагоналей проведем в каждом четырехугольнике средние линии. Каждому узлу $x \in \overline{G}_h$ поставим в соответствие ячейку $H(x)$ $(H=H^p(x),\ p=r,\ l)$, ограниченную средними линиями треугольников. Фигуру и ее площадь, отрезок и его длину будем обозначать одинаковыми буквами. Введем точки $x_{i_\alpha+1/2,i_{3-\alpha}}$, лежащие в серединах отрезков $h_{\alpha,i_\alpha,i_{3-\alpha}}$. Обозначим через $S_\alpha = S^p_{\alpha i_\alpha+1/2,i_{3-\alpha}}$ линию, ограничивающую $H^p(x)$, проходящую через точку $x_{i_\alpha+1/2,i_{3-\alpha}}$ и состоящую из двух отрезков длиной 0,5 $h_{3-\alpha,i_\alpha+1,i_{3-\alpha}}$, $0{,}5\,h_{3-\alpha,i_\alpha,i_{3-\alpha}}$ при $p=r$ и 0,5 $h_{3-\alpha,i_\alpha,i_{3-\alpha}}$ $0{,}5\bar{h}_{3-\alpha,i_\alpha+1,i_{3-\alpha}}$ при $p=l$. Пусть n_α — нормаль к S_α, составляющая острый угол с направлением ξ_α $(S_\alpha=S^p_\alpha,\ n_\alpha=n^p_\alpha,\ p=r,\ l)$ (см. рис. 2). Для правых и левых разбиений введем углы $\theta^p_{\alpha,i_1,i_2}$ (см. рис. 2), лежащие в треугольниках против проведенных диагоналей.

Введем, наконец, сетку по времени с шагом τ:

$$G_\tau = \{t_j = j\tau, \quad j = 0, 1, \ldots, j_0 = t_0/\tau\}.$$

Введем разности и разностные отношения. Для сеточных функций, определенных в узлах $x_{0,i_{3-\alpha}}$, $x_{N_\alpha,i_{3-\alpha}}$, $x_{i_\alpha+1/2,i_{3-\alpha}}$, положим $\hat{\Delta}^h_\alpha Q_0 = Q_{1/2} - Q_0$, $\hat{\Delta}^h_\alpha Q_{N_\alpha} = Q_{N_\alpha} - Q_{N_\alpha-1/2}$, $\hat{\Delta}^h_\alpha Q_{i_\alpha} = Q_{i_\alpha+1/2} - Q_{i_\alpha-1/2}$, $0 < i_\alpha < N_\alpha$, $\alpha = 1, 2$. Как обычно, $Q_{\hat{\xi}_\alpha} = \hat{\Delta}^h_\alpha Q/\hbar_\alpha$. Для сеточных функций, определенных в узлах $\bar{G}_h$: $\overset{0}{\Delta}{}^h_\alpha Q_k = \hat{\Delta}^h_\alpha Q_k$, $k = 0, N_\alpha$, $\overset{0}{\Delta}{}^h_\alpha Q_{i_\alpha} = Q_{i_\alpha+1} - Q_{i_\alpha-1}$, так что $Q^0_{\xi_\alpha} = \overset{0}{\Delta}{}^h_\alpha Q/2\hbar_\alpha$, $\Delta^h_\alpha Q_{i_\alpha} = Q_{i_\alpha+1} - Q_{i_\alpha}$, $\nabla^h_\alpha Q_{i_\alpha} = \Delta^h_\alpha Q_{i_\alpha-1}$, $Q_{\xi_\alpha} = \Delta^h_\alpha Q/h_\alpha$, $Q_{\bar{\xi}_\alpha} = \nabla^h_\alpha Q/\bar{h}_\alpha$. Функции Q_{ξ_α}, $Q_{\bar{\xi}_\alpha}$ будем относить к точкам $x_{i_\alpha \pm 1/2}$. Также $Q_t^{j+1} = (Q^{j+1} - Q^j)/\tau$.

Нам необходимо будет аппроксимировать производные по нормали: $\partial Q/\partial n^p_\alpha$, $p = r, l$. Эти производные можно выразить через производные в направлениях ξ_1, ξ_2 и угол между ними: $\partial Q/\partial n_\alpha = \sin^{-1}(\widehat{\xi_1, \xi_2})(\partial Q/\partial \xi_\alpha - \cos(\widehat{\xi_1, \xi_2})\partial Q/\partial \xi_{3-\alpha})$. Выразим угол $(\widehat{\xi_1, \xi_2})$ через углы θ^p_α, $p = r, l$, $\alpha = 1, 2$, производные $\partial Q/\partial \xi_\alpha$ аппроксимируем разностными отношениями. Сеточные аналоги $\partial Q/\partial n_\alpha$ определим так:

$$Q_{n^r_\alpha} = \sin^{-1}\theta^r_{3-\alpha}(Q_{\xi_\alpha} + \cos\theta^r_{3-\alpha} Q_{\bar{\xi}_{3-\alpha}}), \qquad Q_{\bar{n}^r_\alpha} = \sin^{-1}\theta^r_\alpha(Q_{\bar{\xi}_\alpha} + \cos\theta^r_\alpha Q_{\xi_{3-\alpha}}), \qquad Q_{n^l_\alpha} = \sin^{-1}\theta^l_2(Q_{\xi_\alpha} - \cos\theta^l_2 Q_{\xi_{3-\alpha}}),$$

$$Q_{\bar{n}^l_\alpha} = \sin^{-1}\theta^l_1(Q_{\bar{\xi}_\alpha} - \cos\theta^l_1 Q_{\bar{\xi}_{3-\alpha}}), \quad \alpha = 1, 2. \tag{4}$$

3. Метод баланса и аппроксимации

Проинтегрируем уравнения (1) по площадке $H(x)$. Получим

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_H Q dx = \sum_{\alpha=1}^{2} \hat{\Delta}^h_\alpha V^{(Q)}_\alpha, \quad Q = \omega, T, \quad \sum_{\alpha=1}^{2} \hat{\Delta}^h_\alpha V^{(\psi)}_\alpha = -\int_H \omega dx. \tag{5}$$

Здесь

$$dx = dx_1 dx_2, \qquad V^{(Q)}_\alpha = \int_{S_\alpha} W^{(Q)}_\alpha dS_\alpha,$$

$$W^{(Q)}_\alpha = L^{-1}_Q \partial Q/\partial n_\alpha - (-1)^{3-\alpha} Q \partial\psi/\partial S_\alpha - F^{(Q)}_\alpha, \quad Q = \omega, T,$$

$$W^{(\psi)}_\alpha = \partial\psi/\partial n_\alpha, \quad L_\omega = \mathrm{Re}, \quad L_T = \mathrm{Pe}, \quad F^{(T)}_\alpha \equiv 0,$$

$$F^{(\omega)}_\alpha = \mathrm{Gr}\,\mathrm{Re}^{-2}\,(-1)^{3-\alpha} T \cos(\widehat{g, S_\alpha}), \quad \alpha = 1, 2.$$

Аппроксимируем величины $V_\alpha{}^{(Q)}$, входящие в балансные соотношения (5). Полный сеточный поток через S^p_α определим по формулам

$$V^{(Q,r)}_{\alpha,h,i_\alpha+1/2} = 0{,}5\,((h_{3-\alpha}W'^{Q,r}_{\alpha,h})_{i_\alpha+1} + (\bar{h}_{3-\alpha}\overline{W}^{(Q,r)}_{\alpha,h})_{i_\alpha}),$$

$$V^{(Q,l)}_{\alpha,h,i_\alpha+1/2} = 0{,}5\,((h_{3-\alpha}W'^{Q,l)}_{\alpha,h})_{i_\alpha} + (\bar{h}_{3-\alpha}\overline{W}^{(Q,l)}_{\alpha,h})_{i_\alpha+1}),\quad \alpha = 1, 2. \tag{6}$$

Здесь $W'^{Q,p)}_{\alpha,h}$, $\overline{W}^{(Q,p)}_{\alpha,h}$ — сеточные аналоги потоков $W_\alpha{}^{(Q)}$ через отрезки длины $0{,}5h_{3-\alpha}$ и $0{,}5\bar{h}_{3-\alpha}$, составляющие границу S^p_α ячейки $H^p(x)$. В слагаемых $W_\alpha{}^{(Q)}$, содержащих вязкость и температуропроводность ($L_Q = \mathrm{Re}$, Pe), производные $\partial Q/\partial n_\alpha$ заменим разностями $Q_{n^p_\alpha}$, $Q_{\bar{n}^p_\alpha}$, $p = r, l$, по (4), производные $\partial\psi/\partial S_\alpha$ в членах переноса аппроксимируем разностями $\psi_{\xi_{3-\alpha}}, \psi_{\bar{\xi}_{3-\alpha}}$, а функцию Q величинами Q_α, $\bar{Q}_\alpha$:

$$\omega_\alpha = \bar{\omega}_\alpha = \omega,\quad T_{\alpha,i_\alpha} = 0{,}5\,(T_{i_\alpha+1} + T_{i_\alpha}),\quad \bar{T}_{\alpha,i_\alpha} = T_{\alpha,i_\alpha-1},\quad \alpha = 1, 2. \tag{7}$$

Функцию $F^{(\omega)}_\alpha$ ($F^{(T)}_{\alpha,h} \equiv 0$) аппроксимируем простейшим образом:

$$F'^{\omega,p)}_{\alpha,h} = \mathrm{Gr}\mathrm{Re}^{-2}C_{3-\alpha}\,(-1)^{3-\alpha}T,\quad \overline{F}'^{\omega,p)}_{\alpha,h} = \mathrm{Gr}\mathrm{Re}^{-2}\overline{C}_{3-\alpha}\,(-1)^{3-\alpha}T, \tag{8}$$

где

$$C_{\alpha,i_\alpha} = \cos\,(\widehat{g,\xi_\alpha})_{i_\alpha+1/2},\quad \overline{C}_{\alpha,i_\alpha} = \cos\,(\widehat{g,\bar{\xi}_\alpha})_{i_\alpha-1/2}.$$

Величины $W^{(Q,p)}_{\alpha,h}$, $\overline{W}^{Q,p)}_{\alpha,h}$ определим теперь так:

$$\begin{aligned}
&W^{(Q,r)}_{\alpha,h} = L_Q^{-1}Q_{\bar{n}^r_\alpha} - (-1)^{3-\alpha}\bar{Q}_\alpha\psi_{\xi_{3-\alpha}} - F^{(Q,r)}_{\alpha,h},\\
&\overline{W}'^{Q,r)}_{\alpha,h} = L_Q^{-1}Q_{n^r_\alpha} - (-1)^{3-\alpha}Q_\alpha\psi_{\bar{\xi}_{3-\alpha}} - \overline{F}^{(Q,r)}_{\alpha,h},\\
&W^{(Q,l)}_{\alpha,h} = L_Q^{-1}Q_{n^l_\alpha} - (-1)^{3-\alpha}Q_\alpha\psi_{\xi_{3-\alpha}} - F'^{(Q,l)}_{\alpha,h},\\
&\overline{W}^{(Q,l)}_{\alpha,h} = L_Q^{-1}Q_{\bar{n}^l_\alpha} - (-1)^{3-\alpha}\bar{Q}_\alpha\psi_{\bar{\xi}_{3-\alpha}} - \overline{F}'^{(Q,l)}_{\alpha,h},\\
&\alpha = 1, 2.
\end{aligned} \tag{9}$$

Также

$$W^{(\psi,r)}_{\alpha,h} = \psi_{\bar{n}^r_\alpha},\quad \overline{W}^{(\psi,r)}_{\alpha,h} = \psi_{n^r_\alpha},\quad W'^{(\psi,l)}_{\alpha,h} = \psi_{n^l_\alpha},\ \overline{W}'^{(\psi,l)}_{\alpha,h} = \psi_{\bar{n}^l_\alpha}. \tag{10}$$

В узлах Γ_h нужно задать краевое условие для функции ω. Будем рассматривать второе равенство (4) и при $x \in \Gamma_h$. В это равенство входит поток $V_\alpha{}^{(\psi)}$ через отрезок $\hbar_{3-\alpha}$ границы Γ от $-\partial\psi/\partial n = u_{0,s}$. Введем касательную к Γ компоненту $u_{0,3-\alpha}$ в направлении $\xi_{3-\alpha}$ (вместо $u_{0,s}$). Полный поток $V_\alpha{}^{(\psi)}$ через $\hbar_{3-\alpha}$ аппроксимируем так:

$$V^{(\psi,p)}_{\alpha,h} = -(-1)^{3-\alpha}u_{0,3-\alpha}\hbar_{3-\alpha},\quad p = r, l,\quad \alpha = 1, 2. \tag{11}$$

Заменим интегралы по H от $\partial Q/\partial t$ и ω величинами $Q_{\bar{t}}H$, $Q = \omega$, T,

ωH. Заменяя в (5) все величины $\left(V_\alpha^{(Q)}, \int\limits_H Q_t dx, \int\limits_H \omega dx\right)$ их сеточными аналогами, приходим к схемам, соответствующим правой и левой триангуляциям. Однако более привлекательной кажется симметричная схема, получаемая их усреднением. Введем

$$\widetilde{V}_{\alpha,h}^{(Q)} = 0{,}5\,(V_{\alpha,h}^{(Q,r)} + V_{\alpha,h}^{(Q,l)}), \quad \alpha = 1, 2, \quad \widetilde{H} = 0{,}5\,(H^l + H^r) \tag{12}$$

и рассмотрим схему

$$\begin{gathered} \widetilde{H} Q_{\bar{t}} = \sum_{\alpha=1}^{2} \hat{\Delta}_\alpha^h \widetilde{V}_{\alpha,h}^{(Q)}, \quad x \in G_h, \quad Q = \omega, T, \\ \sum_{\alpha=1}^{2} \hat{\Delta}_\alpha^h \widetilde{V}_{\alpha,h}^{(\psi)} = -\widetilde{H}\omega, \quad x \in \overline{G}_h. \end{gathered} \tag{13}$$

Здесь $\widetilde{V}_{\alpha,h}^{(Q)}$ определяются по формулам (12), $V_{\alpha,h}^{(Q,p)}$ из (12) вычисляются по (6), (11), функции $W_{\alpha,h}^{(Q,p)}$ и $\overline{W}_{\alpha,h}^{(Q,p)}$ в (6), (11) в свою очередь определяются по (7)—(10) через $Q = \omega$, T и ψ. Учитывая все эти соотношения, выпишем схему (13) в явном виде. Преобразуем ее, снося некоторые из входящих в нее функций на предыдущий временной слой. Монотонизуем схему, вводя в нее искусственную температуропроводность.

4. Разностная схема

Рассмотрим в (13) слагаемые, содержащие вязкость ($L_\omega = \mathrm{Re}$) и температуропроводность ($L_T = \mathrm{Pe}$). Запишем их в виде $L_Q^{-1}\Lambda^{(Q)}Q$, $Q = \omega$, T. Эти слагаемые согласно (9) выражаются через $L_Q^{-1}Q_{n_\alpha^p}$ и $L_Q^{-1}Q_{\bar{n}_\alpha^p}$. С другой стороны, $Q_{n_\alpha^p}$, $Q_{\bar{n}_\alpha^p}$ в соответствии с (4) содержат множители $\sin^{-1}\theta_\alpha^p$, $\operatorname{ctg}\theta_\alpha^p$, $p = r, l$, $\alpha = 1, 2$, при Q_{ξ_α}, $Q_{\bar{\xi}_\alpha}$. Разобьем выражение $\Lambda^{(Q)}Q$ на сумму двух слагаемых. Одно из них ($\Lambda_0^{(Q)}Q$) содержит при Q множители $\sin^{-1}\theta_\alpha^p$, другое ($\Lambda_{12}^{(Q)}Q$) — множители $\operatorname{ctg}\theta_\alpha^p$, $p = r, l$, $\alpha = 1, 2$. Так что

$$\Lambda^{(Q)}Q = \Lambda_0^{(Q)}Q + \Lambda_{12}^{(Q)}Q. \tag{14}$$

Выражение $\Lambda_{12}^{(Q)}Q$ исчезает на ортогональных сетках ($\operatorname{ctg}\theta = 0$, $\theta = 90°$). Оно играет роль смешанных производных, возникающих при переходе к косоугольным координатам. Схема вида $Q_{\bar{t}}^{j+1} = \Lambda_0 Q^{j+1} + \Lambda_{12} Q^j$ является абсолютно устойчивой. Далее величины $\Lambda_{12}^{(Q)}Q$ мы также будем относить на предыдущий временной слой $t = t_j$. Оператор $\Lambda_0^{(Q)}$ определен на пятиточечном шаблоне.

Введем в $\Lambda_0^{(Q)}Q$ дополнительную температуропроводность, заменяя разность Q_{ξ_α} на $(1 + \rho_\alpha^{(Q)})\,Q_{\xi_\alpha}$ при $Q = T$. Величины $\rho_\alpha^{(T)} =$

$=\rho_\alpha^{(T)}(\psi)$ определим ниже. Считаем $\rho_\alpha^{(\omega)}\equiv 0$, $\alpha=1, 2$. Также и во втором уравнении (13) для ψ оператор, действующий на ψ, $\Lambda^{(\psi)}\psi$, представим в виде (14) ($\rho_\alpha^{(\psi)}\equiv 0$, $\alpha=1, 2$). Используя (6) и (9)—(11), получим

$$\Lambda_0^{(Q)}(\psi)\,Q=\sum_{\alpha=1}^{2}\hat{\Delta}_\alpha^h\Phi_{0\alpha}^{(Q)},\quad Q=\omega,\psi,T,\quad x\in G_h, \tag{15}$$

где

$$\begin{gathered}\Phi_{0\alpha,i_\alpha+1/2}^{(Q)}=(a_\alpha(1+\rho_\alpha^{(Q)})\,Q_{\xi_\alpha})_{i_\alpha+1/2},\quad a_{\alpha,i_\alpha+1/2}=0{,}25\,((h_{3-\alpha}\sin^{-1}\theta_1^r+\\ +\bar{h}_{3-\alpha}\sin^{-1}\theta_1^l)_{i_\alpha+1}+(\bar{h}_{3-\alpha}\sin^{-1}\theta_2^r+h_{3-\alpha}\sin^{-1}\theta_2^l)_{i_\alpha}),\quad \alpha=1,2.\end{gathered} \tag{16}$$

Соответственно

$$\Lambda_{12}^{(Q)}Q=\sum_{\alpha=1}^{2}\hat{\Delta}_\alpha^h\Phi_{12\alpha}^{(Q)},\quad Q=\omega,\psi,T,\quad x\in G_h. \tag{17}$$

Здесь

$$\begin{gathered}\Phi_{1\alpha,i_\alpha+1/2}^{(Q)}=0{,}25\,((\operatorname{ctg}\theta_\alpha^r\Delta_{3-\alpha}^hQ-\operatorname{ctg}\theta_1^l\nabla_{3-\alpha}^hQ)_{i_\alpha+1}+\\ +(\operatorname{ctg}\theta_{3-\alpha}^r\nabla_{3-\alpha}^hQ-\operatorname{ctg}\theta_2^l\Delta_{3-\alpha}^hQ)_{i_\alpha}),\quad \alpha=1,2.\end{gathered} \tag{18}$$

В узлах Γ_h в уравнении для ψ (втором уравнении (13)) положим

$$\Lambda^{(\psi)}\psi=\sum_{\alpha=1}^{2}\hat{\Delta}_\alpha^h(\Phi_{0\alpha}^{(\psi)}+\Phi_{12\alpha}^{(\psi)}),\quad x\in\Gamma_h. \tag{19}$$

Здесь в соответствии с (11)

$$\Phi_{0\alpha}^{(\psi)}+\Phi_{12\alpha}^{(\psi)}=-(-1)^{3-\alpha}u_{0,3-\alpha}\bar{h}_{3-\alpha},\quad \alpha=1,2,\quad x\in\Gamma_h. \tag{20}$$

В выражении (16) $\bar{h}_{\alpha 0}=h_{\alpha,N_\alpha}=0$, $\alpha=1, 2$.

Сеточные аналоги членов переноса в (13) ($(-1)^{3-\alpha}\bar{Q}_\alpha\psi_{\xi_{3-\alpha}}$, $(-1)^{3-\alpha}Q_\alpha\psi_{\bar{\xi}_{3-\alpha}}$ и т. д.) можно преобразовать к виду

$$D_{Q,h}(Q,\psi)=D_{Q,h}^{+}(Q,\psi)+D_{Q,h}^{-}(Q,\psi),\quad Q=\omega,T. \tag{21}$$

Здесь

$$\begin{gathered}D_{\omega,h}^{\pm}(\omega,\psi)=\pm 0{,}5\sum_{\alpha=1}^{2}((u_\alpha'^{\pm}\nabla_\alpha^h\omega)_{i_\alpha+1}-(u_\alpha'^{\mp}\Delta_\alpha^h\omega)_{i_\alpha-1}),\\ u_\alpha'^{\pm}=0{,}5\,(|u_\alpha'|\pm u_\alpha'),\quad u_\alpha'=(-1)^{3-\alpha}\overset{0}{\Delta}{}_\alpha^h\psi\cdot 0{,}5,\\ D_{T,h}^{+}(T,\psi)=0,\quad D_{T,h}^{-}(T,\psi)=0{,}5\sum_{\alpha=1}^{2}((\bar{u}_\alpha'\nabla_\alpha^hT)_{i_\alpha+1}+(\bar{u}_\alpha'\nabla_\alpha^hT)_{i_\alpha}),\\ \bar{u}_{\alpha,i_\alpha}'=0{,}5\,(u_{\alpha,i_\alpha}'+u_{\alpha,i_\alpha-1}'),\quad \alpha=1,2.\end{gathered} \tag{22}$$

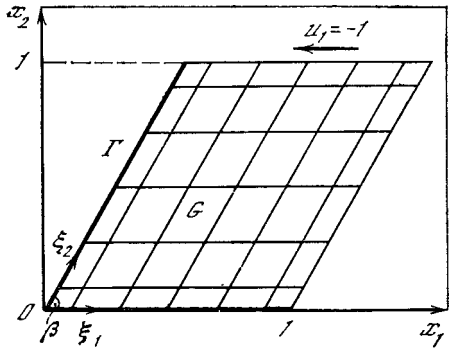


Рис. 3. Разностная сетка для случая косоугольной каверны

Слагаемые в (13), содержащие $F_{\alpha,h}^{(\omega,p)}$, $\overline{F}_{\alpha,h}^{(\omega,p)}$, $p=r,\ l,\ \alpha=1,\ 2$ (см. (8), (9)), записываются в виде

$$F_h^{(\omega)}(T)=0{,}5\mathrm{GrRe}^{-2}\sum_{\alpha=1}^{2}(-1)^{3-\alpha}\overset{0}{\Delta}{}_{\alpha}^{h}(0{,}5\,(h_{3-\alpha}C_{3-\alpha}+\bar{h}_{3-\alpha}\overline{C}_{3-\alpha})\,T). \quad (23)$$

Нам осталось определить величины $\rho_\alpha^{(T)}(\psi)$, $\alpha=1,\ 2$. Положим

$$\rho_\alpha^{(T)}=0 \text{ при } R_\alpha\leqslant 1, \qquad \rho_\alpha^{(T)}=R_\alpha^2/(1+R_\alpha) \text{ при } R_\alpha>1, \quad (24)$$
$$\alpha=1,2;$$

здесь

$$R_\alpha=0{,}5h_\alpha\mathrm{Pe}\,|\bar{u}_\alpha'|/a_\alpha, \quad \alpha=1,2. \quad (25)$$

Функция $\bar{u}_\alpha'$ зависит от ψ (см. (22)), так что теперь

$$\Lambda_0^{(Q)}Q=\Lambda_0^{(Q)}(\psi)\,Q, \quad Q=T.$$

Соберем все выражения (14)—(25). Часть функций в них в соответствии со сказанным выше отнесем на предыдущий временной слой $t=t_j$. Преобразованную так схему (13) запишем в виде

$$\begin{aligned}
&\widetilde{H}\,(T^{j+1}-T^j)/\tau+D_{T,h}^-(T^{j+1},\psi^j)=\mathrm{Pe}^{-1}(\Lambda_0^{(T)}(\psi^j)\,T^{j+1}+\Lambda_{12}^{(T)}T^j),\\
&x\in G_h, \quad T^{j+1}=T_0^{j+1}, \quad x\in\Gamma_h,\\
&\widetilde{H}\,(\omega^{j+1}-\omega^j)/\tau+D_{\omega,h}^-(\omega^{j+1},\psi^j)+D_{\omega,h}^+(\omega^j,\psi^j)=\\
&\qquad=\mathrm{Re}^{-1}(\Lambda_0^{(\omega)}\omega^{j+1}+\Lambda_{12}^{(\omega)}\omega^j)+F_h^{(\omega)}(T^{j+1}), \quad x\in G_h, \qquad (26)\\
&\omega^{j+1}=-\widetilde{H}^{-1}(\Lambda_0^{(\psi)}\psi^j+\Lambda_{12}^{(\psi)}\psi^j), \quad x\in\Gamma_h,\\
&\Lambda_0^{(\psi)}\psi^{j+1}+\Lambda_{12}^{(\psi)}\psi^j=-\omega^{j+1}\widetilde{H}, \quad x\in G_h, \quad \psi^{j+1}=\psi_0^{j+1},\\
&x\in\Gamma_h, \quad j=0,1,\ldots,j_0.
\end{aligned}$$

В момент времени $t=0$ зададим T^0, ψ^0, $\omega^0=\Lambda^{(\psi)}\psi^0$, $x\in\overline{G}_h$. Схема (26) линейна. Уравнения для T^{j+1}, ω^{j+1}, ψ^{j+1} записаны на пятиточечных шаблонах.

При решении задачи в параллелограмме с углом β на косоугольной сетке (рис. 3) имеем

$$\widetilde{H}^{-1}\Lambda^{(Q)}Q = \sin^{-2}\beta\left(\sum_{\alpha=1}^{2} Q_{\xi_\alpha \hat{\xi}_\alpha} - 2\cos\beta Q_{\substack{0\,0\\ \xi_1\xi_2}}\right),$$

$$\widetilde{H}^{-1}D_{\omega,h}(\omega,\psi) = \sin^{-1}\beta\sum_{\alpha=1}^{2}(\omega(-1)^{3-\alpha}\psi_{\substack{0\\ \xi_{3-\alpha}}})_{\substack{0\\ \xi_\alpha}}.$$

5. Свойства разностной схемы

Для определения T^{j+1}, ω^{j+1}, ψ^{j+1} нужно решить уравнение $\mathscr{L}_h^{(Q)}Q=f$, где $\mathscr{L}_h^{(Q)}Q \equiv \widetilde{H}/\tau Q^{j+1} + D_{Q,h}^{-}(Q^{j+1},\psi^j) - L_Q^{-1}\Lambda_0^{(Q)}(\psi^j)Q^{j+1}$, $Q^{j+1}=T^{j+1}$, ω^{j+1}, $\mathscr{L}_h^{(\psi)}\psi \equiv -\Lambda_0^{(\psi)}\psi^{j+1}$. Уравнение $\mathscr{L}_h^{(Q)}Q=f$ можно записать в виде

$$Q_{i_1,i_2}^{j+1} = \sum_{\alpha=1}^{2}(A_{\alpha,i_1,i_2}^{(Q)+}Q_{i_\alpha+1,i_{3-\alpha}} + A_{\alpha,i_1,i_2}^{(Q)-}Q_{i_\alpha-1,i_{3-\alpha}}) + \varphi_{i_1,i_2}^{(Q)}. \tag{27}$$

При условиях (24), (25) в уравнении (27) оказывается, что

$$\sum_{\alpha=1}^{2}(A_\alpha^{(Q)+} + A_\alpha^{(Q)-}) \leqslant 1, \quad A_\alpha^{(Q)\pm} > 0, \quad \alpha=1,2, \quad Q=T,\omega,\psi. \tag{28}$$

Эти соотношения существенны при построении итерационного процесса. Они обеспечивают монотонность схемы для ψ, ω, T на слое $t=t_{j+1}$. Схема для ω при больших шагах h_α и больших Re, как показали численные эксперименты, не дает и при выходе на стационарный режим пилообразных решений. Для схемы имеет место баланс кинетической энергии с точностью до членов $\tau Q_{\bar{t}}$, исчезающих при малом τ и при приближении к стационарному режиму. Члены $\Lambda_{12}^{(Q)}Q$, а также $D_{\omega,h}^{+}(\omega^j,\psi^j)$ не приводят к ограничению на временной шаг. Ограничение на τ накладывает лишь вычисление ω^{j+1} на Γ_h по явной схеме аппроксимации Тома. Пусть

$$h'\sin\theta' \equiv \min_{x\in G_h}\left\{\min_{\alpha=1,2}\sqrt{h_\alpha \bar{h}_\alpha}\,\min_{\alpha=1,2}\left(\min_{p=r,l}\sin\theta_\alpha^p\right)\right\}.$$

Как показали численные эксперименты, в том случае, когда узлы сетки попадают в пограничный слой, ограничение на шаг τ имеет вид

$$\tau \leqslant \tau_0 = 1{,}5(h'\sin\theta')^2\mathrm{Re}. \tag{29}$$

Если же сетка достаточно груба, то верхняя граница τ может увеличиваться до $2\tau_0$. При приближении τ к τ_0 ($2\tau_0$) выход на стационарное решение замедляется. Приемлемым шагом для расчета задачи, при котором полная работа не сильно отличается от опти-

мальной, является

$$\tau=\bar{\tau}=0{,}75(h'\sin\theta')^2\mathrm{Re}. \tag{30}$$

Для уменьшения $\rho_\alpha^{(T)}$ сетку у границы области следует сделать более мелкой.

6. Итерационный метод

Для решения уравнений (26) (или, что то же, (27)) на пятиточечных шаблонах на каждом временном слое t_j, $j=0, 1, \ldots, j_0$, использовались два метода: ICCG [2] и метод локальной релаксации LR [3, 4]. Условия (28) улучшают сходимость метода ICCG для несамосопряженных операторов, для метода локальной релаксации они приводят к существенному упрощению вычисления итерационных параметров релаксации. Как показали численные эксперименты, метод ICCG требовал несколько большего (иногда в 2 раза) времени счета, чем метод LR (при отсутствии векторного процессора), хотя число итераций на временном слое было в 3—5 раз меньше. В то же время метод ICCG требует существенно большей машинной памяти.

Запишем метод локальной релаксации для уравнения (23):

$$\overset{(s+1)}{Q}_{i_1,i_2}=\overset{(s)}{Q}_{i_1,i_2}+\alpha^{(Q)}_{i_1,i_2}(A^{(Q)+}_{1,i_1,i_2}\overset{(s)}{Q}_{i_1+1,i_2}+A^{(Q)-}_{1,i_1,i_2}\overset{(s+1)}{Q}_{i_1-1,i_2}+A^{(Q)+}_{2,i_1,i_2}\overset{(s)}{Q}_{i_1,i_2+1}+$$
$$+A^{(Q)-}_{2,i_1,i_2}\overset{(s+1)}{Q}_{i_1,i_2-1}-\overset{(s)}{Q}_{i_1,i_2}+\varphi^{(Q)}_{i_1,i_2}), \tag{31}$$
$$i_2=1,2,\ldots,N_2-1,\quad i_1=1,2,\ldots,N_1-1,$$
$$Q=T^{j+1},\omega^{j+1},\psi^{j+1}.$$

Здесь $\overset{(s)}{Q}_{i_1,i_2}$ —s-я итерация функции Q^{j+1}. Итерационный параметр $\alpha^{(Q)}_{i_1,i_2}$ в случае первой краевой задачи (другие случаи см. в [3]) вычисляется по формулам

$$\mu^{(Q)}_{i_1,i_2}=2\sum_{\alpha=1}^{2}(A^{(Q)+}_{\alpha,i_1,i_2}A^{(Q)-}_{\alpha,i_1,i_2})^{1/2}\cos\pi/N_\alpha,\quad \alpha^{(Q)}_{i_1,i_2}=2/[1+(1-(\mu^{(Q)}_{i_1,i_2})^2)^{1/2}]. \tag{32}$$

Столь простые формулы (32) связаны с условиями (28). При этом $\mu^{(Q)}_{i_1,i_2}<1$, и итерационный процесс сходится. В формуле для $\alpha^{(Q)}_{i_1,i_2}$ корень можно разложить в ряд по степеням $(\mu^{(Q)}_{i_1,i_2})^2$ и положить

$$\alpha^{(Q)}_{i_1,i_2}=1/[1-\zeta(1+\zeta)],\qquad \zeta=(0{,}5\mu^{(Q)}_{i_1,i_2})^2.$$

В этом случае при вычислении итерационного параметра в каждой точке сетки необходимо вычислять лишь один квадратный корень из $\prod_\alpha A^{(Q)+}_\alpha A^{(Q)-}_\alpha$. Коэффициенты $\alpha^{(\psi)}_{i_1,i_2}$ вычисляются один раз. Нет необходимости вычислять $\alpha^{(Q)}_{i_1,i_2}$, $Q=T$, ω, на каждом временном слое. На итерации по методу локальной релаксации вычислялась невязка $r^{(Q)}_{i_1,i_2}$. Выход из итерационного процесса на временном слое осу-

ществлялся при $|r^{(Q)}_{i_1,i_2}\widetilde{H}|\leqslant\varepsilon$, $Q=T$, ω, ψ. При $|(Q^{j+1}-Q^j)/\tau|\leqslant\varepsilon_k$, $Q=\omega$, T, счет оканчивался.

Предлагаемый здесь метод построения схемы и итерационной процедуры допускает обобщение на случай уравнений Навье—Стокса в криволинейных ортогональных координатах (r, φ), (z, r), (r, θ). При этом слагаемые, содержащие вязкость в уравнениях для ω и M (момента количества движения), должны быть записаны в соответствующем дивергентном виде.

Уравнение для функции ψ можно также эффективно решать попеременно-треугольным методом [9, с. 540].

7. Численные эксперименты

Численно решались две задачи. В первой из них рассчитывалось течение жидкости в косоугольной каверне (см. рис. 3) со стороной и высотой, равными единице, с углами $\beta=60$, 90, 120°. Верхняя стенка каверны — крышка — двигалась со скоростью $u_1=-1$. Задача рассчитывалась для различных чисел Рейнольдса $\mathrm{Re}=10^3\div10^7$.

При решении задачи было проведено сравнение методов ICCG и LR. На равномерной сетке с $N_1=N_2=20$ для $\mathrm{Re}=10^3$ при $\tau=3$, $\varepsilon=10^{-6}$ просчитывались 200 временных слоев ($j_0=200$) при $\beta=60$, 90, 120° методами ICCG и LR. Соответствующие процессорные времена (ПВ) на ЭВМ ЕС-1045 составляли 113, 113, 174 с для ICCG и 111, 101, 115 с для LR. На рис. 4, *а*, *б* приведены линии уровня функции тока с $\psi=0$ для каверны с $\beta=60$ и 120° при $\mathrm{Re}=10^3$ ($h_1=1/60$, $h_2=1/30\sqrt{3}$, $\tau=0{,}3$, $\varepsilon=10^{-6}$). Время (ПВ) выхода на стационарный режим по методу ICCG составило 25 мин ($\beta=60°$) и 38 мин ($\beta=120°$) и по методу LR соответственно 23 и 30 мин. Сравнение проводилось и при $\mathrm{Re}\leqslant5\cdot10^4$, $N_1=N_2=60$ на неравномерных сетках с шагом, изменяющимся от 1/500 вблизи границы до 1/20 внутри области. Счет такого варианта при $\mathrm{Re}=10^4$ для $\beta=60$, 90° при $\tau=0{,}04$, $\varepsilon=10^{-7}$ (во всех остальных случаях было выбрано $\varepsilon=10^{-6}$) занимал около 2 ч. На рис. 4, *в* приведены изолинии $\psi=0$ для каверны с $\beta=60°$ при $\mathrm{Re}=10^4$. Во всех случаях метод LR был несколько экономичнее ICCG.

Проводилось сравнение расчетов по данному методу с расчетами из [10] ($h_1=h_2=1/256$, $\mathrm{Re}=10^3$ и 10^4, $\beta=90°$). На рис. 5 приведены кривые $\omega(1, x_1)$, рассчитанные в [10] и по данному методу ($\beta=90°$, $N_1=N_2=60$, $h_\alpha=1/250\div1/20$). Как видно из рис. 5, совпадает число вихрей и их границы ($\psi=0$). Достаточно хорошо совпадают также значения $\max\psi$, $\min\psi$ и координаты соответствующих точек для большинства вихрей. Так, при $\mathrm{Re}=10^3$ для основного вихря $\psi_{\max}(0{,}4667,\ 0{,}5667)=0{,}1135$ и $\psi_{\max}(0{,}4669,\ 0{,}5626)=0{,}1179$. Несколько хуже совпадение при $\mathrm{Re}=10^4$. Для основного вихря $\psi_{\max}(0{,}450,\ 0{,}500)=0{,}0995$, $\psi_{\max}(0{,}488,\ 0{,}533)=0{,}1180$. Погрешность координат $\psi_{\max}$ не превышает шага сетки. Для вихря вблизи движущейся крышки $\psi_{\min}(0{,}929,\ 0{,}914)=-2{,}42\cdot10^{-3}$, $\psi_{\min}(0{,}916,\ 0{,}904)=-2{,}36\cdot10^{-3}$.

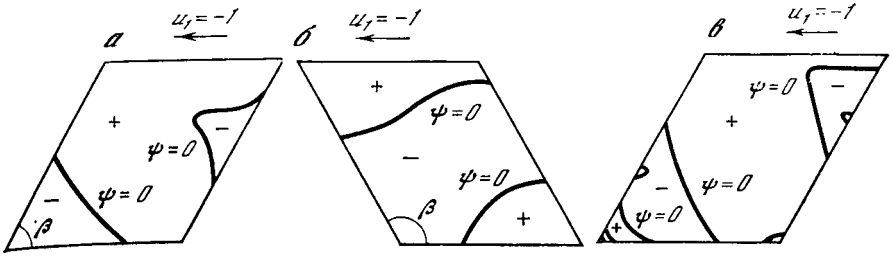
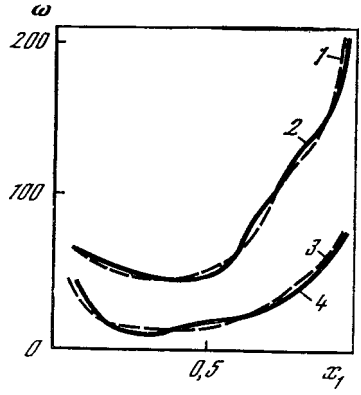
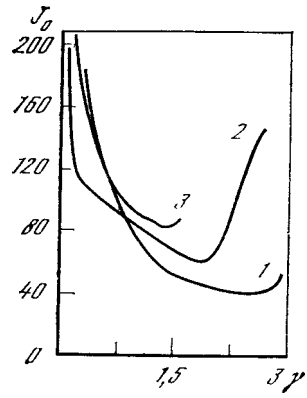


Рис. 4. Линии уровня функции тока $\psi=0$ для $\mathrm{Re}=10^3$ (*а*, *б*) и $\mathrm{Re}=10^4$ (*в*)
а — $\beta=60°$; *б* — 120°; *в* — 60°

Особое внимание было обращено на выбор временного шага, обеспечивающего быстрый выход на стационарный режим. На рис. 6 приведены числа временных слоев $J_0(\gamma)$, при которых достигался стационарный режим, $\gamma=\tau/(h^2_{\min}\mathrm{Re}\sin^2\beta)$, на рис. 7 — полное число итерации $N_0(\gamma)$, которое потребовалось для вычисления ψ и ω с $\varepsilon=10^{-6}$ за $J_0(\gamma)$ временных слоев. Рассматривался случай, когда $N_1=N_2=N$, так что $\gamma=N^2\tau/(\mathrm{Re}\sin^2\beta)$. Для $\mathrm{Re}=10^3$ при $\beta=60$ и 90°, $N=20$, когда в пограничный слой не попадают узлы сетки, стационарный режим можно было получить при $\gamma<2\gamma_0$, где $\gamma_0=1{,}5$, или при $\tau\leqslant 2\tau_0$ ($\tau_0=1{,}5(h'\sin\theta')^2\mathrm{Re}$ (см. разд. 5, выражения (29), (30)). Вообще, при $N=20$ счет можно было вести практически при любом Re ($\mathrm{Re}\leqslant 10^7$, $\tau\leqslant 200$). В случае же сетки с $N=40$ при $\beta=90°$, $\mathrm{Re}=10^3$, когда в пограничный слой попадают 1-2 узла сетки, счет можно было вести при $\gamma<\gamma_0$ ($\tau<\tau_0$). Из сравнения кривых с $N=20$ и $N=40$ (см. рис. 6, 7) видно, что $J_0(\gamma_{\text{опт}})\sim N$. При оптимальном γ и τ отличие $N_0(\gamma_{\text{опт}})$ и $N_0(\bar\gamma)$, $\bar\gamma=0{,}75$, незначительно. Поэтому рекомендуется вести счет с $\gamma=0{,}75$ или $\tau=\bar\tau=0{,}75(h'\sin\theta')^2\mathrm{Re}$. При решении задачи не обнаружилось существенного различия во времени и характере счета при $\beta=60$, 120° и при $\beta=90°$. Поэтому вторая задача решалась лишь в квадратной каверне с неподвижными стенками ($\psi=\partial\psi/\partial n=0$, $x\in\Gamma$) при $\mathrm{Re}=1$ и $\mathrm{Gr}=10^3$, 10^4, 10^6 (задача о тепловой конвекции). На границе квадрата задавалась температура $T=x_1$, $0\leqslant x_1\leqslant 1$, $x\in\Gamma$. Расчеты при $\mathrm{Gr}=10^3\div 10^5$, $N=20$ не приводили к каким-либо осложнениям. При $\mathrm{Gr}=4\cdot 10^6$ не существовало стационарного решения. Переход к нестационарным решениям происходил при $\mathrm{Gr}\approx 10^6$ ($\mathrm{Pr}=1$). Если положить $T(x,\ 0)=4x(1-x)$, $0\leqslant x\leqslant 1$, и $T=0$ на остальной части границы квадрата, то нестационарный режим наблюдался при $\mathrm{Gr}\approx 5\cdot 10^8$ ($h=1/20$).

Наряду со схемой первого порядка аппроксимации ($R_\alpha\gg 1$ в условии (24)) рассматривалась схема второго порядка. Члены переноса в уравнении для энергии аппроксимировались, как и в уравнении для ω. Аналогично строился итерационный процесс вычисления T^{j+1}. При больших Gr ($\mathrm{Re}=\mathrm{Pe}=1$) для этой схемы не наблюдалось «пилообразных» решений. При разрешении сеткой по-





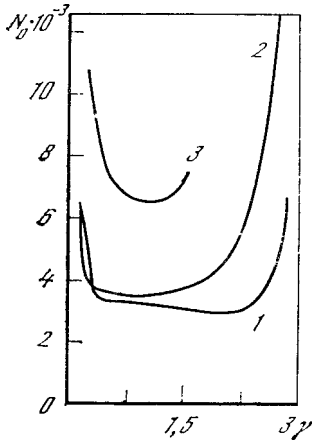


Рис. 5. Функция ω (1, x_1) на верхней стенке каверны для различных чисел Re по результатам [10] (кривые *1*, *3*) и настоящей работы (кривые *2*, *4*)

1, *2* — Re=10^4; *3*, *4* — Re=10^3

Рис. 6. Зависимость числа временных слоев J_0 от параметра γ

1 — N=10, β=90°; *2*—20, 60°; *3*—40, 90°

Рис. 7. Число итераций $N_0(\gamma)$ для ω и ψ при $\varepsilon=10^{-6}$

Обозначения те же, что на рис. 6

граничного слоя выход на стационарное решение (Gr=10^5) имел монотонный характер. Минимальное время выхода на это решение было при $\gamma=\tau/(h' \sin\theta')^2 \approx 1{,}5$ (Re=1).

ЛИТЕРАТУРА

1. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Механика сплошных сред. М.: Гостехтеориздат, 1954. 795 с.
2. *Kersaw D. S.* The incomplete Cholesky-conjugate gradient method for the iterative solution of system of linear equations.— J. Comput. Phys., 1978, vol. 26, p. 43—65.
3. *Erlich L. W.* An Ad Hoc SOR method.— J. Comput. Phys., 1981, vol. 44., p. 31—45.
4. *Botta E. F. F., Veldman A. E. P.* On local relaxation methods and their application to convection-diffusion equations.— J. Comput. Phys., 1982, vol. 48, p. 127—149.
5. *Фрязинов И. В.* Сеточные аппроксимации уравнений Навье — Стокса в переменных вихрь — функция тока — момент вращения на нерегулярных сетках: Препр. ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР № 12. М., 1983. 25 с.
6. *Khosla P. K., Rubin S. G.* A diagonaly dominant second-order accurate implicit scheme.— J. Comput. Fluids, 1974, vol. 2, p. 207—209.

7. *Rubin S. G., Khosla P. K.* Navier — Stokes calculations a coupled strongly implicit method.— J. Comput. Fluids, 1981, vol. 9, p. 163—180.
8. *Люмкинс Е. Д.* Об увеличении шага по времени при интегрировании уравнений Навье — Стокса в переменных вихрь — функция тока.— Дифференц. уравнения, 1985, № 7, с. 1208—1217.
9. *Самарский А. А.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1983. 616 с.
10. *Ghia U., Ghia K. N., Shin C. T.* High-Re solutions for incompressible flow using the Navier — Stokes equations and multigrid method.— J. Comput. Phys., 1982, vol. 48, p. 387—411.

УДК 519.6 : 517

МАТРИЧНЫЙ АЛГОРИТМ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ЗАДАЧ КОНЦЕНТРАЦИОННОЙ КОНВЕКЦИИ ДЛЯ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СРЕД

О. С. Мажорова, Ю. П. Попов, В. И. Похилко

Введение

Численный алгоритм, изложенный в данной статье, разработан применительно к проблеме математического моделирования процесса выращивания тройных полупроводниковых соединений методом жидкофазовой эпитаксии, который в настоящее время является одним из основных способов получения гетерогенных полупроводниковых структур.

Существующие экспериментальные данные свидетельствуют о том, что в этом методе при некоторых технологических режимах существенное влияние на характер роста эпитаксиальных слоев оказывает процесс конвективного массопереноса в расплаве [1—5]. Поэтому его детальное изучение является необходимым этапом поиска оптимальных технологических режимов, обеспечивающих получение полупроводниковых соединений с заданными свойствами.

Математическое моделирование процесса конвективного массопереноса, для численного исследования которого и предназначен описанный здесь алгоритм, проводится на основе двумерных уравнений концентрационной конвекции в приближении Буссинеска [6]. В безразмерной форме для случая двух растворенных компонентов в переменных функция тока—вихрь их можно записать в виде

$$\frac{\partial\omega}{\partial t}+\frac{\partial\omega}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial y}-\frac{\partial\omega}{\partial y}\frac{\partial\psi}{\partial x}=\frac{\partial^2\omega}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\omega}{\partial y^2}+\sum_{i=1}^{2}\mathrm{Gr}_i\frac{\partial C_i}{\partial x},$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}=-\omega, \tag{1}$$

$$u=\frac{\partial\psi}{\partial y},\quad v=-\frac{\partial\psi}{\partial x},\quad \frac{\partial v}{\partial x}-\frac{\partial u}{\partial y}=\omega,$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial t}+\frac{\partial C_i}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial y}-\frac{\partial C_i}{\partial y}\frac{\partial\psi}{\partial x}=\frac{1}{\mathrm{Pr}_i}\left(\frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 C_i}{\partial y^2}\right). \tag{2}$$

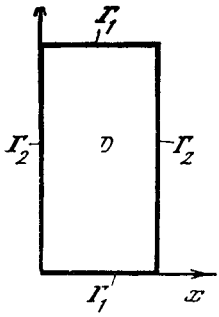


Рис. 1. Расчетная область

Здесь x, y — декартовы координаты; t — время, $t \leqslant \bar{t}$, $\bar{t}$ — полное время процесса, определяемое параметрами технологического процесса; ψ — функция тока; ω — вихрь; u, v — компоненты вектора скорости; C_i — концентрации растворенных в расплаве компонентов.

В системе уравнений (1), (2) имеются четыре безразмерных параметра — концентрационные числа Грасгофа Gr_i и Прандтля Pr_i

$$\mathrm{Gr}_i = g\beta_i L^3 \bar{C}_i / \nu^2, \qquad \mathrm{Pr}_i = \nu / D_i, \qquad i = 1,\ 2, \tag{3}$$

где g — ускорение свободного падения; β_i — коэффициент концентрационного расширения $\left(\beta_i = -\dfrac{1}{\rho}\dfrac{\partial \rho}{\partial C_i}\right)$; ν и D_i — коэффициенты кинематической вязкости и диффузии; L — характерный размер.

Система уравнений (1), (2) решается в области $D = [0,\ l_1] \times [0,\ l_2]$, что соответствует условиям реального технологического процесса. На границе области $\Gamma = \{\Gamma_1 \cup \Gamma_2\}$ (рис. 1) обращаются в нуль обе компоненты вектора скорости, т. е. для функции тока ψ выполняются условия

$$\psi|_\Gamma = \partial\psi/\partial n|_\Gamma = 0 \tag{4}$$

(n — направление нормали к границе Γ).

Граничные условия для концентраций запишем в виде

$$\partial C_i/\partial n|_{\Gamma_1} = 0, \qquad C_1|_{\Gamma_2} = f(t, C_2), \qquad g(t, C_i, \partial C_i/\partial n)|_{\Gamma_2} = 0, \tag{5}$$

где f, g — некоторые функции концентраций C_i ($i = 1,\ 2$) и их производных и времени t.

В задачах, связанных с математическим моделированием технологического процесса получения полупроводниковых структур методом жидкофазовой эпитаксии, имеем

$$C_1 = k(T)\,x_0(T)/(k(T) + C_2),$$

$$D_1 z(T, C_2)\,\frac{\partial C_1}{\partial n} = D_2 \frac{\partial C_2}{\partial n}, \qquad T = T_0 - \gamma t. \tag{6}$$

Здесь T_0, γ — числа; k, x_0, z — заданные функции, конкретные значения которых зависят от веществ, участвующих в процессе роста эпитаксиального слоя.

Граничные условия (6) приведены лишь в качестве примера, иллюстрирующего характер нелинейности в (5), поэтому мы не будем останавливаться на их физическом содержании, которое связано с процессами, происходящими на границе раздела расплав—подложка.

В начальный момент времени

$$C_i(x,\ y,\ 0) = \bar{C}_i \tag{7}$$

и движение в расплаве отсутствует

$$\psi(x,\ y,\ 0)=0, \qquad \omega(x,\ y,\ 0)=0. \tag{8}$$

Характерные особенности сформулированной задачи, которые необходимо учитывать при выборе численного метода ее решения, состоят в следующем.

При сравнительно небольших значениях числа Рэлея ($\mathrm{Ra}_i \approx \approx 10^4 \div 10^6$) диффузионные числа Прандтля принимают значения 10^2—10^3. Это означает, что в задаче фактически существуют два масштаба времени: один — связанный с диффузионными процессами ($t_{Di}=L^2/D_i$), второй — с конвективными ($t_к=L^2/\nu$, $t_{Di}/t_к=\mathrm{Pr}_i$).

Задача (1)—(8) нестационарная, и ее решение нужно определить на достаточном промежутке времени $\bar{t}$. Для некоторых технологических режимов $\bar{t} \approx 2\cdot 10^3\, t_к$. Поэтому использование в данном случае традиционных разностных алгоритмов [7—9], основанных на стандартном применении метода переменных направлений и обладающих довольно жесткими ограничениями на величину шага по времени $\tau \leqslant \tau_0 \sim \min(h_x^2,\ h_y^2)$, где $h_x,\ h_y \sim 10^{-2}L$ — шаги разностной сетки по пространству, привело бы к слишком большим затратам машинного времени.

В случае многокомпонентных систем граничные условия для концентрации носят нелинейный характер.

В настоящее время большое число работ посвящено построению и исследованию алгоритмов, допускающих проведение расчетов на грубых временных сетках (см., например, [10, 11, 8]). Один из возможных подходов к решению этой проблемы применительно к задачам концентрационной конвекции изложен в данной статье. Центральное место здесь принадлежит выбору алгоритма решения уравнений Навье—Стокса.

1. Модельная задача

Не усложняя изложение громоздкими выкладками, проанализируем основные этапы построения численного алгоритма на сравнительно простой одномерной модели:

$$\frac{\partial\omega}{\partial t}+\psi\frac{\partial\omega}{\partial x}=\frac{\partial^2\omega}{\partial x^2}+Q(x,t), \quad \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=-\omega, \tag{9}$$

$$\psi(0,t)=\frac{\partial\psi}{\partial x}(0,t)=0, \quad \psi(1,t)=\frac{\partial\psi}{\partial x}(1,t)=0, \tag{10}$$

$$\psi(x,\ 0)=\omega(x,\ 0)=0. \tag{11}$$

Задачу (9)—(11) можно рассматривать как одномерный аналог уравнений Навье—Стокса, причем граничные условия (10) моделируют условия прилипания и непротекания в двумерном случае.

Используя стандартные обозначения [12], запишем разностную аппроксимацию уравнений (9)

$$\omega_t+\psi^{(\sigma_2)}\omega_{\overset{\sigma_1}{\underset{x}{0}}}=\omega_{\overset{\sigma_1}{\bar{x}x}}+Q, \tag{12}$$

$$\hat{\psi}_{\bar{x}x}=-\hat{\omega}. \tag{13}$$

граничные условия (10) заменим условиями Вудса [13]

$$\psi_0=\psi_M=0,$$

$$\omega_0^{(\sigma_1)}+\omega_1^{(\sigma_1)}/2=3\,(\psi_0^{(\sigma_2)}-\psi_1^{(\sigma_2)})/h^2, \tag{14}$$

$$\omega_M^{(\sigma_1)}+\omega_{M-1}^{(\sigma_1)}/2=3\,(\psi_M^{(\sigma_2)}-\psi_{M-1}^{(\sigma_2)})/h^2. \tag{15}$$

Можно рассматривать и другие формы записи граничных условий [13]. Это повлияет на некоторые выкладки, но не изменит общего хода рассуждений.

Параметры σ_i, $i=1, 2$, в формулах (12), (13) определяют семейство разностных схем, аппроксимирующих дифференциальную задачу (9)—(11). Рассмотрим некоторые схемы из этого семейства.

Пусть $\sigma_1=1$, $\sigma_2=0$. Этим значениям параметров соответствует линейная разностная схема, в которой функция ψ в уравнении (12) берется с предыдущего временного слоя. Найти решение соответствующей системы алгебраических уравнений несложно. Из уравнения (12) с граничными условиями (15) методом прогонки найдем ω, подставим эти значения в (13) и вычислим ψ.

Описанная схема решения системы (12)—(15) аналогична обычно используемым методам решения двумерных уравнений Навье—Стокса, когда для нахождения значений вихря на верхнем слое используется, например, продольно-поперечный метод, а функция тока в уравнении и граничных условиях берется с предыдущего временного слоя. Метод не содержит итераций по нелинейности, решить соответствующие разностные уравнения относительно просто. Однако опыт расчетов показывает, что ограничения на шаг по времени, которые возникают в этих случаях, как правило, являются довольно жесткими: $\tau\leqslant\tau_{\max}\sim h^2$ [14].

По-видимому, основной причиной, ограничивающей величину максимально допустимого шага по времени $\tau_{\max}$, является использование в граничных условиях (15) значений функции ψ с нижнего временного слоя [10, 14].

Графики, иллюстрирующие поведение решения системы (12)—(15) при $\tau>\tau_{\max}\sim h^2$, приведены на рис. 2. Здесь изображены функции $\Delta_l(m)=\omega_l^{m+1}-\omega_l^m$, $l=0, 1, 2$, где m — номер шага по времени, $l=0$ соответствует границе области, $l=1$ — точке $x=0{,}3$ и $l=2$— середине отрезка $x=0{,}5$. Графики построены на основе расчетов методом установления с нулевого фона ($\psi(x, 0)=\omega(x, 0)=0$) стационарного решения $\psi(x)=x^2(1-x)^2$, $\omega(x)=2(2x(1-x)-(1-2x)^2)$, которым обладает задача (12) — (15) с $Q(x)=24+12x^2(1-x)^2\times\times(1-2x)$. Шаг разностной сетки по пространству $h=0{,}1$, шаг по времени $\tau=1{,}2\cdot10^{-2}$.

Рассмотрим теперь чисто неявную разностную схему (12)—(15) с $\sigma_1=\sigma_2=1$. Она обладает большим по сравнению со случаем $\sigma_1=1$, $\sigma_2=0$ запасом устойчивости, однако в силу нелинейности соответствующей системы разностных уравнений для ее решения необходимо использовать тот или иной итерационный процесс. Величина шага $\tau_{\max}$ при этом выбирается из условия сходимости итераций.

Например, систему уравнений (12)—(15) можно решать с помощью простейшего итерационного алгоритма, когда в качестве начального приближения для функции ψ в уравнении (12) и в граничных условиях (15) выбирается ее значение на предыдущем временном слое, а последовательность операций на каждой следующей итерации совпадает с алгоритмом решения линейной схемы. Ясно, что такой способ организации итераций приводит к алгоритму, близкому к тому, который был описан выше, с аналогичными ограничениями на величину шага по времени [14, 15].

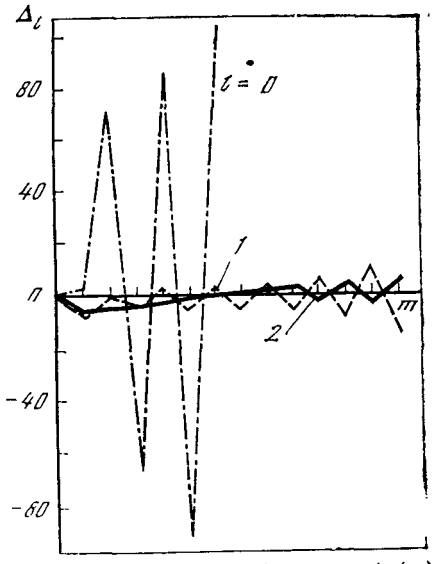


Рис. 2. График функции $\Delta_l(m)$ при $l=0, 1, 2$

При решении разностных уравнений газовой динамики весьма эффективным оказался метод Ньютона [16]. Его можно использовать и в данном случае. В результате на каждой итерации, по Ньютону, возникает система линейных алгебраических уравнений

$$a_i^{(s)}\delta\,\omega_{i-1}^{(s+1)} - b_i^{(s)}\delta\,\omega_i^{(s+1)} + c_i^{(s)}\delta\,\omega_{i+1}^{(s+1)} + d_i^{(s)}\delta\,\psi_i^{(s+1)} = f_i^{(s)}, \tag{16}$$

$$l_i^{(s)}\delta\,\psi_{i-1}^{(s+1)} - m_i^{(s)}\delta\,\psi_i^{(s+1)} + n_i^{(s)}\delta\,\psi_{i+1}^{(s+1)} + p_i^{(s)}\delta\,\omega_i^{(s+1)} = g_i^{(s)}, \tag{17}$$

$$i = 1, \ldots, M-1,$$

$$\delta\,\psi_0^{(s+1)} = \delta\,\psi_M^{(s+1)} = 0,$$

$$b_0^{(s)}\delta\,\omega_0^{(s+1)} + c_0^{(s)}\delta\,\omega_1^{(s+1)} + d_0^{(s)}\delta\,\psi_0^{(s+1)} + l_0^{(s)}\delta\,\psi_1^{(s+1)} = 0,$$

$$a_M^{(s)}\delta\,\omega_{M-1}^{(s+1)} + b_M^{(s)}\delta\,\omega_M^{(s+1)} + d_M^{(s)}\delta\,\psi_M^{(s+1)} + l_M^{(s)}\delta\,\psi_{M-1}^{(s+1)} = 0,$$

где s — номер итерации, по Ньютону; $\delta\,\omega^{(s+1)} = \omega^{(s+1)} - \omega^{(s)}$; $\delta\,\psi^{(s+1)} = \psi^{(s+1)} - \psi^{(s)}$; все коэффициенты и правые части вычисляются по значениям функций с s-й итерации [15, 16].

Таким образом, на каждой итерации, по Ньютону, необходимо решать систему уравнений (16), (17). От метода ее решения в значительной степени зависит эффективность всего алгоритма.

Модельные расчеты показывают, что в данном случае методы типа Зейделя, основанные на последовательном решении уравнений для $\delta\omega$ и $\delta\psi$, сходятся лишь при достаточно малом значении $\tau \sim h^2$ [15].

Рассмотрим другой способ решения системы (16). Пусть $\overset{(s+1)}{X_i} = (\delta\,\overset{(s+1)}{\omega_i}, \delta\,\overset{(s+1)}{\psi_i})$. Тогда равенства (16) можно переписать в виде

$$-\mathcal{D}_0 \overset{(s+1)}{X_0} + \mathcal{B}_0 \overset{(s+1)}{X_1} = 0,$$

$$\mathcal{A}_i \overset{(s+1)}{X_{i-1}} - \mathcal{D}_i \overset{(s+1)}{X_i} + \mathcal{B}_i \overset{(s+1)}{X_{i+1}} + \mathcal{F}_i = 0,$$

$$\mathcal{A}_M \overset{(s+1)}{X_{M-1}} - \mathcal{D}_M \overset{(s+1)}{X_M} = 0, \quad i = 1, \ldots, M-1,$$

где $\mathcal{A}_i$, $\mathcal{B}_i$, $\mathcal{D}_i$ — матрицы второго порядка, которые легко выписать, зная коэффициенты уравнений (16). Теперь, чтобы найти $\overset{(s+1)}{X_i}$ воспользуемся методом матричной прогонки. При таком способе решения уравнений (16) в нестационарных задачах удается на несколько порядков ослабить ограничения на величину временного шага τ_{max}. При расчетах же стационарных задач методом установления применение матричной прогонки позволяет использовать практически сколь угодно крупный шаг, например за один шаг находить стационарное решение.

Таким образом, расчеты, проведенные для одномерной модельной задачи, показали, что само по себе использование неявной (σ_1, $\sigma_2 > 0$) схемы и метода Ньютона в случае плохой сходимости «внутренних» итераций при решении соответствующей системы линейных уравнений не дает возможности заметно ослабить ограничения на временной шаг. При этом объем вычислений на каждом шаге возрастает, что даже приводит к увеличению затрат машинного времени по сравнению с линейной схемой.

С другой стороны, использование неявных схем и применение для их решения итерационного метода Ньютона в сочетании с матричной прогонкой позволяет значительно повысить эффективность алгоритма численного решения системы уравнений (16).

2. Матричный алгоритм численного решения двумерных уравнений Навье—Стокса

Разностную схему для двумерных уравнений Навье—Стокса запишем в виде

$$\omega_t + \mathcal{D}(\omega^{(\sigma_1)}, \psi^{(\sigma_2)}) = \omega^{(\sigma_1)}_{\bar{x}x} + \omega^{(\sigma_1)}_{\bar{y}y} + Q,$$
$$\psi_{\bar{x}x} + \psi_{\bar{y}y} = -\omega, \tag{18}$$

$$\mathcal{D}(\omega^{(\sigma_1)}, \psi^{(\sigma_2)}) = \frac{1}{2}[\omega^{(\sigma_1)}_{x}\psi^{(\sigma_2)}_{\underset{y}{0}}(+1_1) + \omega^{(\sigma_1)}_{\bar{x}}\psi^{(\sigma_2)}_{\underset{y}{0}}(-1_1) -$$
$$- \omega^{(\sigma_1)}_{\bar{y}}\psi^{(\sigma_2)}_{\underset{x}{0}}(+1_2) - \omega^{(\sigma_1)}_{\bar{y}}\psi^{(\sigma_2)}_{\underset{x}{0}}(-1_2)]. \tag{19}$$

Пространственная аппроксимация конвективных членов (19) хорошо изучена (см. [17]), а параметры σ_1, σ_2, как обычно, определяют аппроксимацию по времени.

Уравнения (18), (19) необходимо дополнить начальными и граничными условиями, однако все дальнейшее изложение не зависит от их конкретного вида.

Методические расчеты двумерной задачи, аналогичные тем, которые были описаны выше, полностью подтвердили выводы, полученные на основе анализа одномерной модели. Не останавливаясь подробно на их результатах, перейдем к описанию матричного алгоритма решения уравнений Навье—Стокса.

Пусть $\sigma_1=\sigma_2=1$. При этих значениях параметров соотношения (18), (19) представляют собой систему нелинейных алгебраических уравнений. Для ее решения воспользуемся итерационным методом Ньютона. В результате получим систему линейных уравнений, аналогичную (16), однако в двумерном случае она имеет более сложную структуру. Вводя вектор $\overset{(s+1)}{X}_{ij}=(\delta\overset{(s-1)}{\omega}_{i,j}, \delta\overset{(s+1)}{\psi}_{i,j})$, ее можно записать в виде

$$\overset{(s)}{\mathcal{A}}_{i,j}\overset{(s+1)}{X}_{i-1,j}-\overset{(s)}{\mathcal{D}}_{i,j}\overset{(s+1)}{X}_{i,j}+\overset{(s)}{\mathcal{B}}_{i,j}\overset{(s+1)}{X}_{i+1,j}+\overset{(s)}{\bar{\mathcal{A}}}_{i,j}\overset{(s+1)}{X}_{i,j-1}+\overset{(s)}{\bar{\mathcal{B}}}_{i,j}\overset{(s+1)}{X}_{i,j+1}+$$
$$+\overset{(s)}{\mathcal{K}}_{i,j}\overset{(s+1)}{X}_{i-1,j+1}+\overset{(s)}{\mathcal{L}}_{i,j}\overset{(s+1)}{X}_{i+1,j+1}+\overset{(s)}{\mathcal{M}}_{i,j}\overset{(s+1)}{X}_{i-1,j-1}+\overset{(s)}{\mathcal{N}}_{i,j}\overset{(s+1)}{X}_{i+1,j-1}+\overset{(s)}{\mathcal{F}}_{i,j}=0, \tag{20}$$

где s — по-прежнему номер итерации по Ньютону. Коэффициенты этого девятиточечного уравнения представляют собой матрицы второго порядка, $\mathcal{F}_{i,j}$ — вектор. Их компоненты вычисляются по значениям искомых функций с предыдущей итерации. Граничные условия также запишем в матричной форме.

Для решения системы уравнений (20) воспользуемся алгоритмом, предложенным в [15, 18]. Он является обобщением на случай матриц второго порядка метода, разработанного в работах [19, 20].

Приведем здесь краткое его описание.

Предположим, что существуют $\alpha_{i,j}$, $\gamma_{i,j}$, $\bar{\alpha}_{i,j}$, $\bar{\gamma}_{i,j}$ — матрицы второго порядка и β_{ij}, δ_{ij}, $\bar{\beta}_{ij}$, $\bar{\delta}_{ij}$ — двумерные векторы, такие, что

$$X_{i,j}=\alpha_{i+1,j}X_{i+1,j}+\beta_{i+1,j}, \tag{21}$$

$$X_{i,j}=\gamma_{i-1,j}X_{i-1,j}+\delta_{i-1,j}, \tag{22}$$

$$X_{i,j}=\bar{\alpha}_{i,j+1}X_{i,j+1}+\bar{\beta}_{i,j+1}, \tag{23}$$

$$X_{i,j}=\bar{\gamma}_{i,j-1}X_{i,j-1}+\bar{\delta}_{i,j-1}. \tag{24}$$

В равенствах (21)—(24) коэффициенты нельзя определить независимо друг от друга. Для их вычисления построим вспомогательную систему уравнений. С этой целью, используя равенства (23) и (24), записанные соответственно в точках $(j-1)$ и $(j+1)$, исключим из уравнения (20) значения искомых функций с $(j-1)$-го и $(j+1)$-го слоев:

$$\tilde{\mathcal{A}}_{i,j}X_{i-1,j}-\tilde{\mathcal{D}}_{i,j}X_{i,j}+\tilde{\mathcal{B}}_{i,j}X_{i+1,j}+\tilde{\mathcal{F}}_{i,j}=0, \tag{25}$$

где $\tilde{\mathcal{A}}_{i,j}$, $\tilde{\mathcal{D}}_{i,j}$, $\tilde{\mathcal{B}}_{i,j}$ зависят от $\bar{\alpha}$ и $\bar{\gamma}$, а $\tilde{\mathcal{F}}_{i,j}$ — от $\bar{\beta}$ и $\bar{\delta}$.

Для каждого фиксированного значения j уравнение (25) с учетом граничных условий можно рассматривать как одномерную задачу. Это значит, что прогоночные коэффициенты $\alpha_{i+1,j}$, $\beta_{i+1,j}$ в (24) удовлетворяют соотношениям

$$\alpha_{1j} = \mathcal{D}_{0j}^{-1}\mathcal{B}_{0j}, \tag{26}$$

$$\alpha_{i+1,j} = (\widetilde{\mathcal{D}}_{i,j} - \widetilde{\mathcal{A}}_{i,j}\alpha_{i,j})^{-1}\,\widetilde{\mathcal{B}}_{i,j}, \quad i = 1, \ldots, M-1. \tag{27}$$

$$\beta_{1j} = \mathcal{D}_{0j}\mathcal{F}_{0j}, \tag{28}$$

$$\beta_{i+1,j} = (\widetilde{\mathcal{D}}_{i,j} - \widetilde{\mathcal{A}}_{i,j}\alpha_{i,j})^{-1}\,(\widetilde{\mathcal{F}}_{i,j} + \widetilde{\mathcal{A}}_{i,j}\beta_{i,j}), \quad i = 1, \ldots, M-1. \tag{29}$$

Аналогично, только пользуясь формулами обратной прогонки, получим соотношения, связывающие $\gamma_{i-1,j}$ и $\gamma_{i,j}$, $\delta_{i-1,j}$ и $\delta_{i,j}$.

Теперь с помощью формул (21) и (22) преобразуем (20) к виду, не содержащему $X_{i-1,j}$ и $X_{i+1,j}$:

$$\widetilde{\widetilde{\mathcal{A}}}_{i,j}X_{i,j-1} - \widetilde{\widetilde{\mathcal{D}}}_{i,j}X_{i,j} + \widetilde{\widetilde{\mathcal{B}}}_{i,j}X_{i,j+1} + \widetilde{\widetilde{\mathcal{F}}}_{i,j} = 0.$$

Вновь используя формулы для прогоночных коэффициентов, выведем рекуррентные соотношения, аналогичные (26)–(29), для $\alpha_{i,j}$, $\bar{\beta}_{i,j}$, $\bar{\gamma}_{i,j}$, $\bar{\delta}_{i,j}$.

Таким образом получена система уравнений для определения прогоночных коэффициентов из (21)–(24). Подробное описание метода ее решения дано в [15, 18].

Определив прогоночные коэффициенты, по любой из формул (21)–(26) можно найти решение системы уравнений (20). По известным $\overset{(s+1)}{\delta\,\omega}$, $\overset{(s+1)}{\delta\,\psi}$ определяются значения искомых функций на следующей итерации по Ньютону. Критерием окончания итераций по нелинейности служит выполнение того или иного условия сходимости.

Такой метод решения уравнений Навье–Стокса позволяет проводить расчеты на грубых временных сетках. Например, в модельном примере на сетке 21×21, $h_x=h_y=0{,}05$ с $Q(x, y)=10^4\div10^5$ шаг по времени при расчете методом установления с нулевого фона может принимать значения до 10^2.

Однако с ростом шага по времени увеличивается число итераций и время выхода на стационарный режим. В данном случае наибольший выигрыш машинного времени (примерно на порядок) достигается при использовании шага по времени $\tau_{опт}=1\div5$, при этом $\tau_{опт}/h_x^2\approx10^3$.

Следует иметь в виду, что число арифметических действий, которые необходимо произвести для перехода с одного временного слоя на другой, при использовании описанного здесь алгоритма значительно превышает объем вычислений на каждом слое в методах, основанных на раздельном решении уравнений для ω и ψ. Несмотря на это, использование более грубой сетки по времени дает возможность заметно сократить время счета всей задачи в

целом, что особенно существенно в случаях, когда время выхода на стационарный режим велико, или в расчетах нестационарных процессов.

3. Численное решение уравнений диффузии с нелинейными граничными условиями

Дифференциальная задача (1) – (6), кроме уравнений Навье–Стокса, содержит еще и уравнения для концентраций (2). Как правило, на каждом временном слое решение всей задачи разбивается на два этапа: сначала из (1), (4) определяются функция тока и вихрь, а затем, используя полученные значения ψ, концентрации C_i находятся из (2), (5). В ряде случаев, как, например, при математическом моделировании процесса конвективного массопереноса, происходящего в расплаве в ходе получения тройных полупроводниковых соединений методом жидкофазовой эпитаксии, решение системы уравнений (2), (5) осложняется наличием нелинейных граничных условий.

Как и раньше, проанализируем некоторые алгоритмы решения таких задач на одномерной модели:

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2}, \qquad \frac{\partial C_2}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 C_2}{\partial x^2}, \tag{30}$$

$$\frac{\partial C_1}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial C_2}{\partial x}(0, t) = 0, \qquad C_1(1, t) = f(C_2, t), \tag{31}$$

$$D_1 \frac{\partial C_1}{\partial x}\bigg|_{x=1} = D_2 \frac{\partial C_2}{\partial x}\bigg|_{x=1}, \qquad x \in (0, 1).$$

Пусть $\bar{C}_1(x)$, $\bar{C}_2(x)$ – стационарное решение этой системы уравнений и $C_1(x, t) = \bar{C}_1(x) + W(x, t)$, $C_2(x, t) = \bar{C}_2(x) + Z(x, t)$, $|W/\bar{C}_1| \ll 1$, $|Z/\bar{C}_2| \ll 1$. Тогда для $W(x, t)$, $Z(x, t)$ получим следующую задачу:

$$\frac{\partial W}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 W}{\partial x^2}, \qquad \frac{\partial Z}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 Z}{\partial x^2}, \tag{32}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} W(0, t) = \frac{\partial}{\partial x} Z(0, t) = 0, \tag{33}$$

$$W(1, t) = \alpha Z(1, t) \qquad \alpha = f'_{C_2}(C_2, t),$$

$$D_1 \frac{\partial W}{\partial x}\bigg|_{x=1} = D_2 \frac{\partial Z}{\partial x}\bigg|_{x=1},$$

$$W(x, 0) = W_0(x), \qquad Z(x, 0) = Z_0(x). \tag{34}$$

Ограничимся здесь простейшим, имеющим, однако, практический интерес случаем: $D_1 = D_2 = D$; $\alpha < 0$ и рассмотрим семейство

разностных схем, аппроксимирующих систему уравнений (32) — (34):

$$W_t = DW_{\bar{x}x}^{(\sigma_1)}, \quad Z_t = DZ_{\bar{x}x}^{(\sigma_2)},$$

$$W_x^{(\sigma_1)} = 0, \quad Z_{\bar{x}}^{(\sigma_2)} = 0 \quad \text{при} \quad x = 0, \tag{35}$$

$$DW_{\bar{x}}^{(\sigma_3)} = DZ_{\bar{x}}^{(\sigma_4)}, \quad W^{(\sigma_1)} = \alpha Z^{(\sigma_5)} \quad \text{при} \quad x = 1. \tag{36}$$

Вместо (35) можно использовать дискретные реализации граничных условий более высокого порядка, но это не повлияет на характер полученных результатов.

Рассмотрим некоторые схемы из семейства (35), (36). Пусть сначала $\sigma_i=1$, $i=1, \ldots, 4$, $\sigma_5=0$. Решение соответствующей системы уравнений не представляет алгоритмических трудностей. Однако при значениях $\alpha<-1$ разностная схема (35), (36) с выбранными σ_i оказывается неустойчивой при всех значениях шагов по времени и пространству. Этот результат можно получить, используя, например, признак Гельфанда—Бабенко [21]. Таким образом, область применимости данного алгоритма определяется свойствами функции $f(C_2, t)$, что делает затруднительным его применение для расчета реальных задач, где $f_{C_2}'(C_2, t)$ может принимать значения как больше, так и меньше -1.

Нетрудно проверить, что чисто неявная разностная схема (35), (36) с $\sigma_i=1$, $i=1, \ldots, 5$, абсолютно устойчива. Но если искать ее решение с помощью итерационного процесса, в котором функция Z в граничном условии (36) берется с предыдущей итерации и уравнения для W и Z решаются последовательно одно за другим, как в случае $\sigma_i=1$, $i=1, \ldots, 4$, $\sigma_5=0$, то область его сходимости совпадает с областью устойчивости рассмотренной выше разностной схемы.

Применение метода матричной прогонки к системе уравнений (35), (36) ($\sigma_i=1$, $i=1, \ldots, 5$) обеспечивает получение решения при любых значениях α. Подробные доказательства приведенных здесь утверждений содержатся в [22].

Методические расчеты, проведенные для случая реальных граничных условий, возникающих при моделировании роста тройных соединений из раствора расплава, подтвердили полученные теоретические результаты [22].

В качестве примера приведем результаты одного из одномерных расчетов, проведенных с реальными граничными и начальными условиями, возникающими при математическом моделировании процесса получения тройных полупроводниковых соединений методом жидкофазовой эпитаксии (см. введение). С практической точки зрения наибольший интерес здесь представляет зависимость C_1 и C_2 от времени в граничной точке области $x=1$. Параметры расчета были выбраны так, чтобы в начальный момент времени условия сходимости схемы (35), (36) с $\sigma_i=1$, $i=1, \ldots, 4$, $\sigma_5=0$ были нарушены [22]. При этом оказалось, что если задачу (30),

(31) решать с помощью алгоритма, в котором в нелинейном граничном условии (31) значение функции C_2 брать с нижнего временного слоя, и уравнения для C_1 и C_2 решать последовательно, то полученная в результате зависимость $C_1(1, t)$ носит немонотонный характер. Амплитуда колебаний функции $C_1(1, t)$ возрастает при значениях t, меньших некоторого t^*, а затем при $t>t^*$ начинает убывать (рис. 3). Такое поведение решения задачи (30), (31) противоречит имеющимся физическим представлениям и связано исключительно со свойствами алгоритма численного решения.

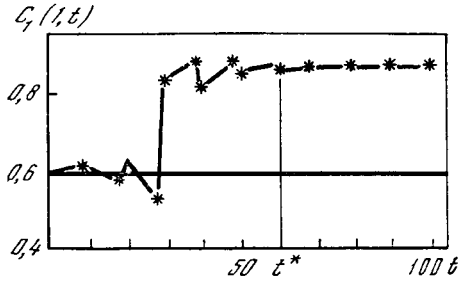


Рис. 3. График функции C_1 (1, t)

Нарастание амплитуды колебаний функции $C_1(1, t)$ при $t \leqslant t^*$ связано с тем, что в этой области используемая разностная схема неустойчива. При $t>t^*$ параметры задачи, входящие в граничные условия (см. (6)), изменяются так, что алгоритм, основанный на последовательном решении уравнений для C_1 и C_2, становится устойчивым. Еще раз подчеркнем, что в данном случае условия устойчивости разностного алгоритма не зависят от шагов сетки по времени и пространству.

На рис. 3 приведен также график функции $C_1(1, t)$, полученный в результате решения задачи (30), (31) по чисто неявной схеме. Соответствующая нелинейная система разностных уравнений решается методом Ньютона, а возникающая на каждой ньютоновской итерации система линейных уравнений — с помощью метода матричной прогонки. Эти результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Исследование одномерной задачи, основные этапы которого изложены выше, послужило основой для выбора алгоритма решения двумерной задачи, который позволил определять концентрации C_i, $i=1, 2$, во всем диапазоне параметров, представляющих практический интерес. Этот алгоритм аналогичен описанному в разд. 2 методу решения уравнений Навье—Стокса. Как и раньше, для решения нелинейной системы уравнений применяется метод Ньютона. Полученная система линейных уравнений решается относительно вектора $(\delta C_1, \delta C_2)$ с помощью итерационного процесса [18]. Необходимо отметить, однако, что возникающая на каждой ньютоновской итерации система уравнений в данном случае несколько проще: так как функция тока ψ уже известна из (1), то нелинейность в (2) содержится только в граничных условиях.

Описанный в работе алгоритм численного решения задач концентрационной конвекции, в основе которого лежит матричный подход к решению уравнений для функции тока и вихря, а затем для концентраций, является весьма эффективным. Он позволяет проводить численное исследование процесса конвективного массо-

переноса, возникающего в расплаве при получении тройных полупроводниковых соединений методом жидкофазовой эпитаксии во всем диапазоне параметров, представляющих практический интерес.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Small M. B., Crossley I.* The physical processes occurring during liquid phase epitaxial growth.— J. Cryst. Growth, 1974, vol. 27, N 1, p. 35—48.
2. *Литвин А. А., Марончук И. Е., Марончук Ю. Е.* и др. Влияние массо- и теплопереноса на рост эпитаксиальных слоев A^3B^5 в процессе принудительного охлаждения раствора — расплава.— Изв. АН СССР. Неорган. материалы, 1980, т. 16, № 2, с. 204—212.
3. *Wilcox W. R.* Influence of convection on the growth of crystals from solution.— J. Cryst. Growth, 1983, vol. 65, p. 133—142.
4. *König U., Keck W.* Influence of cooling rate on convection during LPE growth of GaAs and (Ga, Al)As.— J. Cryst. Growth, 1983, vol. 65, p. 588—595.
5. *Мажорова О. С., Попов Ю. П., Смирнов В. А., Шленский А. А.* Численное моделирование процесса выращивания монокристаллических слоев полупроводниковых материалов методом жидкофазовой эпитаксии.— Физика и химия обраб. материалов, 1983, № 4, с. 81—90.
6. *Гершуни Г. З., Жуховицкий Е. М.* Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. М.: Наука, 1972. 392 с.
7. *Роуч П.* Вычислительная гидродинамика. М.: Мир, 1980. 616 с.
8. *Грязнов В. Л., Полежаев В. И.* Исследование некоторых разностных схем и аппроксимаций граничных условий для численного решения уравнений тепловой конвекции: Препр. ИПМ АН СССР № 40. М., 1974. 57 с.
9. *Герасимов Б. П.* Один метод расчета задачи конвекции несжимаемой жидкости: Препр. ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР № 13. М., 1975. 21 с.
10. *Люмкис Е. Д.* Об увеличении шага по времени при интегрировании уравнений Навье — Стокса в переменных вихрь — функция тока.— Дифференц. уравнения, 1985, № 7, с. 1208—1217.
11. *Вабищевич П. Н.* Неявные разностные схемы для нестационарных уравнений Навье — Стокса в переменных функции тока — вихрь.— Дифференц. уравнения, 1984, № 7, с. 1135—1144.
12. *Самарский А. А.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1977. 656 с.
13. *Кускова Т. В., Чудов Л. А.* О приближенных граничных условиях для вихря при расчете течений вязкой несжимаемой жидкости.— В кн.: Вычислительные методы и программирование. М.: Изд-во МГУ, 1968, вып. 11, с. 27—31.
14. *Мажорова О. С., Попов Ю. П.* Об одном алгоритме численного решения двумерных уравнений Навье — Стокса: Препр. ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР № 37. М., 1979. 31 с.
15. *Мажорова О. С., Попов Ю. П.* О методах численного решения уравнений Навье — Стокса.— Журн. вычисл. математики и мат. физики, 1980, т. 20, № 4, с. 1005—1020.
16. *Самарский А. А., Попов Ю. П.* Разностные методы решения задач газовой динамики. М.: Наука, 1980. 352 с.
17. *Моисеенко Б. Д., Фрязинов И. В.* Консервативные разностные схемы для уравнений несжимаемой вязкой жидкости в переменных Эйлера.— Журн. вычисл. математики и мат. физики, 1981, т. 21, № 5, с. 1180—1191.
18. *Мажорова О. С.* Итерационный метод решения двумерных матричных уравнений: Препр. ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР № 48. М., 1979. 19 с.
19. *Четверушкин Б. Н.* Об одном итерационном алгоритме решения разностных уравнений.— Журн. вычисл. математики и мат. физики, 1976, т. 16, № 2, с. 519—524.
20. *Волчинская М. И., Четверушкин Б. Н.* Об одном итерационном методе решения двумерных уравнений диффузии излучения.— Журн. вычисл. математики и мат. физики, 1977, т. 17, № 2, с. 428—436.

21. *Годунов С. К., Рябенький В. С.* Разностные схемы. М.: Наука, 1977. 439 с.
22. *Мажорова О. С., Попов Ю. П., Похилко В. И.* О численном решении уравнений параболического типа с нелинейными граничными условиями: Препр. ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР № 46. М., 1985. 28 с.

УДК 519.6 : 517.958

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СПОСОБОВ АППРОКСИМАЦИИ НА КАЧЕСТВЕННОЕ ПОВЕДЕНИЕ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ СТЕФАНА ПРИ БОЛЬШИХ СКОРОСТЯХ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

Н. А. Авдонин, Г. Ф. Иванова

При решении задачи Стефана, описывающей кристаллизацию (плавление) различных материалов, как правило, используются две группы методов численного решения задачи. Первая группа методов использует обобщенную, или энтальпийную, запись скрытой теплоты кристаллизации (плавления) в самом уравнении [1]. Это приводит к необходимости той или иной аппроксимации нелинейных членов в уравнении или, иными словами, к «размазыванию» скрытой теплоты [2—4]. Эти методы хорошо приспособлены к нахождению обобщенного решения задачи Стефана, в частности двухфазной зоны (области, занятой твердожидкой фазой), если она возникает. Вторая группа методов исходит из классической постановки задачи Стефана и приводит к необходимости выделения фронта кристаллизации тем или иным способом [5, 6].

Следует отметить, что обе группы методов имеют самостоятельное значение и должны развиваться независимо, так как имеются случаи, когда решение задачи в обобщенной постановке не совпадает с классическим решением [4]. Таким образом, каждый из указанных двух подходов численного решения может дать качественно различные решения задачи. Например, первая группа методов в принципе не может дать численного решения с переохлаждением в расплаве и, наоборот, при втором подходе нельзя получить решения при наличии двухфазной области.

В настоящей работе исследуются различные способы аппроксимации нелинейных членов уравнения в обобщенной постановке задачи. Особое внимание уделяется случаю наличия гладкого классического фронта кристаллизации. Анализируется возможность получения достаточно точного численного решения задачи в этом случае. Анализ проводится на модельной задаче кристаллизации длинного цилиндрического образца при больших скоростях кристаллизации, когда фронт кристаллизации имеет достаточно сложную форму. Приводится аналитическое решение модельной задачи в одномерном приближении. Результаты численных расчетов различными методами сравниваются с аналитическим решением.

1. Способы аппроксимации нелинейностей в задаче Стефана

Рассмотрим задачу, описывающую процесс кристаллизации цилиндрического образца радиуса R, длины L, который движется с постоянной скоростью v в направлении холодной части нагревателя. По длине нагревателя задано распределение температуры $T_1(z)$. Слиток охлаждается с боковой поверхности путем излучения на стенки нагревателя.

Запишем уравнение энергетического баланса в обобщенной постановке для осесимметрического случая в неподвижной системе координат (r, z, t), связанной с нагревателем:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\lambda\frac{\partial T}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial z}\right)=c\left(\frac{\partial T}{\partial t}+v\frac{\partial T}{\partial z}\right)-$$
$$-\gamma\left(\frac{\partial\eta}{\partial t}+v\frac{\partial\eta}{\partial z}\right),\quad 0<r<R,\quad 0<z<L,\quad t>0. \qquad (1)$$

Условие излучения на боковой поверхности слитка заменим линейным условием теплообмена при заданном коэффициенте теплоотдачи α:

$$\lambda\partial T/\partial r=-\alpha(T-T_1(z)),\qquad r=R. \qquad (2)$$

Остальные условия следующие:

$$T(r,\ 0,\ t)=T_0>T_п; \qquad (3)$$

$$\partial T/\partial z=-k,\quad z=L; \qquad (4)$$

$$T(r,\ z,\ 0)=T_2(r,\ z). \qquad (5)$$

Здесь c — объемная теплоемкость; γ — объемная скрытая теплота фазового перехода; $T_п$ — температура плавления материала; η — доля твердой фазы в единице объема:

$$\eta(T)=\begin{cases}0, & T>T_п,\\ 1, & T<T_п;\end{cases} \qquad (6)$$

λ — осредненное значение коэффициента теплопроводности:

$$\lambda(\eta)=\lambda_1(1-\eta)+\lambda_2\eta; \qquad (7)$$

λ_1, λ_2 — коэффициенты теплопроводности жидкой и твердой фаз соответственно.

Рассмотрим два численных метода решения поставленной задачи: хорошо известный метод, предложенный А. А. Самарским, Б. Д. Моисеенко [3], теоретическое обоснование которого содержится в работе [2], и метод введения параметра β, который был предложен и обоснован Н. А. Авдониным в работе [4]. Отметим, что метод введения параметра β был разработан в [4] для решения системы термодиффузионных уравнений как единственный эффективный метод нахождения двухфазной зоны. Ниже рассмат-

ривается применимость этого метода для решения задачи Стефана при наличии гладкого фронта кристаллизации.

Метод введения параметра β основан на простом физическом предположении, что локальная скорость объемной кристаллизации пропорциональна переохлаждению $\Delta T = T_п - T$, т. е.

$$\partial\eta/\partial t = \beta\Delta T\Theta(\eta)\Theta(1-\eta);$$

$$\bar{\eta} = \beta\int_0^t \Delta T d\tau, \qquad \Theta(x) = \begin{cases} 0, & x \leqslant 0, \\ 1, & x > 0, \end{cases}$$

$$\eta_\beta = \begin{cases} 1, & \bar{\eta} \geqslant 1, \\ \bar{\eta}, & 0 < \bar{\eta} < 1, \\ 0, & \bar{\eta} \leqslant 0. \end{cases}$$

При такой аппроксимации функции η приближенное решение задачи T_β при $\beta \to \infty$ стремится к обобщенному решению T исходной задачи (1)—(7) [4].

В методе аппроксимации работы [3] уравнение (1) записывается в виде

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\lambda\frac{\partial T}{\partial r}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial z}\right) = \left(c - \gamma\frac{\partial\eta}{\partial T}\right)\left(\frac{\partial T}{\partial t} + v\frac{\partial T}{\partial z}\right), \tag{8}$$

так что выражение $\gamma\partial\eta/\partial T$ имеет смысл сосредоточенной теплоемкости. Аппроксимация разрывного коэффициента в правой части (8) кусочно-постоянной функцией, предложенная в работе [3], соответствует линейному сглаживанию разрывной функции $\eta(T)$ в интервале температуры $(T_п - \varepsilon_2, T_п + \varepsilon_1)$:

$$\eta_a = \begin{cases} 1, & T \leqslant T_п - \varepsilon_2, \\ \dfrac{T_п + \varepsilon_1 - T}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}, & T_п - \varepsilon_2 < T < T_п + \varepsilon_1, \\ 0, & T \geqslant T_п + \varepsilon_1, \end{cases} \tag{9}$$

причем теплоемкость в интервале сглаживания берется равной осредненному значению $\hat{c}$ по интервалу сглаживания:

$$\hat{c} = \frac{1}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}\int_{T_п - \varepsilon_2}^{T_п + \varepsilon_1} c(s)\,ds = \frac{c_1\varepsilon_1 + c_2\varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2},$$

а коэффициент теплопроводности согласно выражению (7) принимает значение

$$\hat{\lambda}(\eta_\varepsilon) = \lambda_1(1 - \eta_\varepsilon) + \lambda_2\eta_\varepsilon.$$

Таким образом «размазывание» скрытой теплоты в интервале $(T_п - \varepsilon_2, T_п + \varepsilon_1)$ физически равносильно допущению частичной кри-

сталлизации в объеме расплава, причем доля твердой фазы пропорциональна переохлаждению (см. выражение (9)).

Для численного решения указанной задачи использовалась монотонная схема Самарского для уравнения теплопроводности общего вида [7] с введением итераций по методу переменных направлений. Нелинейные выражения для η_β и η_ε берутся из предыдущего временного слоя.

Прежде чем перейти к анализу результатов расчетов, приведем также аналитическое решение модельной задачи в одномерном приближении. Аналитическое решение будет использовано для сравнения с результатами численных расчетов.

2. Определение формы фронта кристаллизации из одномерного приближения задачи

Рассмотрим задачу (1)—(7) в квазистационарном случае, считая образец полубесконечным. Вводя среднюю по сечению цилиндра температуру

$$\widetilde{T}=\frac{2}{R^2}\int_0^R rT(r,z,t)\,dr$$

и интегрируя уравнение (1) по r, сведем задачу (1)—(7) к одномерной. В квазистационарном случае задача запишется следующим образом:

$$\frac{d}{dz}\left[\widetilde{\lambda}\,\frac{d\widetilde{T}}{dz}-\alpha_0(\widetilde{T}-T_1(z))\right]=cv\,\frac{d\widetilde{T}}{dz}-\gamma v\,\frac{d\eta}{dz},\quad 0<z<\infty; \tag{10}$$

$$\widetilde{T}(0)=T_0,\qquad \lim_{z\to\infty}\frac{d\widetilde{T}}{\partial z}=-k. \tag{11}$$

Распределение температуры на нагревателе примем линейным:

$$T_1(z)=T_{\text{п}}-kz.$$

Следует отметить, что если в исходной постановке задачи (1)—(7) двухфазная зона не должна возникать, так как охлаждение образца идет только с внешней границы (см. [4]), то в осредненной задаче может существовать двухфазная зона, которая возникает после осреднения доли твердой фазы по сечению образца. Учитывая это, приведем подробную запись задачи (10), (11) с разбивкой области на три зоны: зону, занятую жидкой фазой ($0<z<z_0$), двухфазную зону ($z_0<z<z_1$) и зону, занятую твердой фазой ($z>z_1$):

$$T''-\mu_1T'-\alpha_1(T-T_1(z))=0,\qquad 0<z<z_0; \tag{12}$$

$$T(0)=T_0,\qquad T(z_0)=T_{\text{п}}; \tag{13}$$

$$\gamma v\eta'=\alpha_0(T_{\text{п}}-T_1(z)),\qquad \eta(z_0)=0,\qquad z_0<z<z_1; \tag{14}$$

$$T(z)\equiv T_{\text{п}},\qquad z_0<z<z_1; \tag{15}$$

$$T''-\mu_2 T'-\alpha_2(T-T_1(z))=0, \qquad z>z_1; \tag{16}$$

$$T(z_1)=T_{\text{п}}, \qquad \lim_{z\to\infty} T'=-k; \tag{17}$$

$$T'(z_0-0)=0; \tag{18}$$

$$\lambda_2 T'(z_1+0)=-\gamma v(1-\eta(z_1)). \tag{19}$$

Здесь $\mu_1=c_1 v/\lambda_1$, $\mu_2=c_2 v/\lambda_2$, $\alpha_1=\alpha_0/\lambda_1$, $\alpha_2=\alpha_0/\lambda_2$. Для упрощения записи при осредненной температуре $\bar{T}$ сохранено прежнее обозначение T.

Отметим, что уравнение (14) для определения функции η в области $z_0<z<z_1$ получено из уравнения (10) с учетом тождества (15), выполняющегося в этой области. В частности, из (15) следует, что $T'(z_0+0)=0$ и $T'(z_1-0)=0$. Соотношение (18) следует из условия равенства тепловых потоков в точке z_0 с учетом, что $T'(z_0+0)=0$. Условие (19) — это уравнение теплового баланса в точке z_1 с учетом, что $T'(z_1-0)=0$ и что в точке z_1 кристаллизуется лишь оставшаяся часть материала, доля которой равна $1-\eta(z_1)$.

Задача (12)—(19) решается в аналитически замкнутой форме. Приведем ее решение:

$$T=\begin{cases} T_0, & z=0, \\ A_0\exp(k_{11}z)+B_0\exp(k_{12}z)-kz+a_1, & 0<z<z_0, \\ T_{\text{п}}, & z_0\leqslant z\leqslant z_1, \\ (T_{\text{п}}+kz-a_2)\exp(k_{22}(z-z_1))-kz+a_2, & z>z_1, \end{cases} \tag{20}$$

$$\eta=\begin{cases} 0, & 0\leqslant z\leqslant z_0, \\ s_1(z^2-z_0^2)+s_2(z-z_0), & z_0\leqslant z\leqslant z_1, \\ 1, & z>z_1, \end{cases} \tag{21}$$

где

$$A_0=\frac{(T_{\text{п}}+kz_0-a_1)-(T_0-a_1)\exp(k_{12}z_0)}{\exp(k_{11}z_0)-\exp(k_{12}z_0)}, \quad B_0=T_0-a_1-A_0,$$

$$s_1=0{,}5ks_0, \qquad s_2=(T_{\text{п}}-T_2)s_0, \qquad s_0=\frac{\alpha_1\lambda_1}{\gamma v},$$

$$k_{11}=0{,}5\mu_1+\sqrt{0{,}25\mu_1^2+\alpha_1}, \qquad k_{12}=0{,}5\mu_1-\sqrt{0{,}25\mu_1^2+\alpha_1},$$

$$k_{22}=0{,}5\mu_2-\sqrt{0{,}25\mu_2^2+\alpha_2}, \qquad a_i=T_{\text{п}}+\mu_i k, \qquad i=1,2.$$

Значения z_0 и z_1 определяются из соотношений (18), (19), которые с учетом (20), (21) записываются следующим образом:

$$A_0k_{11}\exp(k_{11}z_0)+B_0k_{12}\exp(k_{12}z_0)-k=0,$$

$$\lambda_2[k_{22}(T_{\text{п}}+kz_1-a_2)-k]+\gamma v[1-s_1(z_1^2-z_0^2)+s_2(z_1-z_0)]=0.$$

График решения одномерной задачи приведен на рис. 1.

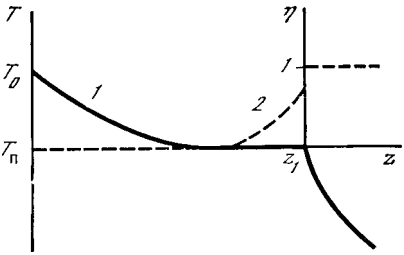


Рис. 1. Решение одномерной задачи
1 — температура $T(z)$; *2* — функция $\eta(z)$

По найденной функции η можно восстановить форму фронта кристаллизации. Действительно, учитывая, что твердая фаза может возникнуть только у боковой поверхности цилиндра (двухфазная зона отсутствует), можно определить $\eta(z)$ как отношение площади, занимаемой твердой частью в сечении цилиндра, к площади всего сечения:

$$\eta(z)=[\pi R^2-\pi r_1^2(z)]/\pi R^2,$$

откуда получим координату фронта кристаллизации

$$r_1(z)=R\sqrt{1-\eta}.$$

Более подробный анализ одномерной задачи см. в [8].

3. Анализ результатов расчетов

Проведем сравнение результатов расчетов при различных способах аппроксимации нелинейных разрывных коэффициентов в задаче Стефана. Расчеты проводились для прямоугольной области

$$0\leqslant\rho\leqslant1,\quad 0\leqslant x\leqslant20\quad(\rho=r/R,\ x=z/R)$$

на неравномерной сетке 16×40 узлов, сгущенной около боковой поверхности цилиндра и в районе фронта кристаллизации, при начальных данных задачи, соответствующих теплофизическим характеристикам германия: $\lambda_1=0{,}412$, $\lambda_2=0{,}173$ Вт·см$^{-1}$·(°C)$^{-1}$; $c_1=1{,}884$; $c_2=1{,}894$ Дж·(°C)$^{-1}$·см$^{-3}$; $\gamma=2656$ Дж·см$^{-3}$; $\alpha=0{,}157$ Вт·(°C)$^{-1}$·см$^{-2}$; $k=100$ °C·см$^{-1}$; $R=0{,}1$ см; $T_п=1210$, $T_0=1213$ K; $v=0{,}0117$ см·с$^{-1}$. Значение R было взято достаточно малым, чтобы осреднение по радиусу в одномерном приближении не приводило к большой погрешности. Значение скорости v было выбрано таким, чтобы получить конфигурацию фронта кристаллизации с большим прогибом.

Проанализируем вначале результаты численных расчетов методом введения параметра β. Расчеты были проведены при увеличивающихся значениях параметра β. Было обнаружено, что при значениях $\beta\geqslant2$ результаты расчетов практически совпадают, что свидетельствует о хорошей сходимости решения по β. В табл. 1 приведен фрагмент поля функции η в районе фронта кристаллизации в квазистационарном случае.

Как показывают приведенные данные, имеется четкая граница раздела фаз, которая определяется значениями η, отличными от 0 и 1. Точное положение границы определяется соответствующей интерполяцией функции η между узлами сетки. В центральной части слитка фронт кристаллизации почти плоский, а у боковой поверхности фронт резко изгибается, причем прогиб фронта состав-

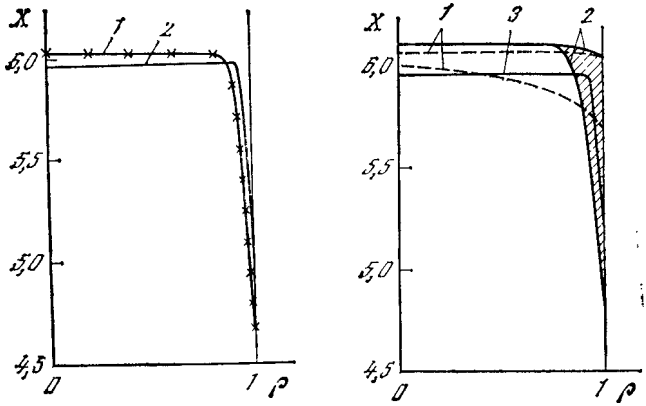


Рис. 2. Граница раздела фаз ($\eta = 1$)

1 — метод введения параметра β ($\beta = 2$); *2* — аналитическое решение

Рис. 3. Граница двухфазной зоны ($\eta = 0{,}1$ и 1)

1 — $\varepsilon_1 = 0{,}125$, $\varepsilon_2 = 0.25°$ С; *2* — $\varepsilon_1 = 0{,}0625$, $\varepsilon_2 = 0{,}125°$ С; *3* — аналитическое решение

ляет примерно 1,5 R. Такая картина полностью соответствует форме фронта, полученной из аналитического решения одномерной задачи (рис. 2). Сравнение результатов численного и аналитического решений показывает достаточную точность численного метода с введением параметра β.

Теперь остановимся на результатах решения задачи методом, предложенным в работе [3]. В табл. 2 приведены фрагменты поля $\eta(\rho, x)$, полученного этим методом при различных величинах интервала сглаживания, а в табл. 3 — температурное поле для одного из расчетов.

Как видно из приведенных данных, в центральной части слитка имеется область со слегка размытой границей раздела фаз.

Таблица 1. Поле функции $\eta(\rho, x)$, $\beta = 2$

x	ρ						
	0	0,3	0,6	0,9	0,96	0,98	1
6,15	1	1	1	1	1	1	1
6,00	0,736	0,749	0,797	1	1	1	1
5,85	0	0	0	0,073	0,985	1	1
5,70	0	0	0	0	0,564	1	1
5,55	0	0	0	0	0,344	1	1
5,40	0	0	0	0	0,136	1	1
5,25	0	0	0	0	0	0,943	1
5,10	0	0	0	0	0	0,750	1
4,95	0	0	0	0	0	0,549	1
4,80	0	0	0	0	0	0,349	1
4,65	0	0	0	0	0	0,146	1
4,50	0	0	0	0	0	0	0

Таблица 2. Поле функции $\eta(\rho, x)$

x	0	0,3	0,6	0,9	0,96	0,98	1
			$\varepsilon_1 = 0{,}5$,	$\varepsilon_2 = 1°$ C			
6,50	1	1	1	1	1	1	1
6,15	0,506	0,511	0,531	0,579	0,596	0,603	0,610
6,00	0,171	0,176	0,193	0,225	0,234	0,237	0,240
5,85	0,099	0,104	0,120	0,151	0,160	0,163	0,166
5,70	0,063	0,067	0,084	0,114	0,122	0,125	0,128
5,55	0,043	0,047	0,063	0,092	0,100	0,102	0,105
5,40	0,030	0,034	0,049	0,077	0,084	0,087	0,090
5,25	0,020	0,024	0,038	0,065	0,073	0,075	0,078
5,10	0,013	0,016	0,029	0,055	0,062	0,065	0,067
4,95	0,007	0,010	0,021	0,046	0,053	0,055	0,058
4,80	0,002	0,004	0,014	0,036	0,043	0,045	0,048
4,65	0	0	0,006	0,027	0,034	0,036	0,038
4,50	0	0	0	0,018	0,024	0,026	0,028
4,25	0	0	0	0,001	0,006	0,008	0,011
4,00	0	0	0	0	0	0	0
			$\varepsilon_1 = 0{,}125$,	$\varepsilon_2 = 0{,}25°$ C			
6,15	1	1	1	1	1	1	1
6,00	0,361	0,367	0,392	0,459	0,488	0,500	0,514
5,85	0,096	0,101	0,125	0,179	0,195	0,201	0,207
5,70	0,031	0,036	0,059	0,110	0,126	0,131	0,137
5,55	0,012	0,016	0,036	0,086	0,101	0,106	0,112
5,40	0,004	0,007	0,025	0,072	0,086	0,092	0,097
5,25	0,001	0,003	0,017	0,060	0,074	0,080	0,085
5,10	0	0,001	0,009	0,050	0,063	0,068	0,073
4,95	0	0	0,002	0,039	0,052	0,056	0,061
4,80	0	0	0	0,027	0,040	0,044	0,049
4,65	0	0	0	0,016	0,028	0,032	0,037
4,50	0	0	0	0,005	0,016	0,020	0,024
4,25	0	0	0	0	0	0	0
			$\varepsilon_1 = 0{,}0625$,	$\varepsilon_2 = 0{,}125°$ C			
6,15	1	1	1	1	1	1	1
6,00	0,152	0,152	0,168	0,299	0,383	0,426	0,484
5,85	0,007	0,007	0,020	0,138	0,194	0,216	0,239
5,70	0,001	0,001	0,010	0,120	0,174	0,195	0,218
5,55	0	0,001	0,005	0,107	0,158	0,179	0,201
5,40	0	0	0,001	0,092	0,141	0,161	0,183
5,25	0	0	0	0,077	0,124	0,143	0,165
5,10	0	0	0	0,061	0,106	0,125	0,145
4,95	0	0	0	0,045	0,088	0,106	0,126
4,80	0	0	0	0,033	0,070	0,087	0,107
4,65	0	0	0	0,030	0,055	0,070	0,089
4,50	0	0	0	0	0,051	0,070	0,088
4,25	0	0	0	0	0	0	0

Вблизи боковой поверхности эта размытость увеличивается, и область двухфазной зоны достигает значительных размеров. С уменьшением интервала «размазывания» ($T_п - \varepsilon_2$, $T_п + \varepsilon_1$) в центральной части слитка фронт кристаллизации становится почти плоским, а у боковой поверхности размер двухфазной зоны стабилизируется. На рис. 3 приведены границы двухфазной зоны, определяемой как

Таблица 3. Поле функции $T - T_п$, $\varepsilon_1 = 0{,}0625$, $\varepsilon_2 = 0{,}125°$ С

x	ρ						
	0	0,3	0,6	0,9	0,96	0,98	1
6,15	—4,00	—4,01	—4,05	—4,14	—4,16	—4,17	—4,18
6,00	0,03	0,03	0,03	0,01	—0,01	—0,02	—0,03
5,85	0,06	0,06	0,06	0,04	0,03	0,02	0,02
5,70	0,06	0,06	0,06	0,04	0,03	0,03	0,02
5,55	0,06	0,06	0,06	0,04	0,03	0,03	0,02
5,40	0,07	0,06	0,06	0,05	0,04	0,03	0,03
5,25	0,07	0,07	0,06	0,05	0,04	0,04	0,03
5,10	0,07	0,07	0,07	0,05	0,04	0,04	0,04
4,95	0,08	0,08	0,07	0,05	0,05	0,04	0,04
4,80	0,09	0,09	0,08	0,06	0,05	0,05	0,04
4,65	0,10	0,10	0,09	0,06	0,05	0,05	0,05
4,50	0,12	0,12	0,11	0,06	0,05	0,05	0,05
4,25	0,16	0,16	0,15	0,10	0,09	0,09	0,09

область, где $0{,}1 < \eta < 1$, для двух значений интервала сглаживания. Дальнейшее уменьшение интервала сглаживания приводит к неустойчивости, так как в интервал сглаживания попадает малое число узлов сетки. В целом форма фронта кристаллизации согласуется с аналитическим решением, однако у боковой поверхности слитка наблюдается узкая двухфазная область (заштрихована на рис. 3). Отметим особую трудность расчетов методом сглаживания коэффициентов в интервале температуры, которая возникает из-за наличия обширной области с температурой, близкой к $T_п$ (см. табл. 3). Вопрос же о наличии двухфазной зоны в описанной модели остается открытым, так как трудно численно получить предельное при ε_1, $\varepsilon_2 \to 0$ решение. Здесь необходимо теоретическое исследование слабого предельного перехода.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Тихонов А. Н., Самарский А. А.* Уравнения математической физики. М.: Наука, 1966. 724 с.
2. *Олейник О. А.* Об одном методе решения общей задачи Стефана.— ДАН СССР, 1960, т. 135, № 5, с. 1054—1057.
3. *Самарский А. А., Моисеенко Б. Д.* Экономическая схема сквозного счета для многомерной задачи Стефана.— Журн. вычисл. математики и мат. физики, 1965, т. 5, № 5, с. 816—827.
4. *Авдонин Н. А.* Математическое описание процессов кристаллизации. Рига: Зинатне, 1980. 178 с.
5. *Будак Б. М., Гольдман Н. Л., Егорова А. В., Успенский А. Б.* Метод выпрямления фронтов для решения задачи типа Стефана в многомерном случае.— В кн.: Вычислительные методы и программирование. М.: Изд-во МГУ, 1967, вып. 8, с. 103—120.
6. *Бакирова О. И., Фрязинов И. В.* Метод совместного решения задачи Стефана и уравнения Навье — Стокса: Препр. ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР № 103. М., 1981. 28 с.
7. *Самарский А. А.* Введение в теорию разностных схем. М.: Наука, 1971. 552 с.
8. *Авдонин Н. А., Иванова Г. Ф.* Определение формы фронта кристаллизации из одномерного приближения задачи при больших скоростях вытягивания слитка.— В кн.: Прикладные задачи математической физики. Рига: Изд-во Латв. ун-та им. П. Стучки, 1983, с. 13—22.

II. МЕТОД ЧОХРАЛЬСКОГО

УДК 548.55 : 519.96

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ВЫРАЩИВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ ПО ЧОХРАЛЬСКОМУ

В. А. Смирнов, И. В. Старшинова, И. В. Фрязинов

Введение

Получение однородных монокристаллов является актуальной задачей современной промышленной технологии получения монокристаллов.

Изучению численными методами тепло- и массопереноса в расплавах при выращивании монокристаллов по Чохральскому посвящено большое число работ, опубликованных лишь в последние годы [1—13].

В статье дается описание технологического процесса получения монокристаллов по Чохральскому, ставится соответствующая математическая модель и приводятся численные методы решения задачи. Далее описан ряд расчетов на ЭВМ технологических экспериментов получения монокристаллов германия с однородным распределением примеси (галлия) по радиусу [8], устойчивого разращивания монокристаллов арсенида галлия [10]. В работе приводятся результаты расчетов содержания и распределения кислорода (летучая примесь), поступающего в расплав кремния из кварцевого тигля при различных технологических режимах выращивания монокристаллов [9]. Показано влияние на процесс внешнего магнитного поля [13]; приводятся результаты расчета модельной задачи о течении расплава в тигле с подпиткой [13].

Приведенные и описанные ниже расчеты привели к ускорению ряда новых технологических разработок процессов выращивания монокристаллов по Чохральскому.

Описание всех экспериментов и расчетов в предлагаемой работе ведется на качественном уровне. Детали экспериментов и расчетов подробно изложены в цитированных работах.

Метод Чохральского

На рис. 1 приведена типичная схема теплового узла установки выращивания монокристаллов по методу Чохральского, включающая тигель, заполненный жидкостью (расплавом), кристалл, соприкасающийся с расплавом по границе фазового перехода, нагреватель и экраны.

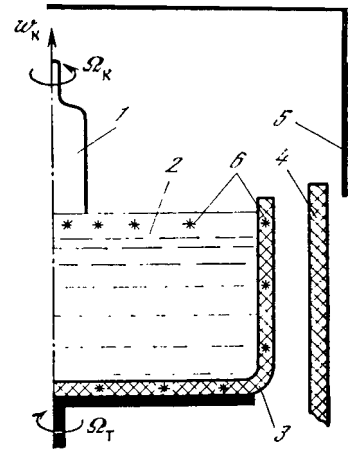


Рис. 1. Схема теплового узла при выращивании монокристаллов по Чохральскому

1 — кристалл; 4 — нагреватель;
2 — расплав; 5 — тепловые экраны;
3 — тигель; 6 — термопары

Кристалл и тигель вращаются с угловыми скоростями $\Omega_к$ и $\Omega_т$, кристалл вытягивается из расплава со скоростью $w_к$. Течение расплава определяется вынужденной конвекцией, связанной с вращающимися кристаллом и тиглем и тепловой конвекцией, определяемой перепадами температур и геометрическими параметрами. Некоторую роль играет и термокапиллярная конвекция.

В зависимости от характера течения расплава возникает то или иное распределение легирующей примеси на фронте кристаллизации выращиваемого кристалла. Чаще всего необходимо найти такой технологический режим, при котором распределение примеси в кристалле было равномерным по радиусу. Иногда требуется, чтобы количество примеси в кристалле (кислорода в кремнии) было минимальным. Для получения качественных монокристаллов весьма существенно наличие стационарного (квазистационарного) течения расплава.

Трудности разработки технологии в методе Чохральского связаны как с большим числом параметров, имеющихся в задаче, так и с их значениями (большие плотности полупроводниковых материалов). Отметим также сложности натурных экспериментов (агрессивные среды, большая масса расплава в тигле и др.). Все это повышает роль вычисленного эксперимента.

В рассматриваемой ниже математической модели считалось заданным из эксперимента распределение температур на свободной поверхности расплава и стенке тигля. Численное решение полной задачи с расчетом границы фазового перехода и падающего на расплав излучения достаточно трудоемко и в данной работе не рассматривается (см. статью Г. Ф. Ивановой, Е. Д. Люмкиса, Б. Я. Мартузан и др. в наст. сб.).

Математическая модель

Задача решалась в областях (G), изображенных на рис. 2. Область G на рис. 2, *а* содержит подкристальный столбик жидкости, в другом случае (рис. 2, *б*) задача решалась в прямоугольнике при $0<r<R_т$, $0<z<H$. Пусть Γ — граница области G, $\Gamma=\Gamma_т\cup\Gamma_р\cup\Gamma_0\cup\Gamma_к$ (см. рис. 2). В области G в переменных r, z рассматривались урав-

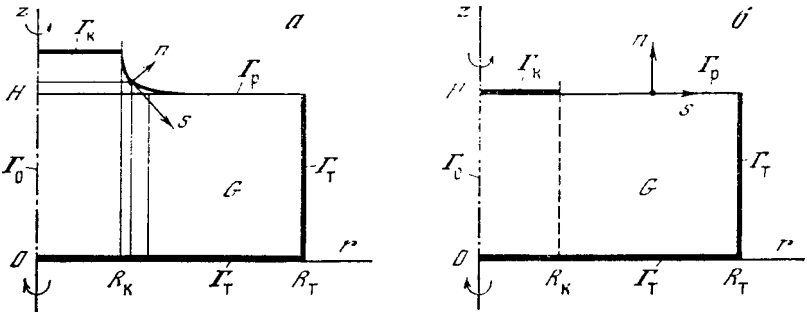


Рис. 2. Расчетная область

а — с учетом жидкого столбика; *б* — без учета жидкого столбика

нения Навье—Стокса в приближении Буссинеска [14], а также уравнения конвективной теплопроводности и диффузии. Уравнения записывались для функций

$$\omega=\omega^{(\varphi)}/r; \qquad \psi=\psi^{(\varphi)}r; \qquad M=v^{(\varphi)}r; \; T; \; c,$$

где $\omega^{(\varphi)}$, $v^{(\varphi)}$, $\psi^{(\varphi)}$ — окружные компоненты векторов $\boldsymbol{\omega}=\mathrm{rot}\,\mathbf{v}$, $\mathbf{v}=\mathrm{rot}\,\boldsymbol{\psi}$ и $\boldsymbol{\psi}$; T — отклонение температуры от температуры кристаллизации $T_{\text{кр}}$; c — концентрация или отклонение концентрации от ее средней величины. Все эти величины безразмерные. В качестве масштабов выбраны: R_0 ($R_0\equiv R_{\text{к}}$ — радиус кристалла), $t_0=1/\Omega_0$ ($\Omega_0=\Omega_{\text{к}}$, $\Omega_{\text{к}}$ — угловая скорость кристалла), $\Delta T=\max\limits_{\Gamma_{\text{т}}} T-T_{\text{кр}}$, $c_0=\bar{c}$ — средняя концентрация, $T_{\text{кр}}$ — температура кристаллизации. В ряде случаев полагается $R_0=R_{\text{т}}$, $\Omega_0=\Omega_{\text{т}}$, $c_0=c_{\text{н}}$, где $R_{\text{т}}$, $\Omega_{\text{т}}$ — радиус тигля и угловая скорость его, $c_{\text{н}}$ — концентрация насыщения.

Вводятся критерии $\mathrm{Re}=R_0^2\Omega_0/\nu$, $\mathrm{Gr}=\beta g R_0^3\Delta T/\nu^2$, $\mathrm{Pe}=\mathrm{Pr}\,\mathrm{Re}$, $\mathrm{Pr}=\nu/\chi$, $\mathrm{Ro}_{\text{к}}=\Omega_{\text{к}}/\Omega_0$, $\mathrm{Ro}_{\text{т}}=\Omega_{\text{т}}/\Omega_0$ (Россби по кристаллу и тиглю), $\mathrm{Ma}=-\Delta T\alpha_{\text{т}}R_0/\nu\rho\chi$, $\mathrm{Pe}_D=\mathrm{Re}\,\mathrm{Pr}_D$, $\mathrm{Pr}_D=\nu/D$. Здесь g — ускорение свободного падения; β — коэффициент температурного расширения; ν — коэффициент кинематической вязкости; χ — коэффициент температуропроводности; D — коэффициент диффузии в расплаве; $\alpha_{\text{т}}=-\partial\sigma/\partial T$; σ — коэффициент поверхностного натяжения расплава; ρ — плотность расплава.

Введем обозначения:

$$u'=rv^{(r)}=\partial\psi/\partial z, \quad w'=rv^{(z)}=-\partial\psi/\partial r.$$

Система уравнений для ω, ψ, M и T (задачу для концентрации рассмотрим отдельно) имеет вид

$$\frac{\partial\omega}{\partial t}+\frac{1}{r}\left(\frac{\partial}{\partial r}(u'\omega)+\frac{\partial}{\partial z}(w'\omega)\right)=\frac{1}{\mathrm{Re}\cdot r}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\omega)\right)+\right.$$
$$\left.+\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial z}(r^2\omega)\right)\right]-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{M^2}{r^3}\right)+\frac{\mathrm{Gr}}{\mathrm{Re}^2}\frac{1}{r}\frac{\partial T}{\partial r};$$

$$\frac{1}{r}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial z}\right)\right]=-\omega; \tag{1}$$

$$\frac{\partial M}{\partial t}+\frac{1}{r}\left(\frac{\partial}{\partial r}(u'M)+\frac{\partial}{\partial z}(w'M)\right)=\frac{1}{\mathrm{Re}\cdot r}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^3\frac{\partial}{\partial r}(r^{-2}M)\right)+\right.$$
$$\left.+\frac{\partial}{\partial z}\left(r^3\frac{\partial}{\partial z}(r^{-2}M)\right)\right];$$

$$\frac{\partial T}{\partial t}+\frac{1}{r}\left(\frac{\partial}{\partial r}(u'T)+\frac{\partial}{\partial z}(w'T)\right)=\frac{1}{\mathrm{Pe}\cdot r}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial T}{\partial r}\right)+\right.$$
$$\left.+\frac{\partial}{\partial z}\left(r\frac{\partial T}{\partial z}\right)\right];\quad (r,z)\in G-$$

Уравнения (1) дополняются краевыми условиями:

1) на границе кристалл—расплав $(r, z)\in\Gamma_к$

$$\partial\psi/\partial z=0,\quad \psi=0,\quad M=r^2\mathrm{Ro}_к,\quad T=T_к(r);$$

2) на свободной поверхности расплава $(r, z)\in\Gamma_р$

$$\omega=\frac{\mathrm{Ma}}{r\mathrm{Pe}}\frac{\partial T}{\partial s}-\frac{2}{r^2}\left[\left(\frac{\partial}{\partial s}\cos(n,r)\right)u'+\left(\frac{\partial}{\partial s}\cos(n,z)\right)w'\right],$$

$$\psi=0,\quad \partial(Mr^{-2})/\partial n=0,\quad T=T_р(r);$$

3) на боковой стенке и дне тигля $(r, z)\in\Gamma_т$

$$\partial\psi/\partial n=0,\quad \psi=0,\quad M=r^2\mathrm{Ro}_т,\quad T=T_т(r, z);$$

4) на оси симметрии $(r, z)\in\Gamma_0$

$$\omega=0,\quad \psi=0,\quad M=0\ \text{ либо }\ \frac{\partial}{\partial r}(Mr^{-2})=0,\quad \partial T/\partial r=0$$

и начальными условиями:

$$\psi=0,\quad \omega=0,\quad M=0,\quad T=T^0=0{,}5.$$

Здесь s, n — касательная и внешняя нормаль к границе Γ; $Mr^{-2}=\Omega$ — угловая скорость.

При постановке этой задачи пренебрегалось изменением положения границ $\Gamma_к$ и $\Gamma_р$ за счет роста и вытягивания кристалла из расплава, так как скорость роста $w_0\ll\max(R_к\Omega_к;\ R_т\Omega_т)$. Формы поверхностей $\Gamma_к$, $\Gamma_р$ считались заданными, как и радиус $R_к$. Функции $T_к(r)$, $T_р(r)$, $T_т(r, z)$ определялись из эксперимента и имели вид параболы (см. [13]).

Уравнение конвективной диффузии имеет вид [14]

$$\frac{\partial c}{\partial t}+\frac{1}{r}\left[\frac{\partial}{\partial r}(u'c)+\frac{\partial}{\partial z}(w'c)\right]=$$
$$=\frac{1}{\mathrm{Pe}_D\cdot r}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial c}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(r\frac{\partial c}{\partial z}\right)\right],\quad (r,z)\in G- \tag{2}$$

В случае присутствия в расплаве летучей примеси — кислорода, поступающего из кварцевого тигля, нужно поставить краевые

условия (при нормировке концентрации на концентрацию насыщения $c_н$) [14, 15]:

$$c=0, \quad (r, z)\in\Gamma_р; \quad c=1, \ (r, z)\in\Gamma_т; \quad \partial c/\partial r=0, \quad (r, z)\in\Gamma_0.$$

На поверхности кристалла (см. следующий раздел) нужно поставить краевое условие

$$-\mathrm{Pe}_D^{-1}\partial c/\partial z=w_0(k_0-1)c, \quad (r, z)\in\Gamma_к, \tag{3}$$

где w_0 — скорость роста кристалла; k_0 — равновесный коэффициент распределения примеси. В начальный момент времени

$$c=c^0=\mathrm{const}.$$

Для нелетучей примеси при отсутствии подпитки из тигля на границах $\Gamma_т$, $\Gamma_р$, и Γ_0 следует положить (нормировка c на $\bar{c}$):

$$\partial c/\partial n=0, \quad (r, z)\in\Gamma_р\cup\Gamma_т\cup\Gamma_0. \tag{4}$$

В задаче при постоянной загрузке и отсутствии подпитки (2)—(4) есть лишь тривиальное стационарное решение ($c\equiv0$). Однако поскольку при медленном изменении загрузки в процессе выращивания монокристалла вдали от границы $\Gamma_к$ концентрация мало отличается от средней, то на границе $\Gamma_т$ (и $\Gamma_р$, Γ_0) можно положить [16]

$$c=1, \quad (r, z)\in\Gamma_т; \quad \partial c/\partial n=0, \quad (r, z)\in\Gamma_р\cup\Gamma_0.$$

В следующем разделе рассматривается иная постановка этой задачи.

Математическое моделирование диффузионных процессов для нелетучих легирующих примесей

Сформулируем концентрационную задачу для нелетучих примесей при отсутствии подпитки. За время Δt (рис. 3, *а*, *б*) кристалл увеличивается на величину $\Delta l_к=w_0\Delta t$ (w_0 — скорость роста кристалла), поверхность расплава опускается на $\Delta l_р$: $\Delta l_р R_т^2=\Delta l_к R_к^2$. Скорость опускания поверхности $\Gamma_р\cup\Gamma_к$ равна $w_р=-\Delta l_р/\Delta t=-w_0(R_к/R_т)^2$ ($w_р=dH/dt$). Этой же величине равна компонента $v^{(z)}$ скорости жидкости на свободной поверхности расплава. Таким образом, скорость вытягивания кристалла и скорость жидкости $v^{(z)}$ на границе $\Gamma_к$ равны $w_к=(\Delta l_к-\Delta l_р)/\Delta t=w_0(1-(R_к/R_т)^2)$. Итак,

$$\begin{aligned} v^{(z)}&=w_0(1-(R_к/R_т)^2), \quad 0\leqslant r<R_к,\\ v^{(z)}&=-w_0(R_к/R_т)^2, \quad R_к<r<R_т. \end{aligned} \tag{5}$$

На $\Gamma_к\cup\Gamma_р$ должен равняться нулю скачок

$$\left[-\mathrm{Pe}_D^{-1}\frac{\partial c}{\partial z}+c(v^{(z)}-w_р)\right]=0. \tag{6}$$

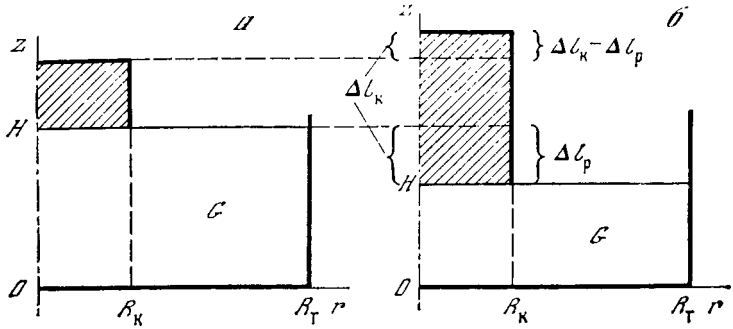


Рис. 3. Схема процесса для постановки концентрационной задачи
а — $t=t_0$; *б* — $t=t_0+\Delta t$

На границе $\Gamma_р$ $v^{(z)}=w_р$, вне G $c=0$, $\partial c/\partial z=0$. На границе $\Gamma_к$ $v^{(z)}-w_р=w_0$, $[c]=(k_0-1)c$, где c — концентрация примеси в жидкости. Отсюда и из (6) следуют условия (3), (4).

Введем среднюю по объему (на 1 рад) тигля концентрацию $\bar{c}$

$$\bar{c}_{(t)}=\frac{2}{HR_т^2}\int_0^{R_т}\int_0^H crdrdz$$

и относительное отклонение концентрации c от $\bar{c}$

$$c'=(c-\bar{c})/\bar{c}.$$

Проинтегрируем уравнение (2) по G, используя значения $v^{(z)}$ из (5) и краевые условия (3), (4).

Заменяя c на $\bar{c}(1+c')$, получим

$$\frac{d\bar{c}}{dt}+\bar{c}\frac{w_0(k_0-1)}{H}\left(\frac{R_к}{R_т}\right)^2\left(1+\frac{k_0}{k_0-1}\frac{2}{R_к^2}\int_0^{R_к}c'|_{z=H}rdr\right)=0. \qquad (7)$$

Подставим $c=\bar{c}(t)(1+c')$ в (2)—(4). Для функции c' имеем

$$\frac{\partial c'}{\partial t}+\frac{1}{r}\left(\frac{\partial}{\partial r}(u'c')+\frac{\partial}{\partial z}(w'c')\right)=\frac{1}{\mathrm{Pe}_D\cdot r}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial c'}{\partial r}\right)+\right.$$
$$\left.+\frac{\partial}{\partial z}\left(r\frac{\partial c'}{\partial z}\right)\right]-\frac{1}{\bar{c}}\frac{d\bar{c}}{dt},\quad (r,z)\in G; \qquad (8)$$

$$-\mathrm{Pe}_D^{-1}\frac{\partial c'}{\partial z}=(k_0-1)w_0(1+c'),\quad (r,z)\in\Gamma_к;$$

$$\partial c'/\partial n=0,\quad (r,z)\in\Gamma\setminus\Gamma_к;\quad c'|_{t=0}=0\quad (c|_{t=0}=\bar{c}(0)).$$

Так как $\frac{1}{\bar{c}}\frac{d\bar{c}}{dt}=0(w_0)$ (см. (7)), то из (8) следует, что $c'=$

$=O(w_0)$. Будем искать решение (8) в виде разложения по малому параметру w_0: $c'=w_0c_1'+w_0^2c_2'+\ldots$ Ограничимся первым приближением. Полагая $c_1'=(R_к^2/2)(k_0-1)c''$, получим для c'' задачу

$$\frac{\partial c''}{\partial t}+\frac{1}{r}\left(\frac{\partial}{\partial r}(u'c'')+\frac{\partial}{\partial z}(w'c'')\right)=\frac{1}{\mathrm{Pe}_D\cdot r}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial c''}{\partial r}\right)+\right.$$

$$\left.+\frac{\partial}{\partial z}\left(r\frac{\partial c''}{\partial z}\right)\right]+\frac{2}{HR_т^2},\quad (r,z)\in G;$$

$$-\mathrm{Pe}_D^{-1}\frac{\partial c''}{\partial z}=\frac{2}{R_к^2},\quad (r,z)\in\Gamma_к; \tag{9}$$

$$\partial c''/\partial n=0,\ (r,z)\in\Gamma\setminus\Gamma_к;\quad \int_0^H\int_0^{R_т}c''rdrdz=0,\quad c''(r,z,0),\quad (r,z)\in G.$$

Здесь функциям $\psi=0$, $(r, z)\in\Gamma$.

Для c имеем

$$c=\bar{c}(t)(1+mc''(r,z,t)),\qquad m=w_0R_к^2(k_0-1)/2. \tag{10}$$

Итак, вместо задачи (2)–(4) рассматриваем задачу (9). Разброс величины c вдоль радиуса кристалла

$$\delta c=(c_{\max}-c_{\min})/(c_{\max}+c_{\min})$$

определяется теперь так:

$$\delta c=|m|(c''_{\max}-c''_{\min})/(2+|m|(c''_{\max}+c''_{\min})).$$

Подобные же построения можно повторить и по отношению к задаче с летучей примесью и тигельной подпиткой, полагая $c=\bar{c}(t)(c_0'(r,z,t)+\ldots)$, где теперь $c_0'\neq1$. Для фиксированной загрузки функция $c=\bar{c}(t_0)c_0'(r,z,t)$ удовлетворяет однородному краевому условию на $\Gamma_к$.

Численные методы решения задач

При решении задач сеточными методами в разностную схему вводят дополнительные искусственные коэффициенты вязкости, температуропроводности, диффузии, зависящие от скорости течения (от r, z, t). Эти дополнительные коэффициенты должны обеспечить монотонность разностных схем, быть малыми и стремящимися к нулю при стремлении к нулю шагов сетки.

Естественно записать исходные уравнения [14] с переменными коэффициентами вязкости, имеющей тензорный характер,

$$\nu_{\alpha\beta}=\frac{1}{\mathrm{Re}}(1+\rho_{\alpha\beta}),\quad \rho_{\alpha\beta}=\rho_{\beta\alpha}\geqslant0,$$

температуропроводности

$$\chi_\alpha=\mathrm{Pe}^{-1}(1+\rho_\alpha)$$

и диффузии

$$D_\alpha = \mathrm{Pe}_D^{-1}(1+\rho_\alpha^D), \quad \alpha = 1, 2.$$

Монотонность схемы может быть обеспечена выбором $\rho_{12}=\rho_{21}\neq\neq 0$, $\rho_{23}=\rho_{32}\neq 0$, $\alpha=1, 2$. При этом можно положить $\rho_{\alpha\alpha}\equiv 0$, $\alpha==1, 2, 3$, $\rho_{12}=0$, $x\in\Gamma$ [17].

Для единообразия последующего изложения положим $x_1=r$, $x_2=z$, $u_\alpha'=(-1)^{3-\alpha}\psi_{x_{3-\alpha}}$, так что $u'=u_1$, $w'=u_2$. Члены переноса обозначим через $D(z, \psi)=x_1^{-1}\sum\limits_{\alpha=1}^{2}(u_\alpha' z)_{x_\alpha}$, $z=\omega, M, T, c$, источник в уравнении для ω

$$\varphi(T, M) = x_1^{-1}(\mathrm{Gr}\mathrm{Re}^{-2}T_{x_1} - (M^2x_1^{-3})_{x_2}).$$

Кроме того,

$$L_z(\mathbf{k})(Q) = x_1^{-1}\sum_{\alpha=1}^{2}(k_\alpha Q_{x_\alpha})_{x_\alpha}, \quad \mathbf{k}=(k_1k_2), \quad z=\omega, \psi, M, T, c.$$

Тогда операторы, содержащие переменные коэффициенты вязкости $\nu_{\alpha,\beta}$, температуропроводности χ_α, диффузии D_α, а также левая часть уравнения для ψ запишутся в виде [17]

$$L_\omega(\mathbf{k}_\omega)((1+\rho_{12})\mathrm{Re}^{-1}x_1^2\omega) + S(\psi), \quad L_\psi(\mathbf{k}_\psi)(\psi),$$

$$L_M(\mathbf{k}_M)(x_1^{-2}M), \quad L_T(\mathbf{k}_T)(T), \quad L_c(\mathbf{k}_c)(c).$$

Здесь

$$S(\psi) = 2(x_1\mathrm{Re})^{-1}\sum_{\alpha=1}^{2}(x_1^{-1}(x_1\rho_{12}(x_1^{-1}\psi_{x_\alpha})_{x_\alpha})_{x_{3-\alpha}})_{x_{3-\alpha}},$$

$$k_{\omega_\alpha} = (x_1\mathrm{Re})^{-1}, \quad k_{\psi_\alpha} = x_1^{-1}, \quad k_{M_\alpha} = x_1^3\mathrm{Re}^{-1}(1+\rho_{3\alpha}),$$

$$k_{T_\alpha} = \mathrm{Pe}^{-1}x_1(1+\rho_\alpha), \quad k_{c_\alpha} = \mathrm{Pe}_D^{-1}x_1(1+\rho_\alpha^D), \quad \alpha = 1, 2.$$

При $\rho_{\alpha\beta}\equiv 0$, $\rho_\alpha\equiv 0$, $\rho_\alpha{}^D\equiv 0$, α, $\beta=1, 2$ приведенные выше выражения совпадают с соответствующими слагаемыми в исходных уравнениях. Далее $\rho_{\alpha\beta}$, ρ_α, $\rho_\alpha{}^D$ будут связаны с шагами сетки.

Перейдем к построению разностной схемы. Для простоты все изложение проведем для случая, когда G прямоугольник.

В области G введем прямоугольную неравномерную сетку, согласованную с границей области (см. рис. 2, *а*, *б*). Ее узлы $x_{i_1i_2}==(x_1^{(i_1)}x_2^{(i_2)})$ — точки пересечения прямых $x_\alpha=x_\alpha^{(i_\alpha)}$, $i_\alpha==0, 1, \ldots, N_\alpha$, $x_\alpha^{(i_\alpha)}<x_\alpha^{(i_\alpha+1)}$, $\alpha=1, 2$. Шаги сетки $h_\alpha^{(i_\alpha+1/2)}==x_\alpha^{(i_\alpha+1)}-x_\alpha^{(i_\alpha)}$,

$$\hbar_\alpha^{(0)} = 0{,}5h_\alpha^{(1/2)}, \quad \hbar_\alpha^{(N_\alpha)} = 0{,}5h_\alpha^{(N_\alpha-1/2)}, \quad \hbar_\alpha^{(i_\alpha)} = 0{,}5(h_\alpha^{(i_\alpha+1/2)} + h_\alpha^{(i_\alpha-1/2)}),$$
$$0<i_\alpha<N_\alpha, \quad \alpha=1, 2.$$

Для сеточных функций $z_{i\alpha}$ (второй индекс опущен) определим разности

$$z_{x_\alpha, i_\alpha+1/2} = (z_{i_\alpha+1} - z_{i_\alpha})/\hbar_\alpha^{(i_\alpha+1/2)}, \quad z_{\substack{0\\ x_\alpha,0}} = z_{x_\alpha,1/2}, \quad z_{\substack{0\\ x_\alpha,N_\alpha}} = z_{x_\alpha,N_\alpha-1/2},$$

$$z_{\substack{0\\ x_\alpha,i_\alpha}} = (z_{i_\alpha+1} - z_{i_\alpha-1})/2\hbar_\alpha^{(i_\alpha)}, \quad 0 < i_\alpha < N_\alpha, \quad \alpha = 1, 2.$$

Для сеточных функций $z_{0\alpha}, z_{i_\alpha+1/2}$ $(0 \leqslant i_\alpha < N_\alpha)$, z_{N_α} (второй индекс опущен) положим

$$z_{\hat{x}_\alpha,0} = (z_{1/2} - z_0)/\hbar_\alpha^{(0)}, \quad z_{\hat{x}_\alpha,N_\alpha} = (z_{N_\alpha} - z_{N_\alpha-1/2})/\hbar_\alpha^{(N_\alpha)},$$

$$z_{\hat{x}_\alpha,i_\alpha} = (z_{i_\alpha+1/2} - z_{i_\alpha-1/2})/\hbar_\alpha^{(i_\alpha)}, \quad 0 < i_\alpha < N_\alpha, \quad \alpha = 1, 2.$$

Сеточные функции ω, ψ определим в узлах x_{i_1,i_2}, функции M, T, c в узлах $x_{i_1+1/2,\, i_2+1/2} = (x_1^{(i_1+1/2)}, \; x_2^{(i_2+1/2)}) \in G$, $x_\alpha^{(i_\alpha+1/2)} = 0{,}5(x_\alpha^{(i_\alpha+1)} + x_\alpha^{(i_\alpha)})$, $\alpha = 1, 2$, и узлах $x_{i_1,\, i_2+1/2}$, $x_{i_1+1/2,\, i_2} \in \Gamma$.

Введем сеточные аналоги $L_z(\mathrm{k})(Q)$, $z = \psi, \omega, M, T, c$:

$$L_z^h(\mathrm{k})(Q) = x_1^{-1} \sum_{\alpha=1}^{2} (k_{z_\alpha} Q_{x_\alpha})_{\hat{x}_\alpha}, \quad z = \omega, \psi;$$

$$L_z^h(\mathrm{k})(Q) = x_1^{-1} \sum_{\alpha=1}^{2} (k_{z_\alpha} Q_{\hat{x}_\alpha})_{x_\alpha}, \quad z = M, T, c.$$

Здесь Q, k_{z_α} — те же функции, что и в соответствующих дифференциальных выражениях. В силу краевых условий нужно положить

$$(x^{-2}M)_{\hat{x}_2(i_1+1/2,N_2)} = (x_1^{-2}M)_{\hat{x}_1(0,i_2+1/2)} = 0, \quad T_{\hat{x}_1(0,i_2+1/2)} = c_{\hat{x}_1(0,i_2+1/2)} = 0.$$

Также введем

$$S^h(\psi) = 2(\mathrm{Re} \cdot x_1)^{-1} \sum_{\alpha=1}^{2} (x_1^{-1}(x_1\rho_{12}(x_1^{-1}\psi_{x_\alpha})_{\hat{x}_\alpha})_{x_{3-\alpha}})_{\hat{x}_{3-\alpha}}.$$

Члены переноса аппроксимируем так:

$$D_\omega^h(\omega, \psi) = x_1^{-1} \sum_{\alpha=1}^{2} (u_\alpha \omega)_{\substack{0\\ x_\alpha}}, \quad u_\alpha = (-1)^{3-\alpha} \psi_{\substack{0\\ x_{3-\alpha}}},$$

$$D_z^h(z, \psi) = x_1^{-1} \sum_{\alpha=1}^{2} (u_\alpha \bar{z})_{x_\alpha}, \quad \bar{z}_{i_\alpha} = 0{,}5(z_{i_\alpha+1} + z_{i_\alpha}), \quad z = M, T, c,$$

источник —

$$\varphi^h(T, M) = x_1^{-1}(\mathrm{Gr} \cdot \mathrm{Re}^{-2} \cdot \overline{T}_{\hat{x}_1} - (\overline{M}^2 (\overline{x}_1^3)^{-1})_{\hat{x}_2}).$$

Здесь $\overline{M}^2_{i_1 i_2+1/2} = M_{i_1+1/2, i_2+1/2} M_{i_1-1/2, i_2+1/2}$;

$\overline{T}_{i_1+1/2, i_2} = \alpha_{i_2} T_{i_1+1/2 i_2+1/2} + (1-\alpha_{i_2}) T_{i_1+1/2 i_2-1/2}$; $\alpha_{i_2} = 0{,}5 h_2^{(i_2+1/2)}/\hbar_2^{(i_2)}$;

$\overline{x}^3_{1 i_1} = 2(x_1^{(i_1+1/2)} x_1^{(i_1-1/2)})^2/(x_1^{(i_1+1/2)} + x_1^{(i_1-1/2)})$.

Представим

$$L_z^h(\mathbf{k}_z)(Q) - D_z^h(z, \psi) \equiv L_{z1}^h(\psi)(z) + L_{z2}^h(\psi)(z),$$

где слагаемые $L_{z\alpha}^h(\psi)(z)$ $(z=\omega, M, T, c)$ содержат разности от z лишь в направлении ox_α, $\alpha=1, 2$, и могут быть записаны в виде

$$L_{z\alpha}^h(\psi)(z)_{i_\alpha} = g_{i_\alpha}^\alpha (A_{i_\alpha+1}^\alpha z_{i_\alpha+1} - B_{i_\alpha}^\alpha z_{i_\alpha} + C_{i_\alpha-1}^\alpha z_{i_\alpha-1}).$$

Коэффициенты A^α, C^α, $B^\alpha = A^\alpha + C^\alpha$ зависят от ψ, различны для разных z, их можно представить в виде

$$A^\alpha = a_\alpha^{(z)}(1 + \rho_\alpha^{(z)} - R_\alpha^{(z)}), \qquad C^\alpha = b_\alpha^{(z)}(1 + \rho_\alpha^{(z)} - S_\alpha^{(z)}),$$

где $\rho_\alpha^{(\omega)} = \rho_{12}$, $\rho_\alpha^{(M)} = \rho_{3\alpha}$, $\rho_\alpha^{(T)} = \rho_\alpha$, $\rho_\alpha^{(c)} = \rho_\alpha^D$, $\alpha=1, 2$.

При этом $a_\alpha^{(z)}$, $b_\alpha^{(z)} = O((h_\alpha L)^{-1}) > 0$, $R_\alpha^{(z)}$, $S_\alpha^{(z)} = O(h_\alpha L)$, $L = \mathrm{Re}, \mathrm{Pe}, \mathrm{Pe}_D$.

Введем $\varkappa_\alpha^{(z)} = \max(|R_\alpha^{(z)}|, |S_\alpha^{(z)}|)$, положим $\rho_\alpha^{(\omega)} = \max(\theta_1^{(\omega)}, \theta_2^{(\omega)})$, $\theta_\alpha^{(\omega)} = (\varkappa_\alpha^{(\omega)})^2/(1+\varkappa_\alpha^{(\omega)})$, $\rho_\alpha^{(z)} = (\varkappa_\alpha^{(z)})^2/(1+\varkappa_\alpha^{(z)})$, $z=M, T, c$. Все $\rho_\alpha^{(z)} = O(h_\alpha^2) \to 0$ при $h_\alpha \to 0$, $\alpha=1, 2$, $z=\omega, M, T, c$. Если окажется, что $|\varkappa_\alpha^{(z)}| < 1$, то можно положить $\rho_\alpha^{(z)} = 0$.

Для выбранных $\rho_\alpha^{(z)}$, $\alpha=1, 2$, $z=\omega, M, T, c$ коэффициенты A^α, C^α (и B^α) положительны и схема является монотонной. В расчетах задачи о течении жидкости в квадратной каверне с подвижной верхней стенкой не возникало пилообразных решений при больших h_α, Re и $\rho_{12} \equiv 0$. В некоторых из приведенных ниже расчетах полагалось $\rho_{12} \equiv 0$, но $\rho_{3\alpha}$, ρ_α, $\rho_\alpha^D \not\equiv 0$, $\alpha=1, 2$. Однако все расчеты технологических вариантов велись с $\rho_{12} \not\equiv 0$.

Заменим в исходных уравнениях дифференциальные выражения их сеточными аналогами. Приходим к схеме, свойства которой описаны в [17].

Рассмотрим схему для метода переменных направлений. Для $z=M, T, c$ имеем

$$\frac{z^{j+1/2} - z^j}{0{,}5\tau} = L_{z1}^h(\psi^j)(z^{j+1/2}) + L_{z2}^h(\psi^{j-1})(z^j),$$

$$\frac{z^{j+1} - z^{j+1/2}}{0{,}5\tau} = L_{z1}^h(\psi^j)(z^{j+1/2}) + L_{z2}^h(\psi^j)(z^{j+1}).$$

Эту систему запишем в виде

$$L_{z\alpha}^h(\psi^j) z^{j+\alpha/2} - 2z^{j+\alpha/2}/\tau = -F^{j+\alpha/2}, \quad \alpha = 1, 2.$$

Для $F^{j+\alpha/2}$ из уравнений (13) следуют рекуррентные формулы $F^{j+\alpha/2} = -F^{j+(\alpha-1)} + 4z^{j+(\alpha-1)/2}/\tau$, $\alpha=1, 2$. Начальное значение $F^0 = 2z^0/\tau - L^h_{z2}(\psi^0)(z^0)$.

Подобные же уравнения и рекуррентные формулы записываются для определения функций $\omega^{j+1/2}$, ω^{j+1}. Счет был организован следующим образом. С помощью прогонок находились функции $T^{j+1/2}$, $M^{j+1/2}$ (по ψ^j, T^j, M^j), затем $\omega^{j+1/2}$ (по ψ^j, $T^{j+1/2}$, $M^{j+1/2}$, $S^h(\psi^j)$) и далее T^{j+1}, M^{j+1} (по ψ^j, $T^{j+1/2}$, $M^{j+1/2}$), ω^{j+1} (по ψ^j, $T^{j+1/2}$, M^{j+1}, $S^h(\psi^j)$). Граничные значения $\omega^{j+1/2}$, ω^{j+1} вычислялись по ψ^j с помощью формул Тома [18]. Уравнение для ψ^{j+1} решалось методом переменных направлений с использованием рекуррентных формул и выбором итерационных параметров по Жордану [19].

В пристеночных областях сильно измельчался шаг сетки ($h_\alpha \sim 0{,}3/\sqrt{\mathrm{Re}}$). Задача для концентрации рассчитывалась отдельно от основной задачи методом переменных направлений (методом, описанным в работе [20] для летучих примесей). Предварительно проводилось дополнительное измельчение сетки в подкристальной области с соответствующей интерполяцией функции ψ.

По описанной методике был составлен комплекс программ. Время счета одного варианта при числе узлов сетки 41×41 на ЭВМ БЭСМ-6 составляет 1,5—2 ч машинного времени. Расчет заканчивается при выходе баланса тепла и течения (функция ψ) на стационарный режим.

Сопоставление расчетов с результатами физического моделирования

В [21] представлены картины течения этилового спирта в кварцевом тигле под действием вращающегося на поверхности жидкости диска. На сетке 31×31 были проведены расчеты двух течений с $\rho_{12}=0$ при $R_т/R_к=2{,}76$, $H/R_т=1$ для $\mathrm{Re}=1700$ и $\mathrm{Re}=2000$ [13]. Получено хорошее качественное совпадение с экспериментом. При $r=R_к/2$ наблюдается хорошее совпадение с решением Кохрана [14] в пограничном слое.

Проводилось сопоставление расчета с результатами эксперимента из [22], где представлена зависимость окружной скорости при $r=R_т/2$, $z=H/2$ от времени в переходном процессе, когда вращающийся заполненный жидкостью и закрытый крышками цилиндр ускоряется скачком от угловой скорости Ω до $\Omega+\Delta\Omega$. Эксперимент обнаружил в переходном режиме слабые колебания окружной скорости. Расчет повторяет все эти колебания [13].

Кроме того, проводилось сравнение результатов расчетов и некоторых измерений в технологических экспериментах. Сравнивались расчетные и экспериментальные температуры в отдельных фиксированных точках подкристальной области расплава германия (Ge) и арсенида галлия (GaAs), а также на оси расплава GaAs. Кроме этого, сопоставлялось распределение концентрации галлия и кислорода вдоль радиуса кристалла германия и кремния, распределение окружной скорости на поверхности расплава GaAs и т. д. Имеется хорошее качественное, а иногда и количественное совпадение.

Численное исследование технологических режимов выращивания монокристаллов германия

В начале расчета задается покоящаяся жидкость: $\psi=0$, $\omega=0$, $M=0$ с постоянной температурой $T^0=0{,}5$ ($\min\limits_{\Gamma} T=0$, $\max\limits_{\Gamma} T=1$). Далее жидкость начинает раскручиваться вращающимся кристаллом и тиглем, изменяется ее температура, возникает подкристальный вихрь (рис. 4, *а*). Если кристалл вращается быстро ($\Omega_к=60$ мин$^{-1}$, $R_к=21{,}5$ мм, $\mathrm{Re}=21\,513$), мало отношение $\mathrm{Gr}/\mathrm{Re}^2=0{,}23$ ($\mathrm{Gr}=1{,}06\cdot10^8$), то при $\Omega_т=-5$ мин$^{-1}$ образовавшееся течение с подкристальным вихрем устанавливается. Линии тока и изотермы такого течения приведены на рис. 5 (см. [8, 13]). Если кристалл вращается медленно ($\Omega_к=20$ мин$^{-1}$), велико число $\mathrm{Gr}/\mathrm{Re}^2\approx2\div4$, то подкристальный вихрь исчезает (рис. 4, *б*, *в*). Частота вращения расплава, большая у оси, замедляется у дна тигля ($\Omega_т=-5$ мин$^{-1}$), где возникает придонно-осевой вихрь. За счет естественной конвекции (температура дна тигля больше $T_{кр}$) придонно-осевой вихрь увеличивается по направлению к кристаллу. Однако при малом $\Omega_к$ ($\Omega_к=20$ мин$^{-1}$) и сильном основном течении этот вихрь не достигает кристалла. Течение устанавливается при конфигурации, изображенной на рис. 4, *г*. Если же вращение кристалла достаточно сильно тормозит основное течение ($\Omega_к=30$ мин$^{-1}$), то придонно-осевой вихрь достигает кристалла. Образуется подкристальный «столб» (см. рис. 4, *д*). Такое течение в ряде случаев выходит на стационарный режим (в частности при малой загрузке). Однако возможна и дальнейшая трансформация течения. Основная масса расплава вращается в ту же сторону, что и тигель, лишь узкая подкристальная зона вращается в направлении кристалла. В подкристальной области имеется поверхность с $\Omega=0$ (рассматривается лишь случай противовращения кристалла и тигля). У этой поверхности вращение жидкости замедляется и у оси образуется слабый вихрь (рис. 4, *е*). Этот вихрь объединяется с основным течением (рис. 4, *ж*). Струя жидкости основного течения вдоль оси расплава опускается до дна тигля, образуя у оси симметрии дополнительный вихрь, отделенный придонным вихрем от основного течения (рис. 4, *з*). Течение становится стационарным. При малом радиусе кристалла $R_к$ наблюдалось также стационарное течение, изображенное на рис. 4, *и*. Таким образом стационарные течения, наблюдавшиеся в расчетах, имели вид, изображенный на рис. 4, *а*, *г*, *д*, *з*, *и*. В ряде случаев у боковой стенки тигля (у дна и поверхности расплава) возникают слабые вихри, исчезающие при счете на трубых сетках. При больших отношениях $\mathrm{Gr}/\mathrm{Re}^2$ в жидкости возникают колебания, стационарное течение отсутствует.

Характер распределения примеси вдоль радиуса кристалла зависит от характера течения жидкости в подкристальной области и определяется решением задачи (9) (формулой (10)). В тех точках поверхности кристалла (фронта кристаллизации), где происходит остановка набегающего потока, наблюдается наибольшая толщина пограничного слоя, и, как следует из (10), наибольшая (при $k_0>$

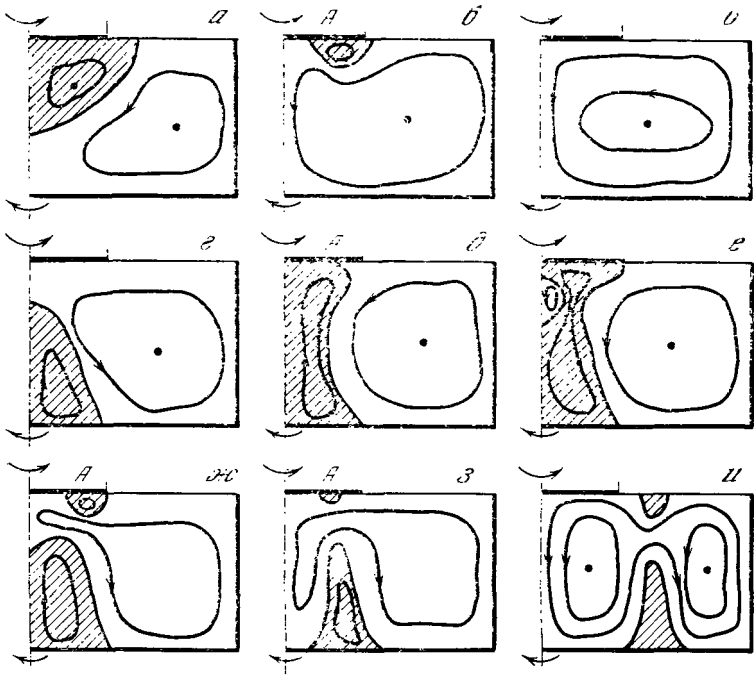


Рис. 4. Различные картины течения расплава

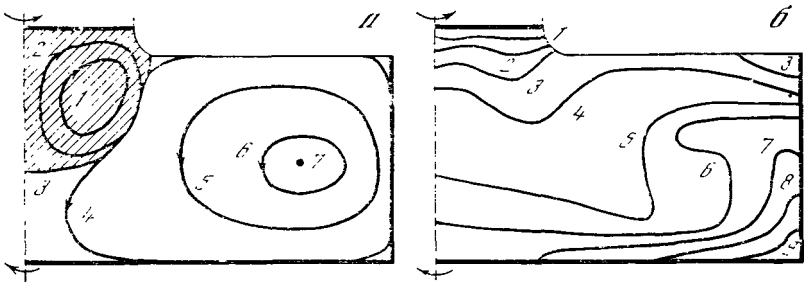
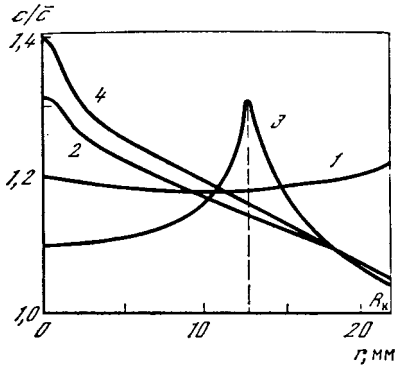


Рис. 5. Распределения функции тока ψ (*а*) и температуры T (*б*) в расплаве германия при выращивании монокристалла диаметром 43 мм ($\Omega_к = 60$ мин$^{-1}$, $\Omega_т = -5$ мин$^{-1}$)

ψ, м^3/с: *1* — $-6{,}2\cdot10^{-8}$; *2* — $-3{,}1\cdot10^{-7}$; *3* — 0; *4* — $6{,}2\cdot10^{-8}$; *5* — $6{,}2\cdot10^{-7}$; *6* — $1{,}2\cdot10^{-5}$; *7* — $1{,}9\cdot10^{-5}$; T, °C: *1*—941; *2*—945; *3*—949; *4*—953; *5*—957; *6*—961; *7*—965; *8*—969; *9*—973

>1) или наименьшая (при $k_0<1$) концентрация (точки A на рис. 4). На рис. 6 показаны рассчитанные распределения примеси (галлия) при $k_0=0{,}087$ по радиусу кристалла для течений, изображенных на рис. 4, *а*, *г*, *д*, *з*. Для кривых *2*—*4* разброс концентраций $\delta c \approx 14\%$. При наличии подкристального вихря течение в подкристальной области однородно, изотермы гладкие (см. рис. 5, *б*).



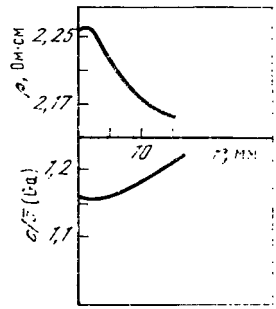


Рис. 6. Радиальные распределения (*1—4*) легирующей примеси (галлия) на фронте кристаллизации для различных картин течения расплава (см. рис. 4, *а, г, д, з*)

Рис. 7. Результаты сравнения расчета (внизу) радиального распределения примеси с экспериментом (вверху)

Вблизи кристалла течение подобно течению около бесконечного вращающегося диска, когда $\delta_к(r)=\text{const}$. В этом случае разброс концентраций ($\delta c \approx 2{,}5\%$) минимален. На рис. 7 приведены для данного случая относительная концентрация и экспериментальное значение удельного электрического сопротивления $\rho(r)$, Ом·см. Известно, что $\rho \approx 1/c$. Таким образом, для получения монокристаллов с малым разбросом концентрации легирующей примеси δc по радиусу слитка необходимо наличие подкристального вихря, что достигается увеличением $\Omega_к$, уменьшением $\Delta T = \max\limits_{r_т} T - T_к$ (уменьшением Gr/Re^2, рассчитываемым по $R_к$, $\Omega_к$).

Анализ распределения кислорода в расплаве кремния

Кислород относится к числу примесей, вызывающих различные дефекты в бездислокационных монокристаллах кремния. Поэтому желательно уменьшить его содержание в кристалле, с другой стороны, в ряде случаев несущественно количество кислорода в кремнии, важно лишь иметь его равномерное распределение по радиусу. Источником кислорода является кварцевый тигель, частично растворяющийся в расплаве. Кислородосодержащие соединения транспортируются конвективными потоками и диффузией в подкристальную область, легируя растущий кристалл.

Кислород является летучей примесью, интенсивно испаряющейся с поверхности расплава. Поэтому при разработке технологических режимов выращивания монокристаллов целесообразно формировать потоки так, чтобы после омывания стенок тигля они транспортировали кислород к свободной поверхности, обеспечивающей его испарение ($c|_{r_р}=0$, $c|_{r_т}=1$).

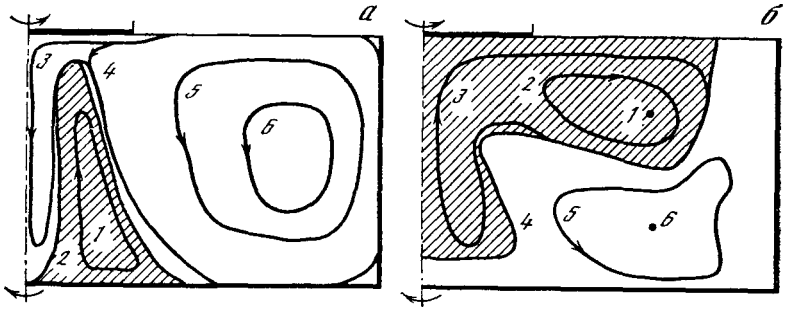


Рис. 8. Режимы течения расплава кремния (поля функции тока ψ, м^3/с)

а — взаимодействие естественной и вынужденной конвекции (режим 1): *1* — $\psi=-6{,}7\cdot10^{-6}$; *2* 0; *3* — $5\cdot10^{-9}$; *4* — $1{,}7\cdot10^{-8}$; *5* — $6{,}7\cdot10^{-9}$; *6* — $1{,}2\cdot10^{-5}$;

б — действие вынужденной конвекции в изотермическом расплаве (режим 2): *1* — $\psi=-5{,}7\cdot10^{-7}$; *2* — $1{,}7\cdot10^{-7}$; *3* — $-8{,}4\cdot10^{-9}$; *4* — 0; *5* — $1{,}7\cdot10^{-7}$; *6* — $4\cdot10^{-7}$

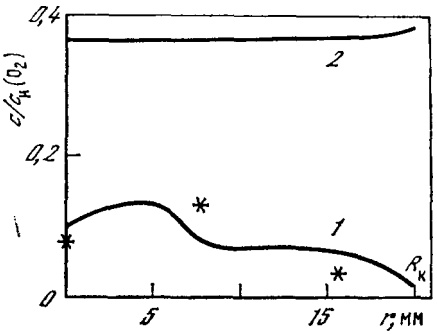


Рис. 9. Радиальное распределение концентрации кислорода на фронте кристаллизации для режима 1 (*1*) и режима 2 (*2*)

Звездочки — экспериментальные данные

На рис. 8, *а*, *б* приведены результаты расчета течения в расплаве для двух режимов [9]. Графики распределения концентрации кислорода вдоль радиуса кристалла приведены на рис. 9. В первом режиме (см. рис. 8, *а*) ($Re=3360$, $Gr=1{,}1\cdot10^7$, $Pr=1{,}1\cdot10^{-2}$, $Pr_D=25$) кислород попадает в подкристальную область, пройдя предварительно вдоль свободной поверхности. Испарение с поверхности расплава уменьшает его содержание в кристалле по сравнению с режимом течения, изображенным на рис. 8, *б*, когда температура постоянна ($Gr=0$) и кислород транспортируется к кристаллу от дна тигля. В этом случае разброс кислорода по радиусу кристалла минимален из-за наличия устойчивого подкристального вихря.

Естественная конвекция в магнитном поле

При больших числах Gr и (Gr/Re^2) тепловая конвекция приводит к нестационарным течениям. Для получения стационарных течений при больших Gr, а также с целью изменения конфигурации течения на расплав можно воздействовать магнитным полем. Был проведен расчет, показывающий сильное уменьшение скорости течения и изменение положения центра основного вихря при наложении магнитных полей разной интенсивности. Расчет проводился для модельной задачи — изучалось поведение расплава соединения

(67% Ga, 20,5% In, 12,5% Sn) [13] при $Re=1$, $Pr=2{,}26\cdot10^{-2}$, $Gr=8{,}08\cdot10^{5}$, $Ma=0$ с постоянными температурами на боковой стенке тигля и кристалле. На поверхности расплава и дне тигля отсутствовал тепловой поток. Расчеты велись для однородного магнитного поля с одной компонентой B_z, изменяющейся от 0 до 0,6 Тл. В правую часть уравнения для ω вводился дополнительный член, учитывающий влияние магнитного поля на течение. При введении числа Гартмана $Ha=R_к B_z\sqrt{\sigma/\rho\nu}$ (где $\sigma=3{,}25\times\times10^{6}$ (Ом·м)$^{-1}$ — проводимость расплава, $\rho=6397$ кг/м^3 — плотность) это слагаемое имело вид $(-(Ha)^2/Re)r^{-2}\partial^2\psi/\partial z^2$ ($Re=1$). Число На варьировалось от 0 до 350. При увеличении числа На центр основного вихря перемещался вверх. Максимальное значение функции тока изменялось от $1{,}4\cdot10^{-6}$ до $36{,}2\cdot10^{-10}$ м^3/с. Особенно сильное изменение скорости течения наблюдается при изменении B_z на участке от 0 до 0,2 Тл. Зависимость горизонтальной компоненты $v^{(r)}$ скорости в точке под кромкой кристалла от числа На представлена на рис. 10. Влияние магнитного поля на течение значительно.

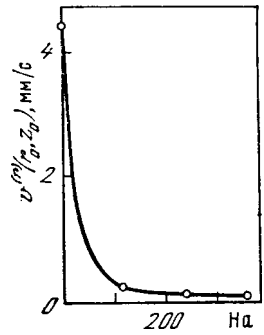


Рис. 10. Зависимость горизонтальной компоненты скорости в точке под кромкой кристалла от числа Гартмана

Моделирование процессов выращивания монокристаллов арсенида галлия

При выращивании монокристаллов GaAs часто приходится решать задачу обеспечения устойчивого роста, особенно в процессе роста кристалла. Устойчивость роста — это отсутствие дендритной кристаллизации расплава либо срывов монокристаллического роста в заданном кристаллографическом направлении (образование двойников, поликристаллической структуры и т. д.). Выращивание GaAs происходит из-под слоя флюса. В связи с этим следует изменить краевые условия, определяющие течение на свободной поверхности расплава. В эксперименте было замечено, что при больших $R_к$ под флюсом не наблюдается радиальное течение жидкости. Поэтому на $\Gamma_р$ положили $\psi=0$, $\partial\psi/\partial n=0$ и аппроксимировали второе условие по формуле Тома. Как и ранее, $\partial\Omega/\partial n=0$ на $\Gamma_р$. Рассчитанные частоты вращения Ω на $\Gamma_р$ хорошо согласуются с экспериментом. При малых $R_к$ (в процессе разрастания кристалла) наличие флюса игнорировали.

В натурных технологических экспериментах [10] изменялись способы подвода тепла к расплаву, параметры роста, масса расплава в тигле. Из расчетов, проведенных для таких условий, особенно полезной оказалась информация о характере тепловых потоков с поверхностей расчетной области ($\Gamma_р$, $\Gamma_т$). Анализ результатов позволил целенаправленно изменить конструкцию теплового

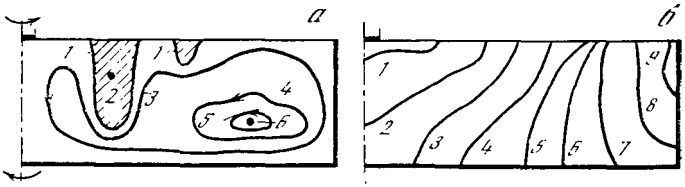


Рис. 11. Распределения функции тока ψ (*а*) и температуры T (*б*) в расплаве арсенида галлия в момент затравления кристалла

ψ, м³/с: *1* — 0; *2* — —6,6·10⁻⁸; *3*—6,6·10⁻⁸; *4* — 3,3·10⁻⁷; *5*—6,6 · 10⁻⁷; *6*—7,3 · 10⁻⁷;
T, °С: *1*—1239,6; *2*—1241,2; *3*—1242,8; *4*—1244,4; *5*—1246; *6*—1247,6; *7*—1249,2; *8*—1250,8; *9*—1252,4

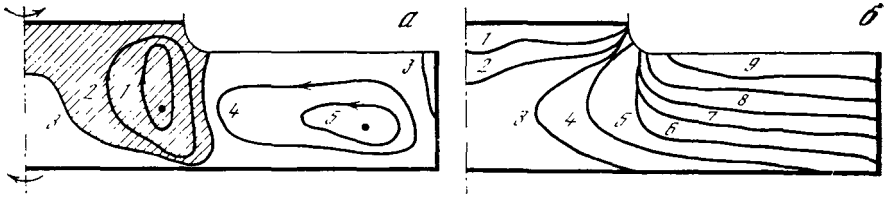


Рис. 12. Распределения функции тока ψ (*а*) и температуры T (*б*) в расплаве арсенида галлия при выращивании монокристалла диаметром 60 мм

ψ, м³/с: *1* — —2,3·10⁻⁸; *2* — —2,3·10⁻⁹; *3* — 0; *4* — 1,1·10⁻⁸; *5* — 4,5 · 10⁻⁸;
T, °С: *1* 1238,45; *2* 1238,9; *3* 1239,35; *4*—1239,8; *5*—1240,25; *6*—1240,7; *7*—1241,15; *8*—1241,7; *9*—1242,05

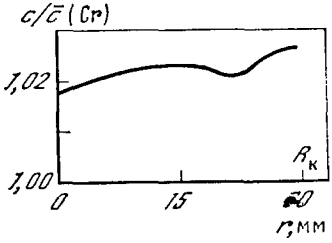


Рис. 13. Радиальное распределение концентрации хрома при выращивании монокристалла арсенида галлия диаметром 60 мм

узла установки выращивания монокристаллов арсенида галлия по Чохральскому.

Остановимся подробнее на стадии затравления кристалла. В эксперименте [10] были измерены температуры на границах расплава ($\Gamma_р \bigcup \Gamma_т$) в случаях: 1) неустойчивого монокристаллического роста в заданном кристаллографическом направлении; 2) неустойчивого роста при наличии дендритов. Численные исследования этих опытов не приводили к стационарным решениям. Были обнаружены колебания тепловых потоков с $\Gamma_р$, $\Gamma_к$, $\Gamma_т$, изменялись и картины течения. В первом случае подкристальная область была значительно перегрета, колебания температур могли вызвать двойникование. Во втором случае температура расплава вблизи кристалла мало отличалась от $T_{кр}$. При этом колебания температуры

могли вызвать переохлаждение и, как следствие, рост дендритов.

Предыдущие расчеты показали, что стабилизирующим фактором является уменьшение комплекса Gr/Re^2. При малом радиусе кристалла (затравки) его влияние на течение в тигле ничтожно. Течение определяется вращением тигля и естественной конвекцией. Поэтому в качестве обезразмеривающих параметров брались $R_0=R_т$, $t_0=1/\Omega_т$. В этом случае $Gr/Re^2=k_т\Delta T/\Omega_т^2$, где $k_т=\beta g/R_т$. Был поставлен эксперимент, в котором ΔT — разность между $T_{кр}$ и средней температурой дна — была уменьшена в 2 раза, а скорость $\Omega_т$ увеличена в 3 раза по сравнению с предыдущими двумя экспериментами. Величина Gr/Re^2 уменьшилась в 18 раз. Это привело к стабилизации течения как в эксперименте, так и в расчете.

На рис. 11, *а*, *б* приведены линии тока и изотермы в процессе затравления монокристалла GaAs, на рис. 12, *а*, *б* — линии тока и изотермы в расплаве GaAs ($R_к=30$ мм). Распределение примеси (хрома) по радиусу кристалла, полученное в расчете, показано на рис. 13.

Выращивание монокристаллов из тигля с подпиткой

В основной тигель погружают небольшой тигель (плавающий тигель, $\Omega_т=0$), из которого выращивают кристалл. В центре дна плавающего тигля имеется отверстие, через которое в него поступает расплав (подпитка) из основного тигля.

Проводились расчеты модельной задачи о течении жидкости в плавающем тигле ($Re=7150$, $Gr=2{,}7\cdot10^7$) [13]. Все температурные данные были взяты из эксперимента выращивания монокристалла германия в обычном процессе Чохральского. В отверстии была задана скорость $v^{(2)}$ поступления расплава, рассчитанная по расходу вещества, и определена функция $\psi(r)$.

В расчетах был обнаружен то появляющийся, то исчезающий слабый вторичный вихрь у оси расплава на поверхности кристалла. Присутствие или отсутствие приосевого вихря существенно сказывается на характере распределения примеси вблизи оси симметрии. Разброс δc колеблется от 14 до 37%.

Заключение

Проведенные исследования, часть которых описана в данной работе, позволили выработать определенные представления о характере течения расплава в процессах выращивания монокристаллов полупроводниковых материалов по Чохральскому и дать некоторые рекомендации по совершенствованию процессов получения монокристаллов германия и арсенида галлия.

Авторы благодарят А. А. Самарского за постоянное внимание к работе и поддержку, а также сотрудников института Гиредмет О. М. Алимова, В. И. Биберина и Л. Н. Титюника за предоставленные результаты экспериментов и обсуждение полученных данных.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Kobayashi N.* Hydrodynamics in Czochralski growth — computer analysis and experiments.— J. Cryst. Growth, 1980, vol. 52, p. 425—434.
2. *Langlois W. E.* A parameter sensitivity study for Czochralski bulk flow of silicon.— J. Cryst. Growth, 1982, vol. 56, p. 15—19.
3. *Полежаев В. И., Простомолотов А. И.* Исследование процессов гидродинамики и тепломассообмена при выращивании кристаллов методом Чохральского.— Изв. АН СССР. МЖГ, 1981, № 1, с. 55—65.
4. *Люмкис Е. Д., Мартузан Б. Я., Мартузане Э. Н.* Численные исследования нестационарных гидродинамических и тепловых процессов в методе Чохральского.— Изв. АН СССР. Сер. физ., 1980, т. 44, № 2, с. 373—377.
5. *Люмкис Е. Д., Мартузане Э. Н., Мартузан Б. Я.* К численному расчету потоков вязкой жидкости с вращением, гравитационной и термокапиллярной конвекцией.— В кн.: Прикладные задачи теоретической и математической физики. Рига: Латв. ун-та им. П. Стучки, 1980, с. 20—33.
6. *Старшинова И. В., Фрязинов И. В.* Численное исследование гидродинамических и тепловых процессов получения монокристаллов по методу Чохральского: Препр. ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР № 52. М., 1982. 21 с.
7. *Старшинова И. В., Фрязинов И. В.* Постановка и численное исследование задачи о распределении легирующей примеси в процессе получения монокристаллов методом Чохральского: Препр. ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР № 94. М., 1982. 27 с.
8. *Смирнов В. А., Старшинова И. В., Фрязинов И. В.* Анализ распределений скоростей, температур и концентрации легирующих примесей в расплаве при выращивании монокристаллов по Чохральскому.— В кн.: Рост кристаллов. М.: Наука, 1983, т. 14, с. 124—135.
9. *Смирнов В. А., Старшинова И. В., Фрязинов И. В.* Анализ распределения кислорода в расплаве кремния.— Кристаллография, 1984, т. 29, № 3, с. 560—565.
10. *Бибрин В. И., Освенский В. Б., Смирнов В. А.* и др. Исследование гидродинамики расплава в процессе выращивания арсенида галлия по Чохральскому из-под слоя флюса.— Кристаллография, 1985, т. 30, № 5, с. 980—985.
11. *Алимов О. М., Гончаров Л. А., Зейналов Д. А.* и др. К вопросу о флуктуациях температуры расплава и микронеоднородности удельного сопротивления при выращивании монокристаллов.— В кн.: III Всесоюз. семинар по гидромеханике и тепломассообмену в невесомости: Тез. докл. Черноголовка: ИХФ АН СССР, 1984, с. 207.
12. *Алимов О. М., Смирнов В. А., Старшинова И. В.* и др. Численный анализ тепловых условий выращивания монокристаллов по Чохральскому.— В кн.: Материалы IX совещ. по получению профилированных кристаллов и изделий способом Степанова и их применению в народном хозяйстве. Л.: ЛИЯФ, 1982, с. 94—99.
13. *Старшинова И. В.* Процессы тепло- и массопереноса в расплаве при выращивании монокристаллов по Чохральскому: Автореф. дис. ... канд. техн. наук/ Гиредмет. М., 1983. 22 с.
14. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Механика сплошных сред. М.: Гостехтеориздат, 1954. 795 с.
15. *Воронков В. В., Гришин В. П., Лайнер Л. В.* Испарение углерода из расплава при выращивании монокристаллов кремния.— Изв. АН СССР. Неорган. материалы, 1982, т. 18, № 9, с. 1440—1443.
16. *Ремизов И. А.* Численное моделирование концентрационных полей легирующей примеси в расплаве при выращивании монокристаллов методом Чохральского.— Физика и химия обраб. материалов, 1980, № 2, с. 38—45.
17. *Бакирова М. И., Старшинова И. В., Фрязинов И. В.* Консервативные монотонные разностные схемы для уравнений Навье — Стокса.— Дифференц. уравнения, 1982, т. 18. № 7, с. 1144—1150.
18. *Роуч П.* Вычислительная гидродинамика. М.: Мир. 1980. 616 с.
19. *Самарский А. А., Николаев Е. С.* Методы решения сеточных уравнений. М.: Наука, 1978. 592 с.
20. *Strikwerda J.* Iterative methods for the numerical solution of second order ellip-

tic equation with large first order terms.— SIAM J. Sci. Stat. Comput., 1980, vol. 1, p. 119—130.
21. *Бердников В. С., Борисов В. Л.* Экспериментальное моделирование гидродинамики расплава при выращивании монокристаллов методом Чохральского.— В кн.: Научные труды Ин-та теплофизики СО АН СССР. Новосибирск, 1981, с. 96—106.
22. *Warn-Varnas A., Fowlis W. W., Piacsek S., Lee S. M.* Numerical solution and laser — Doppler measurements of spin-up.— J. Fluid Mech., 1978, vol. 85, N 4, p. 609—639.

УДК 548.55 : 519.96

О ВЗАИМОСВЯЗИ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОЙ УСТОЙЧИВОСТИ РАСПЛАВА И РАДИАЛЬНОЙ ПРИМЕСНОЙ НЕОДНОРОДНОСТИ В КРИСТАЛЛАХ

Д. А. Зейналов, И. В. Старшинова, Л. Н. Титюник, М. А. Филиппов

Получение полупроводниковых материалов с заданной концентрацией и высокой однородностью распределения легирующей примеси для производства сверхбольших интегральных схем (СБИС), мощных высоковольтных диодов и тиристоров, различных фотопреобразователей определяет важность изучения влияния технологических режимов выращивания монокристаллов, в том числе и по методу Чохральского, на радиальную неоднородность удельного электрического сопротивления (РНУЭС). Использование с этой целью численного моделирования полей скоростей, температур и концентраций легирующей примеси и их влияния на РНУЭС существенно упрощает эксперимент и позволяет значительно повысить эффективность проводимых исследований.

Анализ результатов численного моделирования показывает, что на перенос тепла и легирующей примеси в расплаве, помимо теплопроводности и диффузии, значительное влияние оказывают естественная и вынужденная конвекции [1].

Созданию в расплаве оптимальных конвективных потоков, благоприятно влияющих на РНУЭС в выращиваемых монокристаллах, в последние годы уделяется много внимания [2—5].

В работах [2, 3] показано, что основной причиной повышенной радиальной неоднородности концентрации легирующей примеси в кристалле при соблюдении оптимальных технологических режимов выращивания является асимметрия температурного поля в рабочей зоне установки, которая вызывает трехмерные течения в расплаве и, как следствие, колебания температуры, обусловливающие в свою очередь колебания скорости кристаллизации, что приводит к неоднородности распределения легирующей примеси в растущем кристалле.

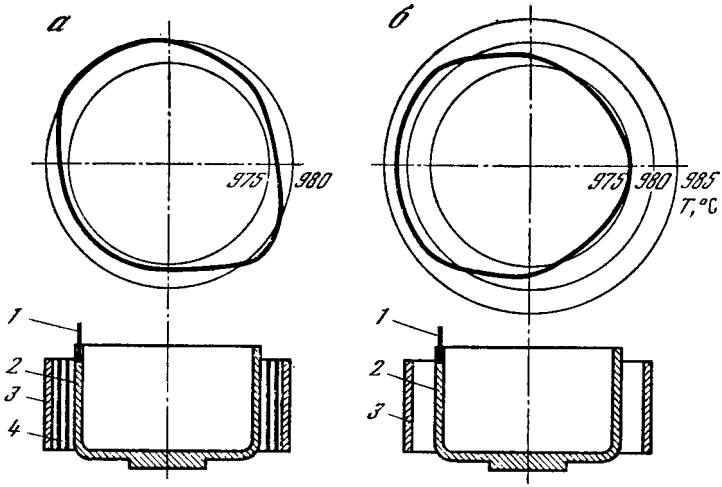


Рис. 1. Розетки температуры при использовании ВТТ (*а*) и в стандартном тепловом узле (*б*)

1 — термопара *2* — тигель; *3* — нагреватель; *4* — тепловая труба

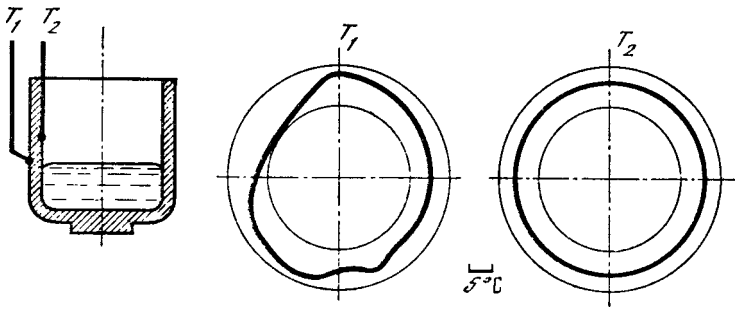


Рис. 2. Розетки температуры на установке EKZ 450/1500

Однако на стадиях затравления кристалла и выхода его на заданный диаметр колебания температуры сохранялись. Это наблюдалось при выращивании монокристаллов как германия, так и арсенида галлия и, видимо, являлось причиной срыва монокристаллического роста. Поэтому следующим этапом было изучение режимов выращивания, обеспечивающих устойчивый рост монокристалла, т. е. отсутствие дендритной кристаллизации расплава и срывов монокристаллического роста в заданном кристаллографическом направлении.

На установке выращивания монокристаллов арсенида галлия при различных технологических режимах выращивания и различных конструкциях нагревателей термопарами фиксировались температурные граничные условия на стадии затравления кристалла.

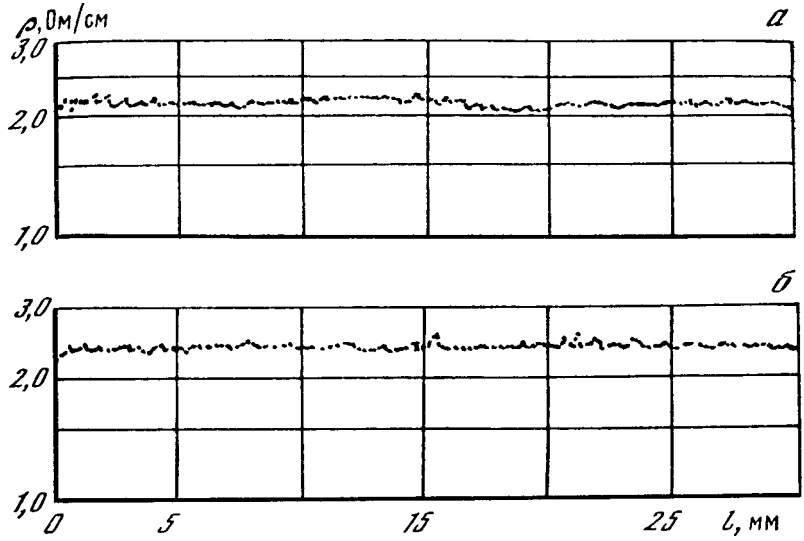
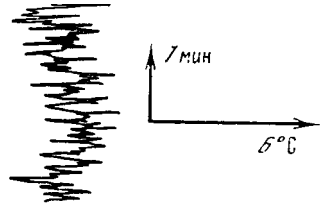


Рис. 3. Разброс удельного электрического сопротивления по радиусу монокристаллов германия, выращенных на установках «Редмет-10» с использованием ВТТ (*а*) и EKZ 450/1500 (*б*)

Рис. 4. Термограмма изменения температуры во времени



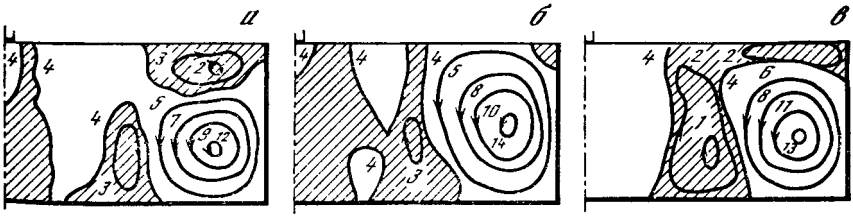
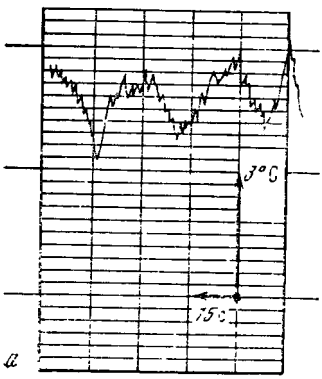


Рис. 5. Картины течения расплава германия в различные моменты времени процесса затравления

Ф, м³/с: *1* — $-1{,}71\cdot10^{-6}$; *2* — $-1{,}87\cdot10^{-7}$; *3* — $-5{,}7\cdot10^{-7}$; *4* — 0; *5* — $9{,}8\cdot10^{-7}$; *6* — $1{,}6\cdot10^{-6}$; *7* — $2{,}45\times10^{-6}$; *8* — $3{,}3\cdot10^{-6}$; *9* — $4{,}08\cdot10^{-6}$; *10* — $4{,}99\cdot10^{-6}$; *11* — $5{,}23\cdot10^{-6}$; *12* — $5{,}39\cdot10^{-6}$; *13* — $6{,}7\cdot10^{-6}$; *14* — $7{,}2\cdot10^{-6}$

В одном из режимов наблюдался неустойчивый рост монокристалла, а в другом появлялись дендриты. В обоих случаях экспериментально были зафиксированы колебания температуры в расплаве. При математическом моделировании этих режимов также не было получено устойчивого стационарного решения. Колебались поля функции тока, картины течения расплава и температурные поля в расплаве. Экспериментально снятое значение температуры расплава вблизи растущего кристалла незначительно превышало значение температуры кристаллизации, поэтому любые колебания температуры в подкристальной области расплава могли привести к его переохлаждению и, как следствие, к дендритной кристаллизации слитка. На рис. 4 приведена термограмма изменения температуры в точке, расположенной на глубине 3—5 мм от поверхности расплава и на расстоянии 15 мм от оси тигля. Подобные низкочастотные колебания были отнесены на счет гидродинамической неустойчивости расплава, которое удалось стабилизировать повышением частоты вращения тигля до 15 мин$^{-1}$ вместо 5 мин$^{-1}$, т. е. уменьшением критерия $Ar = Gr/Re^2$, что позволило обеспечить устойчивый рост монокристаллов на начальной стадии выращивания. Перераспределение температур вблизи фронта кристаллизации способствовало быстрому увеличению диаметра кристалла до заданных размеров [12].

При расчете на ЭВМ технологических вариантов выращивания монокристаллов германия на стадии затравления были обнаружены колебания и в картинах течения расплава, и в температурных полях. Как изменяется картина течения расплава в процессе затравления монокристалла, показывает рис. 5. В подкристальной области потоки расплава изменяют не только свою величину, но и направление. В центральной придонной части расплава



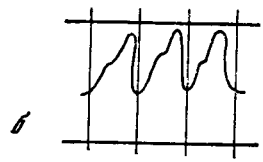


Рис. 6. Экспериментальные (*а*) и расчетные (*б*) колебания температуры в расплаве германия

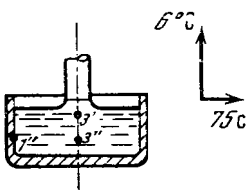
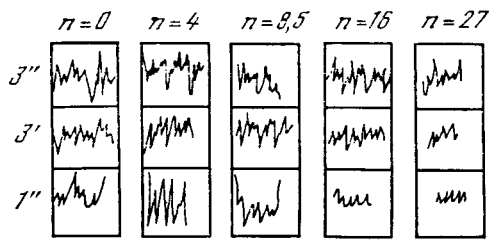


Рис. 7. Термограммы колебаний температуры в расплаве германия при различных частотах вращения n, мин$^{-1}$ тигля



постоянно присутствует вихрь, вращающийся по часовой стрелке (заштриховано). Он то ослабевает и прижимается к дну тигля (рис. 5, *а*), то усиливается и доходит до свободной поверхности расплава (рис. 5, *б*), объединяясь там с вихрем того же направления, вызванным термокапиллярной конвекцией (рис. 5, *в*). Вблизи боковой стенки тигля пульсирует основное ядро расплава, вращающееся против часовой стрелки.

Такое изменение течения расплава, естественно, вызывает колебания и в температурном поле. Для наглядности колебания температуры в одной из точек расплава развернуты по времени и сопоставлены с экспериментально снятыми колебаниями температуры в той же точке (рис. 6). Необходимо отметить, что эти колебания вызваны именно технологическими режимами выращивания монокристаллов германия, так как выращивание проходило с использованием ВТТ и асимметрия тепловых граничных условий была устранена. Возможно, что эти колебания являются причиной срыва монокристаллического роста кристаллов и образования двойников. В процессе затравления монокристаллов германия по аналогии с арсенидом галлия проводились эксперименты при различных частотах вращения тигля (до 27 мин$^{-1}$), но термограммы по-прежнему фиксировали колебания температуры в объеме расплава при стабилизации температуры на стенке тигля (рис. 7).

При сопоставлении технологических параметров и физических констант для устойчивого процесса затравления монокристаллов германия и арсенида галлия было получено, что критерий Ar для германия в 30 раз превышает значение того же критерия для арсенида галлия. Таким образом, для стабилизации течения расплава германия необходимо: 1) уменьшить высоту расплава в тигле; 2) увеличить диаметр тигля; 3) проводить затравление кристалла на затравку возможно большего диаметра; 4) максимально увеличить частоту вращения тигля [12].

ЛИТЕРАТУРА

1. *Смирнов В. А., Старшинова И. В., Фрязинов И. В.* Анализ распределения скоростей, температур и концентраций легирующих примесей в расплаве при выращивании монокристаллов по Чохральскому.— В кн.: Рост кристаллов. М:. Наука, 1983, т. 14, с. 124—135.
2. *Xing Z. I., Kennedy Y. K., Witt A. F.* Segregation behavior during Czochralski growth with radial thermal symmetry.— J. Cryst. Growth, 1982, vol. 59, N 3, p. 659—661.
3. *Martin E. P., Witt A. F., Carruthers J. R.* Application of a heat pipe to Czochralski growth. Pt 1. Growth and segregation behavior of Ga-doped Ge.— J. Electrochem. Soc., 1979, vol. 126, N 2, p. 284—287.
4. *Hirata H., Inoue N.* Study of thermal symmetry in Czochralski silicon melt under a vertical magnetic field.— Jap. J. Appl. Phys., 1984, vol. 23, N 8, p. L227—L530.
5. *Hoshi K.* Growth of silicon monocrystals in a magnetic field.— J. Jap. Appl. Phys., 1984, vol. 53, N 1, p. 38—41.
6. *Алимов О. М., Гончаров Л. А., Зейналов Д. А.* и др. К вопросу о флуктуациях температуры расплава и микронеоднородности удельного сопротивления

при выращивании монокристаллов.— В кн.: III Всесоюз. семинар по гидромеханике и тепломассообмену в невесомости: Тез. докл. Черноголовка: ИХФ АН СССР, 1984, с. 207.
7. Несовершенства в кристаллах полупроводников. М.: Металлургия, 1964. 302 с.
8. *Любалин М. Д., Третьяков В. Н., Кузнецов В. А., Смирнов Ю. М.* Распределение Sb в монокристаллах Ge в зависимости от кристаллографического направления выращивания и глубины легирования.— Изв. АН СССР. Неорган. материлы, 1976, т. 12, № 7, с. 1155—1159.
9. *Третьяков В. Н., Любалин М. Д., Мокиевский В. А.* Радиальное распределение легирующей примеси в различно ориентированных при росте монокристаллах германия.— Изв. АН СССР. Сер. физ., 1980, т. 44, № 2, с. 329—332.
10. *Алимов О. М., Смирнов В. А., Старшинова И. В.* и др. Численный анализ тепловых условий выращивания монокристаллов по Чохральскому.— В кн.: Материалы IX совещ. по получению профилированных кристаллов и изделий способом Степанова и их применению в народном хозяйстве. Л.: ЛИЯФ, 1982, с. 94—99.
11. *Генкина Р. И., Холодный Л. П.* Оценка неоднородности параметров полупроводниковых материалов в условиях, соизмеримых с погрешностью измерения.— Метрология, 1984, № 4, с. 58—63.
12. *Биберин В. И., Освенский В. Б., Смирнов В. А.* и др. Исследование гидродинамики расплава в процессе выращивания арсенида галлия из-под слоя флюса.— Кристаллография, 1985, т. 30, вып. 5, с. 980—985.

УДК 532.516+536.3

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ГИДРОДИНАМИКИ, ТЕПЛО- И МАССООБМЕНА В МОДЕЛИ РОСТА КРИСТАЛЛОВ ПО ЧОХРАЛЬСКОМУ

В. И. Полежаев, А. И. Простомолотов

Введение

Одним из наиболее распространенных способов получения полупроводниковых, оптических, драгоценных и многих других кристаллов является метод Чохральского, заключающийся в вытягивании кристалла из расплава, находящегося в тигле. Совершенство кристаллов зависит от состава расплава и процессов тепло- и массообмена в тигле на стадии, предшествующей кристаллизации. При управлении этими процессами важную роль играет исследование совместного действия естественно-конвективных и вынужденных течений в расплаве, имеющих ряд особенностей, к которым относятся характер подвода тепла к стенкам тигля и его ориентация по отношению к фронту кристаллизации и силе тяжести, наличие вращения границ (кристалла и тигля), а также наличие свободной границы. Важной задачей является также исследование механизмов распределения примесей, влияющих на электрофизические, оптические и другие свойства кристаллов.

Общее состояние вопроса по моделированию гидродинамических процессов при росте кристаллов рассмотрено в обзоре [1]. В статье даны некоторые результаты работ по численному исследованию процессов гидродинамики, тепло- и массообмена, выполненному авторами применительно к методу Чохральского.

1. Математические модели

Численное моделирование осуществляется на основе решения нестационарных уравнений Навье—Стокса совместно с уравнениями переноса тепла и примеси (приближение Буссинеска). Предполагается осевая симметрия течения, учитывается вращение кристалла и тигля, тепловая и концентрационная конвекции в гравитационном поле и на поверхности расплава. При исследовании технологических режимов выращивания кристаллов распределения температуры на стенках тигля, поверхности расплава и в подкристальной области задаются в соответствии с экспериментальными данными.

Взаимодействие расплавленного кремния со стенками кварцевого тигля приводит к появлению кислорода в расплаве, являющегося побочной примесью процесса выращивания и оказывающего значительное влияние на совершенство кристаллов. В математической модели переноса кислорода в расплаве кремния предполагается равномерное поступление кислорода от стенок тигля, его полное испарение на поверхности расплава и отвод кислорода в кристалл.

При построении математических моделей используются две формулировки уравнений Навье—Стокса: одна — относительно (ω, ψ, w)-переменных для численного решения методом конечных разностей (МКР) в односвязных областях простой геометрической формы с прямолинейными границами (рис. 1, *а*), другая — относительно (u, v, p, w)-переменных для решения методом конечных элементов

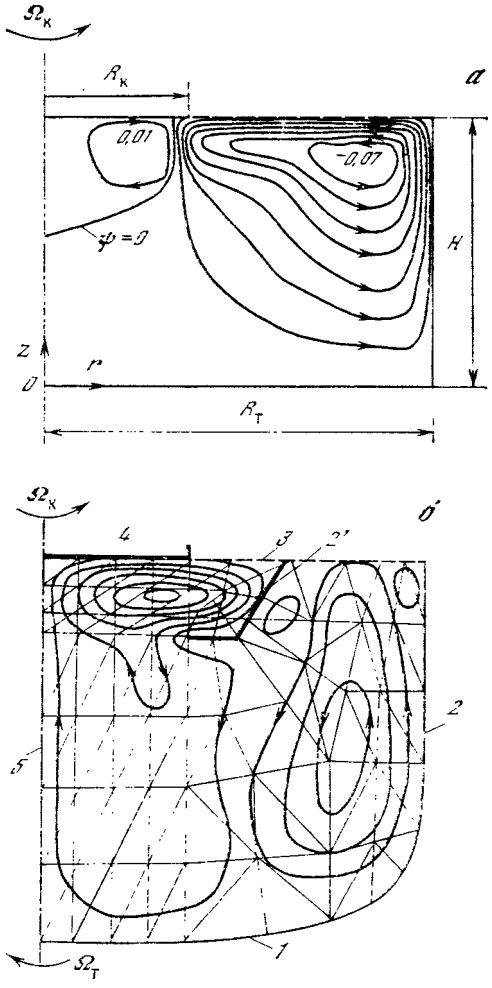


Рис. 1. Математические модели, сетки и линии тока

а — одинарный тигель;
б — двойной тигель (*1* и *2* — дно и боковая стенка тигля соответственно;
2' — стенки внутреннего тигля;
3 — свободная поверхность;
4 — кристалл;
5 — ось симметрии)

(МКЭ) в областях сложной формы, например в двойном тигле (рис. 1, *б*).

В безразмерном виде система уравнений Навье—Стокса в (u, v, p, w)-переменных записывается в виде

$$\begin{gathered}\frac{\partial u}{\partial t}+u\frac{\partial u}{\partial r}+v\frac{\partial u}{\partial z}-\frac{w^2}{r}=-\frac{\partial p}{\partial r}+\frac{1}{\mathrm{Re}}\left(\Delta u-\frac{u}{r^2}\right),\\ \frac{\partial v}{\partial t}+u\frac{\partial v}{\partial r}+v\frac{\partial v}{\partial z}=-\frac{\partial p}{\partial z}+\frac{1}{\mathrm{Re}}\Delta v-\frac{\mathrm{Gr}}{\mathrm{Re}^2}\theta+\frac{\mathrm{Gr}_d}{\mathrm{Re}^2}c,\\ \frac{\partial w}{\partial t}+u\frac{\partial w}{\partial r}+v\frac{\partial w}{\partial z}+\frac{uw}{r}=\frac{1}{\mathrm{Re}}\left(\Delta w-\frac{w}{r^2}\right),\\ \frac{\partial u}{\partial r}+\frac{u}{r}+\frac{\partial v}{\partial z}=0.\end{gathered}\tag{1}$$

Соответственно в (ω, ψ, w)-переменных система (1) имеет следующий вид:

$$\begin{gathered}\frac{\partial\omega}{\partial t}+u\frac{\partial\omega}{\partial r}+v\frac{\partial\omega}{\partial z}-\frac{u\omega}{r}-\frac{1}{r}\frac{\partial(w^2)}{\partial z}=\\ =\frac{1}{\mathrm{Re}}\left(\Delta\omega-\frac{\omega}{r^2}\right)-\frac{Gr}{\mathrm{Re}^2}\frac{\partial\theta}{\partial r}+\frac{\mathrm{Gr}_d}{\mathrm{Re}^2}\frac{\partial c}{\partial r},\\ \Delta\psi-\frac{2}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r}=r\omega,\quad \frac{\partial w}{\partial t}+u\frac{\partial w}{\partial r}+v\frac{\partial w}{\partial z}+\frac{uw}{r}=\frac{1}{\mathrm{Re}}\left(\Delta w-\frac{w}{r^2}\right),\end{gathered}\tag{2}$$

где

$$\omega=\frac{\partial u}{\partial z}-\frac{\partial v}{\partial r},\quad u=\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial z},\quad v=-\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r}.$$

Здесь u, v, w — компоненты вектора скорости; p — давление; ω — вихрь; ψ — функция тока; $\Delta\equiv\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$ — лапласиан скалярной функции. В качестве характерных масштабов выбраны частота вращения $\Omega_к$ и радиус $R_к$ кристалла.

Совместно с системой (1) или (2) решаются уравнения переноса тепла и примеси

$$\frac{\partial\theta}{\partial t}+u\frac{\partial\theta}{\partial r}+v\frac{\partial\theta}{\partial z}=\frac{1}{\mathrm{Re\,Pr}}\Delta\theta,$$

$$\frac{\partial c}{\partial t}+u\frac{\partial c}{\partial r}+v\frac{\partial c}{\partial z}=\frac{1}{\mathrm{Re\,Sc}}\Delta c.$$

Граничные условия в соответствии со схемой математической модели, приведенной на рис. 1, формулируются таким образом:

Γ_1: $w=(\Omega_т/\Omega_к)r$, $u=v=0$ или $\psi=0$, $\partial\psi/\partial z=0$, $\theta=\theta_1$, $c=1$;

Γ_2: $w=(\Omega_т/\Omega_к)r$, $u=v=0$ или $\psi=0$, $\partial\psi/\partial r=0$, $\theta=\theta_2$, $c=1$;

Γ_3: $\partial w/\partial z=0$, $\partial u/\partial z=\varphi$, $v=0$ или $\psi=0$, $\omega=\varphi$ (здесь $\varphi=\frac{\mathrm{Mn}}{\mathrm{Re\,Pr}}\frac{\partial\theta}{\partial r}+\frac{\mathrm{Mn}_d}{\mathrm{Re\,Sc}}\frac{\partial c}{\partial r}\Big)$, $\theta=\theta_3$, или $\partial\theta/\partial z=Q_3$, или $\partial\theta/\partial z=-\mathrm{Bi}(\theta-\theta_0)$, $c=0$;

Γ_4: $w=r$, $u=v=0$ или $\psi=0$, $\partial\psi/\partial z=0$, $\theta=\theta_4$, $\partial c/\partial z=\mathrm{Bi}_d c$;

Γ_5: $w=0$, $u=0$, $\partial v/\partial r=0$ или $\psi=0$, $\omega=0$, $\partial\theta/\partial r=0$, $\partial c/\partial r=0$.

Критериальная зависимость решения от параметров задачи имеет следующий вид:

$$\Phi=\Phi(t,\ r,\ z,\ R_{\text{к}}/R_{\text{т}},\ H/R_{\text{т}},\ \mathrm{Re},\ \Omega_{\text{т}}/\Omega_{\text{к}},\ \mathrm{Pr},\ \mathrm{Gr},\ \mathrm{Bi},\ \mathrm{Mn},\ \theta_{\text{г}},\ \mathrm{Sc},\ \mathrm{Gr}_d,\ \mathrm{Bi}_d,\ \mathrm{Mn}_d). \tag{3}$$

Ввиду сложного многопараметрического характера этой зависимости в работе применяется поэтапное частичное моделирование на основе исследования частных случаев (3), соответствующих действию отдельных механизмов движения. Например, в практически важном случае вращения кристалла в изотермическом расплаве упрощенная критериальная система имеет вид

$$f=f(t,\ r,\ z,\ R_{\text{к}}/R_{\text{т}},\ H/R_{\text{т}},\ \mathrm{Re}). \tag{4}$$

Особенностью технологических режимов являются высокие значения чисел Re, Gr, Mn, входящих в (3). В данной работе рассмотрен диапазон изменения основных параметров, соответствующий реальным технологическим установкам:

$$\begin{gathered}H/R_{\text{т}}\leqslant 1{,}4,\quad R_{\text{к}}/R_{\text{т}}\leqslant 1,\quad \mathrm{Re}\leqslant 3{,}3\cdot 10^4,\quad |\Omega_{\text{т}}/\Omega_{\text{к}}|\leqslant 3{,}3,\\ \mathrm{Pr}=10^{-2},\ 2\cdot 10^{-2}\ \text{и}\ 15,\quad \mathrm{Gr}\leqslant 3{,}3\cdot 10^8,\quad \mathrm{Bi}\leqslant 1,\\ \mathrm{Mn}\leqslant 5{,}1\cdot 10^4,\quad \mathrm{Sc}=0{,}3;\ 10\ \text{и}\ 25,\quad |\mathrm{Bi}_d|\leqslant 10^2,\quad \mathrm{Gr}_d\leqslant 10^4.\end{gathered} \tag{5}$$

2. Численное решение и тесты

Методом конечных разностей охвачен весь диапазон (5), который для предельных случаев соответствует выращиванию кристаллов кремния большого диаметра.

Основными элементами конечно-разностной схемы [2, 3] являются монотонная аппроксимация конвективных членов по схеме Самарского, покоординатное расщепление исходной двумерной задачи на последовательность одномерных и их неявная разностная аппроксимация, итерационный способ определения граничных условий для вихря. Решение конечно-разностных уравнений осуществляется методом прогонки; уравнение для определения функции тока решается итерационно с оптимальным набором параметров, определенных по Ваншрессу.

Основные этапы решения задачи методом конечных элементов (МКЭ) [4, 5] включают генерацию сетки конечных элементов для

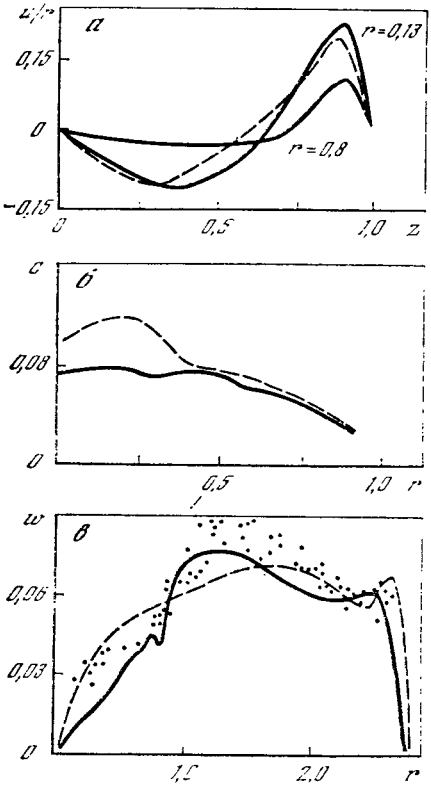


Рис. 2. Аналитические (*а*), численные (*б*) и экспериментальные (*в*) данные

заданной (сложной) области, аппроксимацию компонент скорости и давления квадратичными и линейными базисными функциями соответственно, вариационную формулировку уравнений МКЭ по методу Галеркина и их решение фронтальным методом. Разбиение области течения в математической модели на основе МКЭ показано на рис. 1, *б*.

Разработанные численные методы реализованы в виде комплексов программ на Фортране применительно к ЭВМ ЕС-1040, -1055. Счетная часть комплекса программ МКР содержит 16 модулей, МКЭ — 45 модулей. В рамках каждого комплекса имеется единая структура данных, архив данных на магнитных лентах; обработка результатов осуществляется с помощью графопостроителя и графического дисплея.

Для тестов численных решений использованы известные аналитические решения [6] и данные других работ по численному моделированию [7]. На рис. 2, *а* показаны распределения радиальной компоненты скорости для изотермического течения жидкости в тигле, вызванного вращением кристалла при $R_к/R_т=1$, $\mathrm{Re}=100$ (сплошные линии), и аналитический профиль в случае бесконечных дисков, один из которых вращается (штриховая); при $r\geqslant 0{,}5$ отмечается расхождение, связанное с влиянием боковых стенок тигля на характер течения и показывающее ограниченный диапазон применимости аналитических решений. Установлено удовлетворительное совпадение результатов теста по численному моделированию метода Чохральского: по структуре течения, распределению изотерм и примесей (фосфор, кислород); на рис. 2, *б* для сравнения приведено распределение концентрации кислорода на поверхности кристалла по результатам данной работы (сплошная линия) и по данным работы [7] (штриховая). При сопоставлении с экспериментальными профилями радиальной, осевой и окружной компонент скорости для стационарного, изотермического течения жидкости в модели метода Чохральского, вызванного вращением кристалла, установлено удовлетворительное количественное соответствие результатов расчетов с данными эксперимента [8, 9]. На

рис. 2, *в* приведены профили окружной компоненты скорости при $z=1{,}53$; $\mathrm{Re}=1240$ (сплошная линия — МКЭ, штриховая — МКР, точки — эксперимент); отмечается лучшее согласование результатов, полученных по МКЭ, с экспериментальными данными. Для неизотермического течения жидкости, вызванного действием тепловой, термокапиллярной конвекции и вращения кристалла, масштабы подкристального и пристеночного течений соответствуют экспериментальным данным. На рис. 1, *а* показаны линии уровня функции тока, полученные в расчетах на сетке с числом узлов $61\times\times81$ при следующих значениях параметров: $\mathrm{Re}=688$, $\mathrm{Gr}=8{,}2\cdot10^4$, $\mathrm{Mn}=5{,}1\cdot10^4$, $\mathrm{Bi}=1$, $\theta_0=0{,}5$, $\mathrm{Pr}=15$.

3. Изотермические течения расплава и механизмы распределения примеси

Изотермическое течение можно рассматривать как предельный случай, реализуемый, например, в невесомости [10] и представляющий также интерес с методической точки зрения.

При вращении кристалла масштаб течения и его интенсивность зависят от числа Рейнольдса Re, глубины жидкости $H/R_т$ и радиуса кристалла $R_к/R_т$ (см. уравнение (4)). Устойчивость этого течения впервые изучена экспериментально в ИТФ СО АН СССР на модельной жидкости (спирт с алюминиевой пудрой). В работе [9] получены подробные численные данные о структуре течения при вращении кристалла. Основные режимы этого течения, показанные на рис. 3, разделяются на слабое течение при малых числах Re (слева от линии *1*), интенсивное одновихревое течение (между *1* и *2*), течение с вторичным вихрем в подкристальной области (между *2* и *3*) и колебательный режим (справа от линии *3*); расположение меток на рис. 3 соответствует проведенной серии параметрических расчетов. Таким образом, вторичные вихри в подкристальной области возникают в случае $\mathrm{Re}\geqslant1240$, $H/R_т\geqslant0{,}7$; при численном моделировании в диапазоне больших чисел Рейнольдса $\mathrm{Re}=1{,}57\cdot10^4$ слабые вторичные течения обнаружены также вблизи боковой стенки тигля (рис. 4, *а*). Отметим, что колебательные режимы, соответствующие экспериментальным данным, возникают уже при $\mathrm{Re}\geqslant3{,}3\cdot10^3$ ($H/R_т\geqslant0{,}7$), что существенно ниже известного значения $\mathrm{Re}\approx3\cdot10^5$ для их возникновения при вращении диска

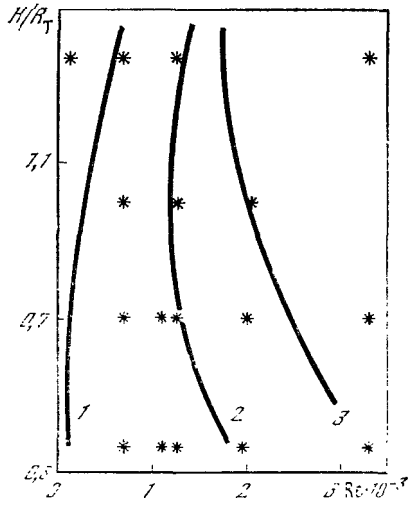
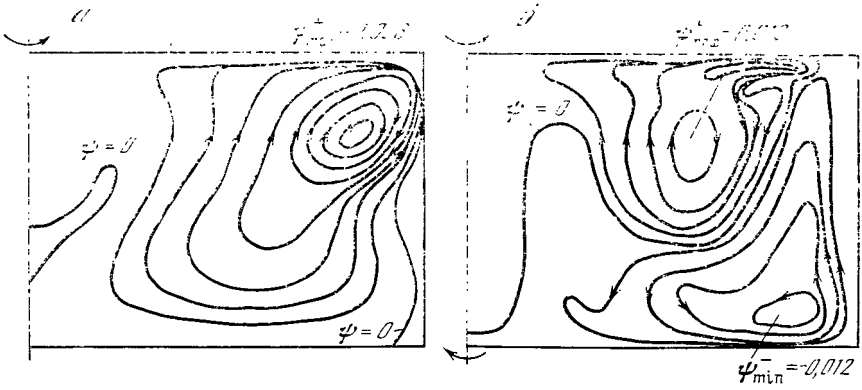


Рис. 3. Диаграмма устойчивости изотермического течения при вращении кристалла



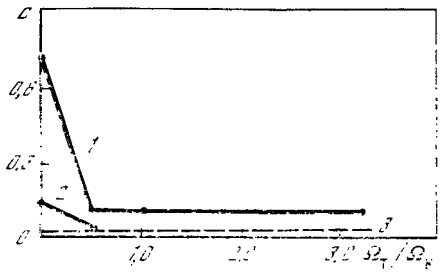


Рис. 4. Изотермическое течение при вращении кристалла (*а*) и при противовращении кристалла и тигля (*б*)

Рис. 5. Зависимость концентрации кислорода на границе с кристаллом от частоты вращения тигля $|\Omega_т/\Omega_к|$ при различных числах Рейнольдса

1 — Re=688;
2 — Re=1,57·10⁴;
3 — режим диффузии

в бесконечной жидкости. Возникновение колебательных режимов по результатам численных расчетов с использованием математической модели в осесимметричной постановке также существенно затягивается; колебания, связанные с перемещением вторичного подкристального вихря, обнаружены при численном моделировании после мгновенного ускорения вращения кристалла («spin-up»: $Re_1=1240$ и $Re_2=3300$, $H/R_т=1$).

При противовращении кристалла и тигля масштаб и интенсивность течения зависят также от значения параметра $\Omega_т/\Omega_к$. При малых значениях этого параметра (—0,1) и Re=688 обнаружена зависимость структуры течения от начальных данных. Изменение этого параметра от —0,5 до —3,3 приводит лишь к уменьшению интенсивности подкристального вихря при сохранении двухвихревой структуры течения. При больших значениях числа Рейнольдса $Re=1{,}57\cdot10^4$ и $\Omega_т/\Omega_к=-0{,}5$ также сохраняется двухвихревой характер течения (см. рис. 4, *б*), но наблюдаются слабые колебания разделяющей линии тока, связанные с неустойчивостью течения в области встречи двух потоков вблизи поверхности жидкости.

Особенностью течения в двойном тигле при отдельном вращении кристалла, изовращении и противовращении кристалла и двойного тигля (Re=100, $|\Omega_т/\Omega_к|=0{,}1$) является преобладание во внутреннем тигле циркуляции, вызванной вращением кристалла, независимо от величины зазора для подпитки на его дне; структу-

ра течения в случае противовращения кристалла и тигля при большой ширине зазора $\Delta R_з/R_к=0{,}94$ показана на рис. 1, *б*.

Наибольшее содержание кислорода в кристалле по результатам расчетов соответствует основному одновихревому течению, вызванному отдельным вращением кристалла, а наименьшее — течению с вторичными вихрями при больших числах Рейнольдса, а также течению при противовращении кристалла и тигля (рис. 5).

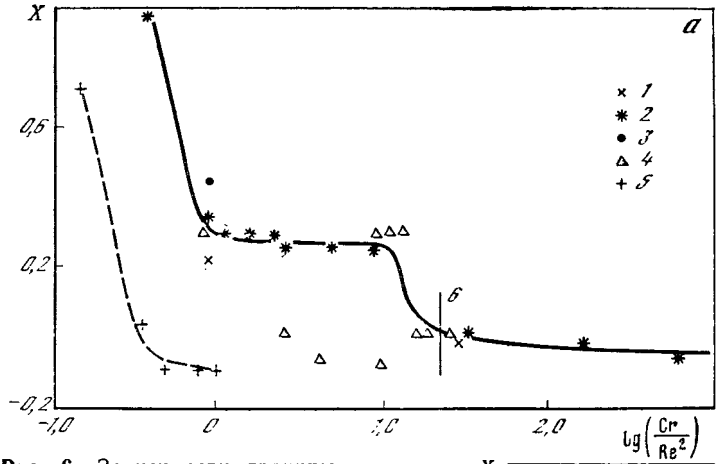
4. Некоторые закономерности неизотермических течений расплава и вопросы управления гидродинамикой расплава

Одной из важных технологических характеристик, определяющих кривизну фронта кристаллизации, является положение границы потоков тепловой и вынужденной конвекции на поверхности расплава. Это положение для расплавов ряда материалов (гадолиний-галлиевые гранаты) фиксируется при росте кристаллов и соответствует режиму устойчивого роста с кривизной фронта, близкой к плоской в случае расположения границы потоков на поверхности расплава.

При совместном действии вращения кристалла и тепловой конвекции исследовано влияние параметров Mn, $R_к/R_т$, Gr/Re^2 на структуру двухвихревого течения и положение «точки встречи» двух потоков на поверхности расплава. Значительное влияние термокапиллярной конвекции ($Mn=5{,}1\cdot10^4$) приводит к смещению границы двух потоков в подкристальную область (см. рис. 1, *а*). На основе обобщения результатов численного моделирования при боковом и равномерном нагреве стенок тигля для различных чисел Прандтля ($Pr=0{,}02$; 0,03; 0,5 и 15), а также с учетом теоретических и экспериментальных данных [11] построена зависимость положения границы потоков на поверхности расплава для широкого диапазона изменения параметров Re, Gr, Mn (рис. 6).

Основное течение и изотермы, соответствующие равномерному нагреву стенок тигля при тепловой конвекции, противовращении кристалла и тигля при $Re=3{,}3\cdot10^3$, $Gr=10^7$, $Pr=10^{-2}$, показаны на рис. 7, *а*. При этом отмечается значительное влияние изменения характера нагрева тигля на структуру вторичных течений в подкристальной области; в случае донного нагрева ячейковый характер тепловой конвекции способствует образованию интенсивной подкристальной циркуляции при увеличении числа Рейнольдса. При больших значениях числа Рейнольдса ($Re=2\cdot10^4$) и $\Omega_т/\Omega_к=-0{,}5$; $Gr=2\cdot10^8$ обнаружено дробление основного течения и появление колебаний температур в расплаве; многовихревая структура этого течения и изотермы показаны на рис. 7, *б*.

При исследовании влияния неизотермичности течения на перенос примесей в расплаве обнаружена наибольшая радиальная однородность распределения примесей на поверхности кристалла в случае больших чисел Рейнольдса и донном нагреве тигля, что согласуется с данными технологических экспериментов; на рис. 8



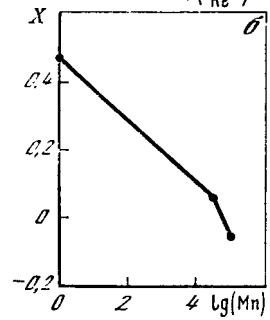


Рис. 6. Зависимости границы потоков тепловой и вынужденной конвекции от отношения Gr/Re^2 (*а*) и от числа Mn при Pr = 15 (*б*)

1 — Pr = 0,02;
2 — 0,5;
3 — 15;
4 — экспериментальные данные для расплава гадолиний-галлиевых гранатов (боковой нагрев);
5 — Pr = 0,03 (равномерный нагрев) по данным работы [12];
6 — условие возникновения вынужденного течения по данным работы [13]

приведена зависимость концентрационной неоднородности $\Delta c = (c_{max} - c_{min})/(c_{max} + c_{min})$ от числа Рейнольдса Re.

На основе выполненных исследований и полученных количественных соотношений можно рекомендовать некоторые мероприятия по управлению процессом выращивания совершенных кристаллов. К ним относится выбор динамических параметров — чисел Re и $\Omega_т/\Omega_к$ для изотермических течений, соответствующих минимальной концентрации кислорода в кристалле согласно зависимости $c(Re, \Omega_т/\Omega_к)$ (см. рис. 5). В неизотермическом случае предлагается программированное изменение частоты вращения кристалла (числа Рейнольдса) для управления положением границы потоков вынужденной и тепловой конвекций на поверхности расплава согласно зависимости $X(Gr/Re^2, Mn)$ (см. рис. 6); для уменьшения радиальной неоднородности распределения кислорода в кристалле возможно применение донного нагрева тигля и соответствующий выбор частоты вращения кристалла — числа Re, а также переход к условиям невесомости (см. рис. 8).

Отметим, что рассмотрены лишь некоторые динамические и тепловые способы управления процессом выращивания, наиболее простые в технологическом отношении. Однако ввиду многопарамет-

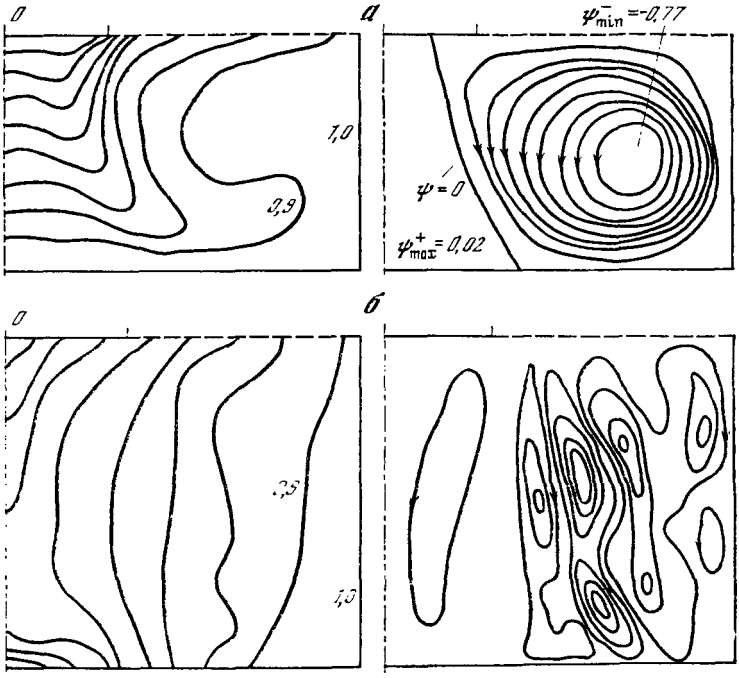


Рис. 7. Неизотермическое течение при действии тепловой конвекции и противовращения кристалла и тигля

а — основной стационарный режим; *б* — многовихревой колебательный режим. Слева — изотермы; справа — линии тока

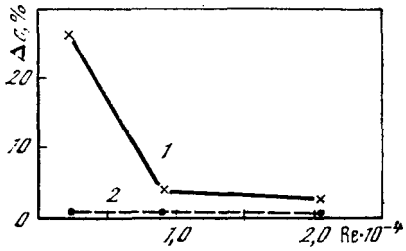


Рис. 8. Зависимость концентрационной неоднородности на границе с кристаллом от числа Рейнольдса

1 — на земле;
2 — в невесомости

рического характера задачи представляет интерес расширение диапазона параметрических исследований и разработка более общих математических моделей.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Полежаев В. И.* Гидродинамика, тепло- и массообмен при росте кристаллов.— В кн.: Механика жидкостей и газов. М.: ВИНИТИ, 1984, с. 198—269. (Итоги науки и техники; Т. 18).
2. *Бунэ А. В., Грязнов В. Л., Дубовик К. Г., Полежаев В. И.* Методика и комплекс программ численного моделирования гидродинамических процессов на

основе нестационарных уравнений Навье — Стокса: Препр. ИПМ АН СССР № 173. М., 1981. 70 с.
3. *Полежаев В. И., Простомолотов А. И.* Исследование процессов гидродинамики и тепломассообмена при выращивании кристаллов методом Чохральского.— Изв. АН СССР. МЖГ, 1981, № 1, с. 55—65.
4. *Полежаев В. И., Федосеев А. И.* Метод конечных элементов в задачах гидромеханики, тепло- и масообмена: Препр. ИПМ АН СССР № 160. М., 1981. 72 с.
5. Численное исследование течений вязкой вращающейся жидкости методом конечных элементов/Простомолотов А. И., Простомолотова И. И.; ИПМ АН СССР. М., 1984. 65 с. Рукопись деп. в ВИНИТИ 03.05.84, № 2884—84 Деп.
6. *Mellor G. L., Chapple P. J., Stokes V. K.* On the flow between a rotating and stationary disk.— J. Fluid Mech., 1968, vol. 31, p. 95—112.
7. *Смирнов В. А., Старшинова И. В., Фрязинов И. В.* Анализ распределения кислорода в расплаве кремния.— Кристаллография, 1984, т. 29, № 3, с. 560—566.
8. *Бердников В. С., Простомолотов А. И.* Исследование влияния вращения кристалла на гидродинамику расплава для задачи выращивания кристаллов методом Чохральского.— В кн.: Численные методы динамики вязкой жидкости. Новосибирск: ИТПМ СО АН СССР, 1983, с. 42—48.
9. *Бердников В. С., Борисов В. Л., Панченко В. И., Простомолотов А. И.* Моделирование гидродинамики расплава при выращивании кристаллов методом вытягивания.— В кн.: Теплофизические процессы при кристаллизации и затвердевании. Новосибирск: ИТФ СО АН СССР, 1984, с. 66—83.
10. *Простомолотов А. И.* Численное исследование механизмов распределения примесей при нормальной и пониженной гравитации в методе Чохральского.— В кн.: III Всесоюз. семинар по гидромеханике и тепломассообмену в невесомости: Тез. докл. Черноголовка: ИХФ АН СССР, 1984, с. 204—206.
11. *Казимиров В. Н., Князев С. Н., Пономарев Н. М.* и др. Опыт применения математического моделирования для процессов роста кристаллов.— В кн.: Современные вопросы информатики, вычислительной техники и автоматизации. М.: ВИНИТИ, 1985. 116 с.
12. *Langlois W. E.* Effect of the buoyancy parametry on Czochralski bulk flow in garnet growth.— J. Cryst. Growth, 1979, vol. 46, p. 743—746.
13. *Carruthers J. R.* Flow transitions and interface shape in Czochralski growth of oxide crystals.— J. Cryst. Growth, 1976, vol. 36, p. 212—214.

УДК 532.516.5+536.24

РАСЧЕТ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ПОТОКОВ В РАСПЛАВЕ И РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ДЛЯ ПРОЗРАЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ, ВЫРАЩИВАЕМЫХ СПОСОБОМ ЧОХРАЛЬСКОГО

В. А. Винокуров, Е. Д. Люмкис, Б. Я. Мартузан

Настоящая работа посвящена численному моделированию процесса выращивания кристаллов парателлурита TeO_2. Кристаллы TeO_2 обладают физическими свойствами, отличающими их от большинства материалов, выращиваемых способом Чохральского, в частности от полупроводниковых материалов. К числу таких свойств относятся прежде всего сравнительно большое число Прандтля, а также прозрачность кристаллов. В работе, в частности, обсуждается влияние этих особенностей на результаты численного моделирования.

Моделирование процесса выращивания TeO_2 проводилось в постановке и по методикам, подробно описанным в [1]. Оценка учета прозрачности кристалла сводилась к введению дополнительного слагаемого в краевом условии на границе раздела фаз.

Поскольку в практике выращивания TeO_2 нередко используют реверсивное вращение кристалла (т. е. направление вращения периодически меняется), в работе рассмотрено также влияние реверса на гидродинамику расплава.

1. Численная оценка влияния прозрачности в тепловой задаче

Учет выделения скрытой теплоты плавления и радиационных потерь энергии приводит к следующему краевому условию на границе раздела фаз:

$$(\lambda_{тв} \operatorname{grad} T|_{T_{пл}-0} - \lambda_ж \operatorname{grad} T|_{T_{пл}+0}, \operatorname{grad} \Phi) = -L\rho \frac{\partial \Phi}{\partial t} + q, \qquad (1)$$

где L — удельная скрытая теплота фазового перехода; ρ — плотность TeO_2; $T_{пл}$ — температура плавления TeO_2; $\lambda_{тв}$, $\lambda_ж$ — коэффициенты теплопроводности кристалла и расплава соответственно. С границы раздела фаз теряется энергия излучения, поверхностная плотность q которой (кристалл считался прозрачным, а расплав непрозрачным) в расчетах принималась равной

$$q = \varepsilon_ж \sigma (T_{пл}^4 - T_{эф}^4). \qquad (2)$$

Здесь $\varepsilon_ж$ — степень черноты расплава; σ — постоянная Стефана — Больцмана; $T_{эф}$ — эффективная внешняя температура, которая в расчетах полагалась известной. Вообще говоря, $T_{эф}$ должна определяться из специального расчета (см., например, [2, 3]), в данной работе эта величина задавалась исходя из температуры поверхностей кристалла, поскольку целью работы являлась только оценка влияния q в условии (1) на результаты расчетов тепловой задачи.

Краевое условие (1) отличается от обычного условия Стефана на границе раздела фаз только членом q. При численной реализации условия (1) поверхностный источник q заменялся объемным с плотностью $p = q/\Delta$, где Δ — ширина «размазывания» в направлении нормали к границе раздела. В остальном методика решения задачи Стефана, описанная в [1], не менялась.

Внешняя поверхность кристалла предполагалась диффузно-серой для излучения, поэтому на боковой поверхности кристалла ставились те же краевые условия, что и для непрозрачных материалов [1].

Скорость v_0 вытягивания кристаллов TeO_2 из расплава ($v_0 = \partial\Phi/\partial t$) известна из эксперимента и равна ~ 2 мм/ч. В результате величина $L\rho v_0 \approx 5 \cdot 10^{-2}$ Вт/см^2 оказывается малой по сравнению с $q \approx 5$ Вт/см^2. Таким образом, существенное влияние на положение фронта кристаллизации может оказывать только член q. На рис. 1 приведено положение фронта кристаллизации, полученное в ре-

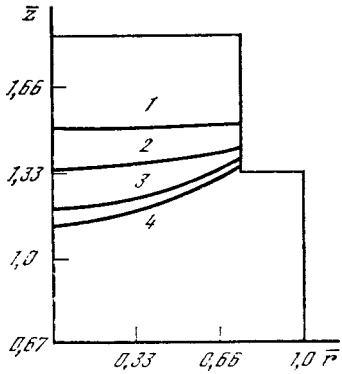


Рис. 1. Положение фронта кристаллизации
1 — $T_{эф} = T_{пл}$; 3 — 700 К;
2 — $T_{эф} = 900$ К; 4 — 500 К

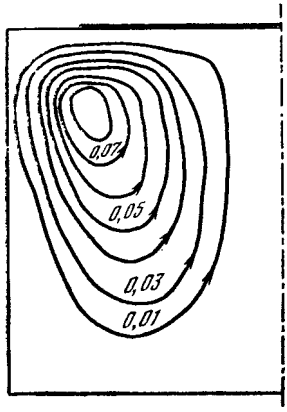
зультате решения тепловой задачи (без учета движения расплава) при $v_0=0$ и различных значениях $T_{эф}$. Видно, что фронт кристаллизации при $T_{эф}=T_{пл}=1008$ К (т. е. когда $q=0$) оказывается почти плоским и расположен на высоте ~5,5 мм над поверхностью расплава. При уменьшении $T_{эф}$ фронт опускается в тигель. Такие режимы, когда фронт находится ниже уровня расплава, нередко применяются при выращивании TeO_2, и опускание фронта, как видно из рис. 1, обусловлено в основном радиационным выносом энергии с фронта кристаллизации.

Расчеты полной задачи (задачи с учетом конвективного перемешивания и других эффектов [1]) проводились для варианта, когда фронт кристаллизации расположен над уровнем расплава, поэтому в качестве $T_{эф}$ взято значение 900 К.

2. Расчеты изотермического варианта

Переходя к описанию результатов численных расчетов, приведем вначале значения геометрических и теплофизических констант. Для определения последних в некоторых случаях были проведены специальные эксперименты. Значения плотности, теплопроводности и теплоемкости в твердой и жидкой фазах полагались равными.

Использовались следующие значения теплофизических констант TeO_2: кинематическая вязкость расплава $\nu=4{,}56\cdot10^{-2}$ см$^2\cdot$с$^{-1}$; плотность $\rho=5{,}04$ г·см$^{-3}$; удельная теплоемкость $c=5{,}27\times10^6$ эрг·г$^{-1}$К$^{-1}$; коэффициент объемного расширения $\beta=\frac{1}{\rho}\frac{\partial\rho}{\partial T}=2{,}09\cdot10^{-4}$К$^{-1}$; зависимость коэффициента поверхностного натяжения от температуры $\partial\gamma/\partial T=-0{,}117$ эрг·см$^{-2}$·К$^{-1}$; степень черноты поверхностей расплава и кристалла $\varepsilon_ж=0{,}2$, $\varepsilon_{тв}=0{,}7$; коэффициент теплопроводности $\lambda=3\cdot10^5$ эрг·см$^{-1}$·К$^{-1}$ (т. е. число Прандтля $Pr=4$). В расчетном варианте $R_к/R_т=0{,}77$, $H_т/R_т=1{,}33$, $H_к/R_т=0{,}67$, где $R_к$, $H_к$ — радиус и высота кристалла, $R_т$, $H_т$ — радиус и высота тигля. Тигель был неподвижен, а кристалл вращался с частотой $f_к=20$ мин$^{-1}$. При переходе к безразмерным переменным масштаб времени t_0 выбран равным $f_к^{-1}$, масштаб длины $r_0=R_т$, характерный перепад температур $\Delta T_0=80°$. Тогда безразмерные параметры задачи таковы: число Рейнольдса $Re=66$, число Грасгофа $Gr=2\cdot10^5$, число Марангони $Mn=10^4$. Если, как принято в большинстве работ, положить $t_0=1/2\pi f_к$, $r_0=R_к$, то $\tilde{Re}=243$.



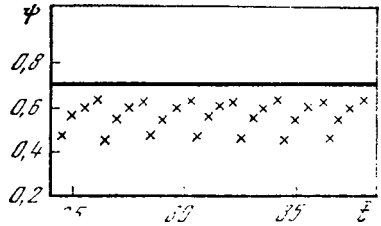


Рис. 3. Зависимость ψ вблизи центра вихря от времени

Точки — реверсивное вращение; сплошная линия — стационарное значение без реверса

Рис. 2. Изолинии функции тока в изотермическом варианте

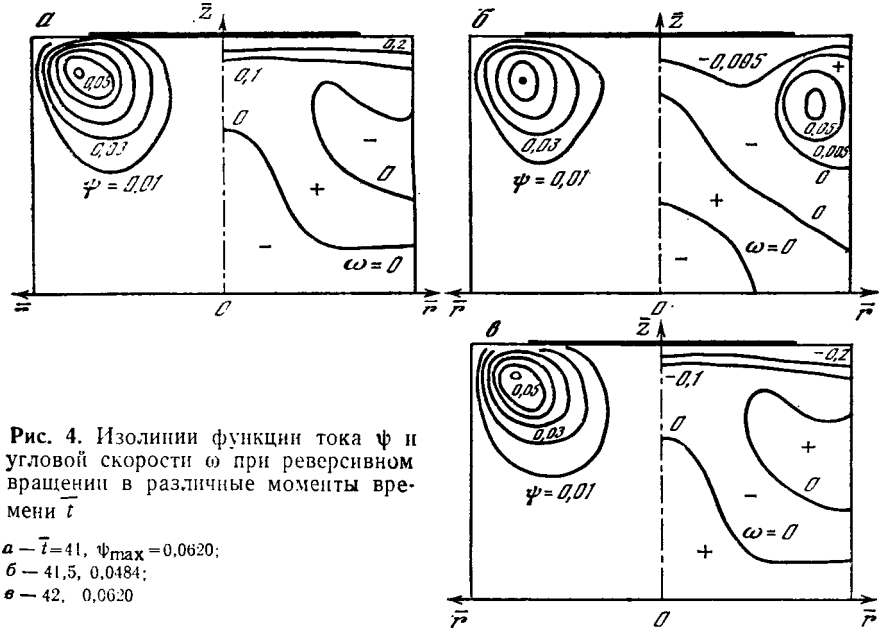


Рис. 4. Изолинии функции тока ψ и угловой скорости ω при реверсивном вращении в различные моменты времени $\bar{t}$

а — $\bar{t}=41$, $\psi_{max}=0{,}0620$;
б — 41,5, 0,0484;
в — 42, 0,0620

Поскольку число Рейнольдса в этом варианте невелико, в изотермическом расплаве, как обычно [4], образуется вторичный вихрь, вызванный центробежной силой и занимающий всю область расплава (рис. 2). Характерное безразмерное время выхода максимального значения функции тока на стационарный режим для этого варианта составляет $\bar{t}^*\approx 10$.

Рассмотрим влияние реверсивного вращения кристалла на гидродинамику изотермического расплава. Пусть кристалл вращается

с частотой $f(t)$, меняющейся по закону

$$f(t)=\begin{cases} f_к, & t\in(mt_п,\ mt_п+t_п/2], \\ -f_к, & t\in(mt_п+t_п/2,\ (m+1)t_п], \end{cases}$$
$$m=0,\ 1,\ 2,\ldots$$

где $t_п$ — период реверса. Влияние реверса может проявиться, если $t_п f_к/2<\bar{t}^*$. Зависимость функции тока ψ от безразмерного времени $\bar{t}$ в точке, близкой к максимуму ψ, для варианта с $t_п f_к=4$ приведена на рис. 3. Видно, что на каждом полупериоде функция ψ растет, стремясь к своему стационарному значению, но после мгновенного изменения знака $f(t)$ резко уменьшается и вновь начинает расти. В результате в среднем интенсивность вторичного течения уменьшается. Такая же картина наблюдается и при другом периоде реверса. На рис. 4 приведены изолинии функции тока и угловой скорости для трех моментов времени при $t_п f_к=2$. Видна строгая периодичность течения, угловая скорость ω на полупериоде отличается только знаком: $\omega(z,\ r,\ t)=-\omega(z,\ r,\ t+t_п/2)$, а функция тока совпадает: $\psi(z,\ r,\ t)=\psi(z,\ r,\ t+t_п)$. Среднее значение ψ в этом случае еще меньше, чем в предыдущем, поскольку уменьшился период реверса.

3. Результаты расчетов для полной задачи

Распределение температуры на стенках тигля и на окружающих кристалл поверхностях было измерено экспериментально. Температура на стенках тигля аппроксимировалась соотношениями: на дне тигля

$$T=a_1r^2+c_1,\quad a_1=18{,}4,\quad c_1=1074\ \text{K};$$

на боковой стенке тигля

$$T=b_2z+c_2,\quad b_2=-30{,}3,\quad c_2=1090\ \text{K}.$$

Максимальное значение температуры достигалось в точке $z=0$, $r=R_т$.

Расчет неизотермического варианта выполнялся на сетке 41×31 в области расплава, сетка выбиралась существенно неравномерной со сгущением узлов вблизи границ. Некоторые варианты дополнительно рассчитывались на сетке 21×31. В области кристалла сетка включала 21 узел по радиусу и 20 узлов по высоте, узлы по радиусу в кристалле совпадали с соответствующими узлами в расплаве.

Для исследуемого неизотермического варианта стационарное решение получить не удается ни по одной из трех разностных схем, приведенных в [1]. Полученные решения оказываются близкими к периодическим с периодом $t_1=3/f_к$. В расплаве образуются два вихря, один над другим, интенсивность которых меняется во времени. На рис. 5 представлена зависимость $\psi(\bar{t})$, полученная из расчета по монотонной разностной схеме (МС) [1], для двух то-

чек, соответствующих примерно положению $\max|\psi|$ для каждого из вихрей. Изолинии функции тока для двух моментов времени изображены на рис. 6. С целью контроля полученных результатов были проведены расчеты того же варианта по другим разностным схемам — консервативной энергетически нейтральной схеме (КНС) и монотонной консервативной схеме (МКС). Эти схемы предложены в работе [5], а их реализация, использованная в настоящей работе, приведена в [1]. Результаты расчетов по КНС и по МКС между собой практически не отличались. Так же как и при расчете по МС, получено близкое к периодическому нестационарное решение с тем же периодом $t_1 f_к \approx 3$. Изолинии функции тока и изотермы для двух моментов времени изображены на рис. 7. Сравнение изолиний функции тока на рис. 6 и 7 показывает, что при расчете по разным схемам картины течения близки между собой. Это, в частности, относится и к значениям $\max|\psi|$ в каждом из вихрей. Отличия имеют место в приосевой области. Если при расчете по МС всюду вблизи оси $\psi<0$, то при использовании КНС и МКС вблизи оси $\psi>0$. Отметим, что интенсивность течения в приосевой области мала.

Как видно из рис. 7, за полпериода пульсаций вихрей качественно меняется структура изотерм в области расплава. На наш взгляд, это объясняет колебательный характер решения: из-за слабого механизма молекулярной теплопроводности (сравнительно большого числа Прандтля) рассасывание неоднородно нагретых тепловых фронтов в расплаве, образующихся при гидродинамическом переносе расплава, происходит медленно. Неоднородно нагретая жидкость из-за гравитационной конвекции приходит в движение, меняется гидродинамическая картина течения, это вызывает изменение температурного распределения в расплаве и т. д. Для проверки этого механизма был проведен специальный расчет, в котором учитывалась только гравитационная конвекция. Нестационарная картина течения с близкой величиной периода пульсаций сохранилась, изменилась лишь интенсивность вихрей.

Влияние термокапиллярной конвекции в данном случае оказывается слабым и приводит к образованию слабоинтенсивного вихря, обтекающего свободную поверхность в направлении от тигля к оси. Вывод о слабости термокапиллярной конвекции согласуется с критериальными оценками [6]: число $Z=\mathrm{Gr}\,\mathrm{Pr}/\mathrm{Mn}\gg 1$, поэтому гравитационная конвекция преобладает над термокапиллярной. В масштабах рисунков вихрь, обусловленный термокапиллярной конвекцией, не мог быть изображен.

В неизотермическом случае также проводился расчет с реверсивным вращением кристалла, период реверса $t_п f_к$ равнялся 1,5, т. е. вдвое меньше периода пульсаций вихрей. Несмотря на это, сохранился близкий к периодическому режим с периодом $t_1 f_к$, несколько уменьшилась амплитуда колебаний.

Колебательным образом меняется не только функция тока, но и температура. Наиболее сильные колебания температуры происходят в глубине расплава, амплитуда колебаний в кристалле су-

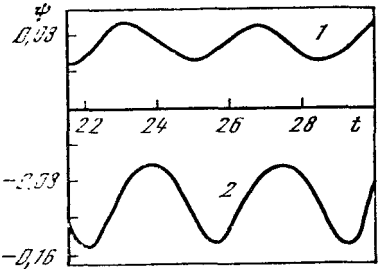


Рис. 5. Зависимость от времени значений ψ в центре верхнего (*1*) и нижнего (*2*) вихрей

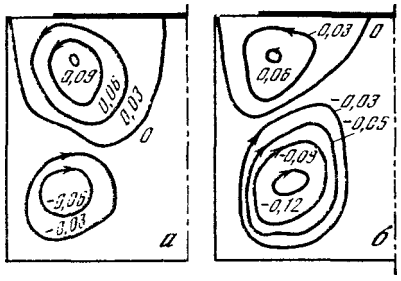


Рис. 6. Изолинии функции тока для двух моментов времени

а — $\bar{t}=29$; *б* — $\bar{t}=30{,}5$

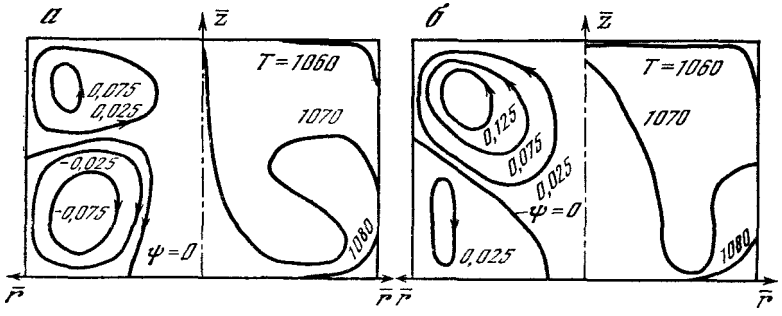


Рис. 7. Изолинии ψ и изотермы *T* при счете по КНС

а — $\bar{t}=59$; *б* — $\bar{t}=60{,}75$

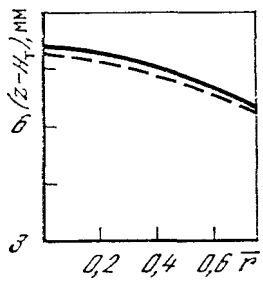


Рис. 8. Положение фронта кристаллизации для двух моментов времени (счет по МС)

Сплошная линия — $\bar{t}=29$; штриховая — $\bar{t}=30{,}5$

щественно меньше. Несильно колеблется и положение фронта кристаллизации (рис. 8). Тем не менее такие колебания могут влиять на микроструктуру кристалла и явиться причиной микронеоднородностей, экспериментально наблюдаемых в TeO_2. Полученное в расчете положение фронта кристаллизации (см. рис. 8) несколько выше экспериментальных значений для этого варианта (~5—6 мм над уровнем расплава).

Расчеты тепловой части задачи были выполнены при существенном участии Г. Ф. Ивановой, которой авторы выражают искреннюю признательность.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Иванова Г. Ф., Люмкис Е. Д., Мартузан Б. Я.* и др. Численное решение задачи совместного определения температурного поля в системе расплав — кристалл и потоков в расплаве в процессе Чохральского.— Наст. сб.
2. *Ignatov I. I., Lingart Yu. K., Marchenko N. V.* et al. Temperature growth conditions of corundum as related to crystal perfection: Theoretical calculation.— J. Cryst. Growth, 1981, vol. 52, N 6, p. 411—416.
3. *Васильев М. Г., Юферев В. С.* Радиационно-кондуктивный теплообмен в тонкой полупрозрачной пластинке в световодном приближении при зависимости коэффициента поглощения от температуры и частоты.— ЖПМТФ, 1981, № 1, с. 98—103.
4. *Бердников В. С., Борисов В. Л.* Экспериментальное исследование гидродинамики расплава при выращивании монокристаллов методом Чохральского.— В кн.: Тепло- и массообмен при кристаллизации и конденсации металлов. Новосибирск: ИТФ СО АН СССР, 1981, с. 96—106.
5. *Старшинова И. В., Фрязинов И. В.* Численное исследование гидродинамических и тепловых процессов получения монокристаллов по методу Чохральского: Препр. ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР № 52. М., 1982. 21 с.
6. *Люмкис Е. Д., Мартузан Б. Я., Мартузане Э. Н.* Взаимодействие потоков, вызванных конвекцией и вращением при зонной плавке, и их влияние на распределение примеси.— В кн.: Технологические эксперименты в невесомости. Свердловск: УНЦ АН СССР, 1983, с. 163—178.

III. МЕТОДЫ ЖИДКО- И ГАЗОФАЗОВОЙ ЭПИТАКСИИ

УДК 536.121.4

О ЧИСЛЕННОМ ИССЛЕДОВАНИИ ПРОЦЕССА КОНВЕКТИВНОГО МАССОПЕРЕНОСА ПРИ ПОЛУЧЕНИИ СТРУКТУР ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ МЕТОДОМ ЖИДКОФАЗОВОЙ ЭПИТАКСИИ

Л. А. Дмитриева, О. С. Мажорова, Ю. П. Попов, Э. А. Твирова, А. А. Шленский

1. Постановка задачи

Метод жидкофазовой эпитаксии является одним из основных методов получения структур полупроводниковых материалов [1].

В ходе этого технологического процесса выращивание эпитаксиальных слоев (ЭС) полупроводниковых соединений осуществляется из раствора-расплава, находящегося в зазоре между подложками. При понижении температуры расплава в результате переохлаждения, создаваемого в объеме, растворенное вещество осаждается на границе раздела расплав—подложка. Массоперенос осуществляется механизмом конвекции и диффузии [2—7].

В зависимости от положения подложек (они могут находиться в горизонтальном и вертикальном положении) различают горизонтальные и вертикальные системы (рис. 1).

В настоящее время хорошо известно, что гидродинамические процессы, происходящие в зазоре между подложками, существенно влияют на характер роста ЭС. В данной работе представлены результаты численного исследования влияния процесса конвективного массопереноса на рост эпитаксиальных слоев фосфида галлия в вертикальных системах и арсенида галлия — в горизонтальных. Проведено сопоставление экспериментальных данных с результатами расчетов.

Математическое моделирование процесса конвективного массопереноса в расплаве проводится на основе двумерных уравнений концентрационной конвекции в приближении Буссинеска [8]. В переменных «функция тока, вихрь» их можно записать в следующем виде:

$$\frac{\partial\omega}{\partial t}+\frac{\partial\omega}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial y}-\frac{\partial\omega}{\partial y}\frac{\partial\psi}{\partial x}=\nu\left(\frac{\partial^2\omega}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\omega}{\partial y^2}\right)+\beta g\frac{\partial c}{\partial x},$$
$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}=-\omega, \qquad (1)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t}+\frac{\partial c}{\partial x}\frac{\partial \psi}{\partial y}-\frac{\partial c}{\partial y}\frac{\partial \psi}{\partial x}=\mathcal{D}\left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 c}{\partial y^2}\right),$$

$$u=\frac{\partial \psi}{\partial y},\ v=-\frac{\partial \psi}{\partial x},\ \frac{\partial v}{\partial x}-\frac{\partial u}{\partial y}=-\omega. \qquad (2)$$

Здесь x, y — декартовы координаты; t — время, $t\leqslant\bar{t}$, где $\bar{t}$ определяется параметрами технологического процесса; ν — коэффициент кинематической вязкости; g — ускорение свободного падения; β — коэффициент концентрационного расширения; $\mathcal{D}$ — коэффициент диффузии; ω — вихрь; ψ — функция тока; u, v — компоненты вектора скорости; c — концентрация растворенного в расплаве компонента: фосфора в фосфиде галлия или мышьяка в арсениде галлия.

Система уравнений (1), (2) решается в области $D=[0, l_1]\times[0, l_2]$ с границей $\Gamma=\{\Gamma_1\cup\Gamma_2\}$ (рис. 2). Через Γ_1 обозначена та часть границы расчетной области, где в реальном эксперименте расположены подложки из полупроводникового материала, а Γ_2 соответствует графитовым стенкам ячейки (см. рис. 1).

На границе Γ обращаются в нуль обе компоненты вектора скорости, т. е. для функции ψ выполняются условия

$$\psi|_\Gamma=\partial\psi/\partial n|_\Gamma=0 \qquad (3)$$

(n — нормаль к границе Γ).

Граничные условия для концентрации формулируются в предположении, что концентрация растворенного компонента у фронта кристаллизации в ходе всего процесса остается равновесной, т. е. соответствующей линии ликвидуса.

Это значит, что

$$c|_{\Gamma_1}=q(T), \qquad (4)$$

где $q(T)$ — содержание растворенного компонента в единице объема насыщенного при температуре T раствора. В экспериментах T изменяется по закону: $T=T_0-\alpha t$ (T_0 — начальная температура, α — скорость охлаждения). В расчетах предполагалось, что температура расплава в зазоре между подложками при этом однородна по пространству и изменяется по тому же закону.

На участке границы Γ_2 задается условие

$$\partial c/\partial n|_{\Gamma_2}=0, \qquad (5)$$

что соответствует отсутствию диффузионного потока на графитовые стенки ячейки.

В связи с незначительной толщиной эпитаксиального слоя (5—10% от величины зазора) изменение формы области, связанное с его ростом, в расчетах не учитывается.

Для моделирования роста ЭС из насыщенного раствора-расплава в качестве начальных условий задается равновесная при данной температуре концентрация растворенного компонента

$$c(x, y, 0)=q(T_0). \qquad (6)$$

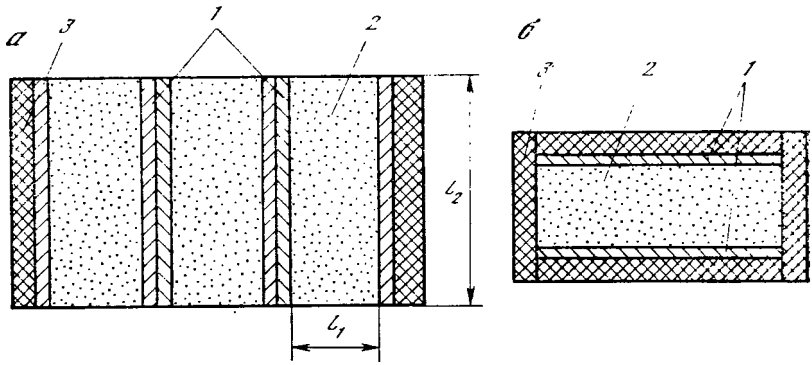


Рис. 1. Схема экспериментальной ячейки

а — вертикальная система (l_1 — зазор между подложками; l_2 — длина подложек); *б* — горизонтальная система.
1 — подложка из полупроводникового материала; *2* — раствор-расплав; *3* — графитовые стенки ячейки

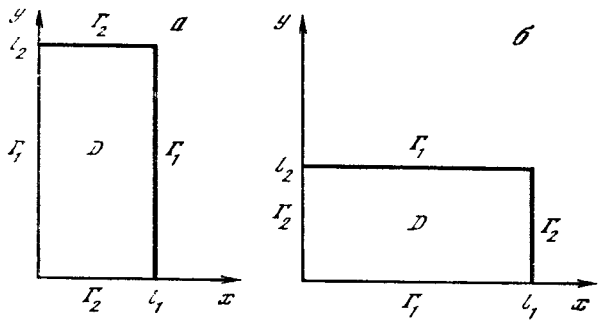


Рис. 2. Расчетная область

В начальный момент времени движение в расплаве отсутствует:

$$\psi(x, y, 0) = 0, \qquad \omega(x, y, 0) = 0. \tag{7}$$

В расчетах не учитывается возможный при больших величинах зазоров и высоких скоростях снижения температуры процесс спонтанного зародышеобразования в расплаве. В ходе решения задачи вычисляется функция

$$w_{\Gamma_1} = \mathcal{D} \left.\frac{\partial c}{\partial n}\right|_{\Gamma_1},$$

которая представляет собой поток растворенного компонента на подложку и с точностью до множителя определяет скорость роста эпитаксиального слоя [9, 10]. По найденной скорости роста $w_к$ толщина ЭС в момент времени t вычисляется по формуле

$$\mathcal{H}_{\Gamma_1} = \int_0^t w_к dt.$$

Средняя толщина $\overline{\mathcal{J}}$ ЭС при этом равна $\frac{1}{l_1}\int\limits_0^{l_1}\mathcal{J}_{\Gamma_1}d\Gamma_1$.

В рамках описанной постановки задачи с помощью изложенного в [11, 12] разностного алгоритма проводилось численное исследование процесса конвективного массопереноса в зазоре между подложками. Анализ результатов расчетов позволил выяснить, как влияет движение расплава на скорость роста и толщину ЭС, выработать рекомендации по оптимизации условий роста. Параметры расчетов соответствуют условиям реального технологического процесса.

2. Выращивание эпитаксиальных слоев в вертикальных системах

Приведем некоторые результаты, полученные при математическом моделировании процесса получения ЭС фосфида галлия [9, 10]. В этих расчетах коэффициенты диффузии и вязкости предполагались постоянными и равными

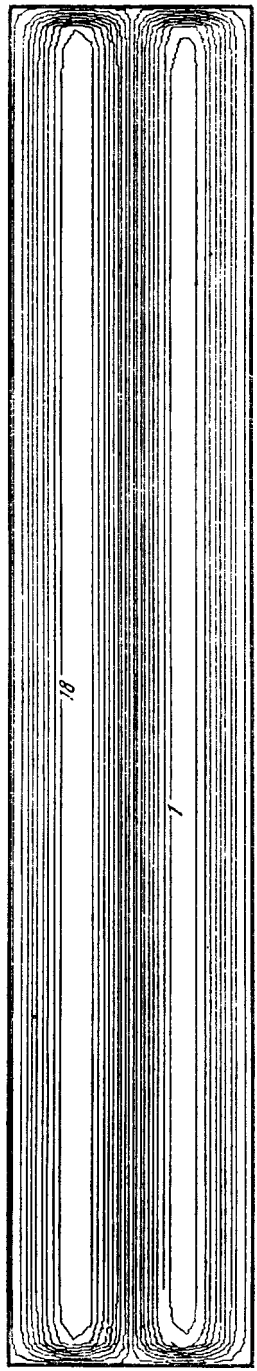
$$\mathcal{D}=6{,}7\cdot10^{-5}\ \text{см}^2/\text{с}\ [13],\qquad \nu=1{,}15\cdot10^{-3}\ \text{см}^2/\text{с}\ [14].$$

Данные по растворимости фосфора в расплаве фосфида галлия заимствованы из работы [15].

Так как авторы не располагают точными данными о значении коэффициента концентрационного расширения раствора фосфора в галлии, то эта величина в расчетах варьировалась. Температура расплава снижалась на 80° от $T_0=1050°$ С со скоростью 90, 180, 400°/ч. Длина подложек l_2 составляла 30 мм, а толщина расплава l_1 варьировалась в диапазоне от 1 до 4,5 мм.

На рис. 3 изображены линии уровня функции тока ψ и концентрации c при величине зазора между подложками 1 мм на момент времени t, соответствующий охлаждению расплава на 80°. Скорость снижения температуры 180°/ч. Как видно из рисунка, движение в зазоре между подложками представляет собой систему из двух вихрей. При этом вблизи подложек расплав опускается, а в центральной части области его скорость направлена вверх. Толщина эпитаксиального слоя в данном случае постоянна по всей длине подложки. Таким образом, возникающее в расплаве при зазоре 1 мм слабое конвективное движение не оказывает существенного влияния на процесс роста. Форма поверхности эпитаксиального слоя на тот же момент времени изображена на рис. 4.

Увеличение расстояния между подложками приводит к возникновению более интенсивного конвективного движения в растворе-расплаве. В целом, однако, характер движения не изменяется. Оно по-прежнему представляет собой систему из двух вихрей, только центры их смещаются вверх. Это приводит к более неоднородному по высоте распределению потока растворенного компонента на подложку, и, как следствие, более неоднородным по толщине становится образовавшийся эпитаксиальный слой (см. рис. 4, *а*).


а
18
1

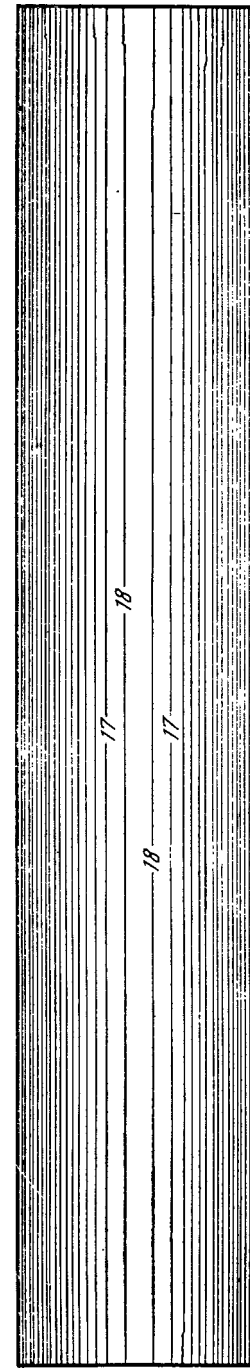
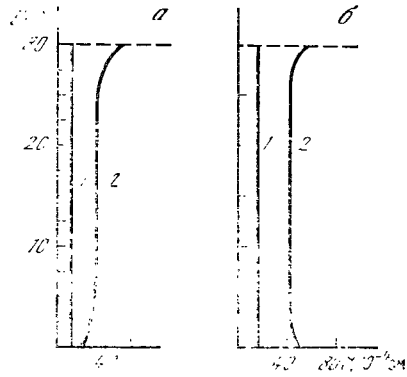

б
18
17
17
18

Рис. 4. Форма поверхности эпитаксиального слоя ($\alpha=180°/ч$)

а — расчет;
б — эксперимент.
1 — $l_1=1$ мм; *2* — $l_1=2{,}7$ мм



На рис. 5 изображены линии уровня функции тока и концентрации при зазоре 2,7 мм. Все остальные параметры совпадают с предыдущим расчетом.

Сравнение этих результатов с экспериментальными данными показывает, что наибольшее расхождение имеет место в нижней части подложек: по данным расчетов ЭС здесь становится тоньше, а в экспериментах наблюдается некоторое увеличение толщины ЭС (см. рис. 4, *б*). Это связано с тем, что в реальном эксперименте под подложками находится слой балластного раствора-расплава толщиной 4—5 мм; в нижней части они с ним соприкасаются. Это приводит к обогащению фосфором раствора-расплава, находящегося в зазоре между подложками ($\partial c/\partial y\neq 0$), и вместе с тем к увеличению толщины эпитаксиального слоя в нижней части подложек.

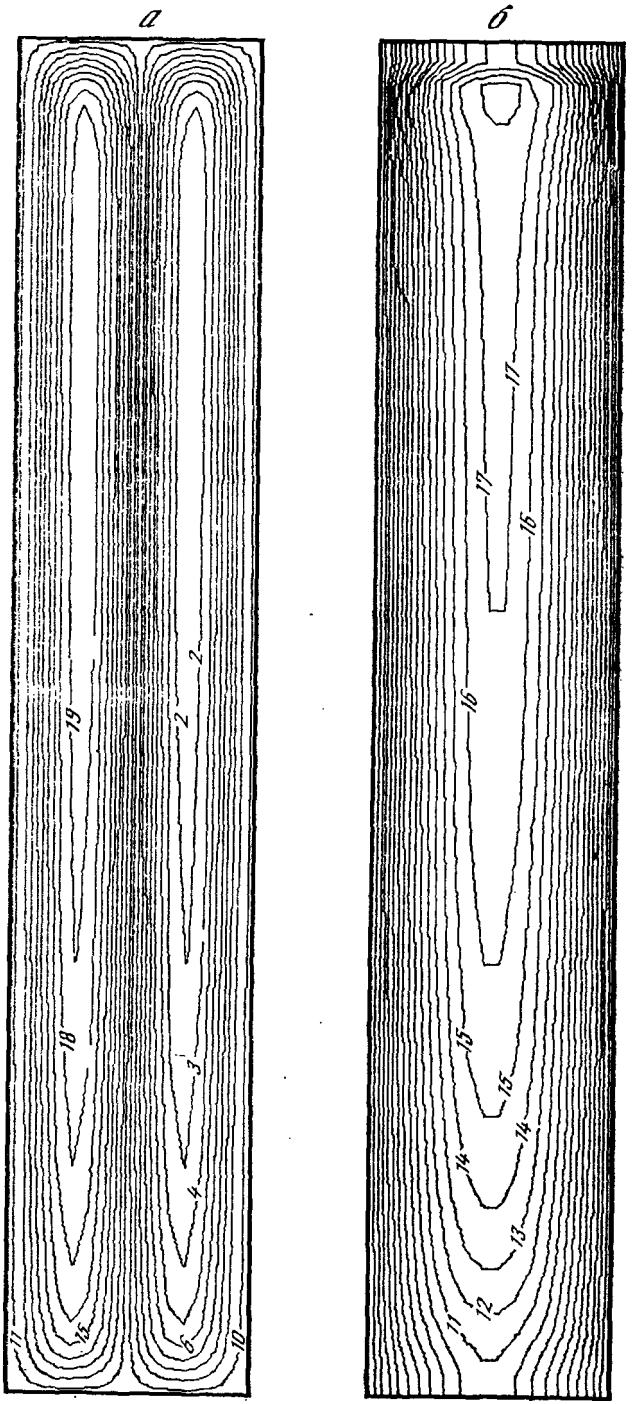
Были проведены расчеты, в которых обогащение раствора моделировалось заданием при $y=0$, $x\in[0, l_1]$ условия $\mathcal{D}\partial c/\partial y=w_0\neq 0$. Величина w_0 вычислялась в предположении, что 80% фосфора, выделившегося из балластного расплава при понижении температуры на δT ($\delta T=80°$), поступает за время процесса в зазор между подложками.

Как видно из рис. 6, где представлены результаты этих расчетов, наличие потока растворенного компонента через границу области ($x\in[0, l_1]$, $y=0$) при небольших значениях l_1 ($l_1\leqslant 2$ мм) приводит к заметному утолщению выросших слоев в нижней части подложек, мало влияя на процесс роста в центральной части.

При больших зазорах ($l_1>2$ мм), когда в расплаве возникает более интенсивное конвективное движение, поступающий в зазор дополнительный фосфор более равномерно распределяется по всему расплаву. Это приводит к некоторому увеличению толщины выросшего слоя по всей длине подложки.

Например, для случая $l_1=2{,}7$ мм ($l_2=30$ мм, $\delta T=1050-970=80°$, $\alpha=180°/ч$) дополнительный поток фосфора через нижнюю подложку приводит к увеличению толщины слоя в центральной части подложки на 10—15% по сравнению со случаем, когда $\mathcal{D}\partial c/\partial n|_{\Gamma_2}=0$. Следует отметить, что полученные расчетные значения толщины и профиля ЭС хорошо согласуются с данными эксперимента (см. рис. 4, *б*).

Рис. 3. Линии уровня функции тока (*а*) и концентрации (*б*) ($l_1=1$ мм, $l_2=30$ мм, $\alpha=180°/ч$)


а
б
19
18
11
12
2
2
3
4
6
10
17
17
16
16
15
15
14
14
13
12
11

Важной характеристикой хода технологического процесса является скорость роста эпитаксиального слоя. При чисто диффузионном механизме переноса растворенного компонента скорость роста ЭС во всех точках подложки одинакова. В случае, когда в расплаве достаточно интенсивное конвективное движение, скорость роста существенно изменяется по высоте подложки. В верхней части расплава она может быть значительно выше, чем в нижней.

Например, результаты расчетов показывают, что при величине зазора $l_1=4{,}5$ мм и скорости охлаждения раствора $\alpha=180°/ч$ через 10 мин после начала снижения температуры скорости роста ЭС в точках, отстоящих на расстоянии 3 мм от верхнего и нижнего краев подложки, отличаются почти в 4 раза.

Графики зависимости от времени скорости роста ЭС в центральной части подложки при скоростях снижения температуры $\alpha=180$ и $400°/ч$ ($l_1=1$, 2 и 2,7 мм) приведены на рис. 7.

При небольших зазорах скорость роста ЭС в течение всего процесса монотонно убывает. С увеличением зазора между подложками растет и скорость роста, которая при больших значениях $\alpha(\sim 400°/ч)$ и $l_1(\sim 2—4{,}5$ мм) приобретает немонотонный характер, при этом к концу процесса она резко замедляется.

По известным скоростям роста $w_к$ нетрудно определить толщину ЭС $\left(\mathcal{Y}=\int\limits_0^t w_к dt\right)$ и ее зависимость от величины зазора. Соответствующие графики приведены на рис. 8. При их построении толщина ЭС определялась в центральной части подложки в тот момент времени, когда переохлаждение при заданной скорости снижения температуры расплава составляло 80°. Как видно из этого рисунка, при увеличении зазора между подложками от 1 до 2,5 мм ($\alpha=90$ и $180°/ч$) толщина выросшего ЭС возрастает практически по линейному закону. При дальнейшем увеличении зазора, хотя средняя толщина ЭС продолжает возрастать, его толщина в центральной части подложки изменяется мало. Аналогичная зависимость имеет место и в экспериментах [9].

При фиксированной величине зазора скорость роста $w_к$ возрастает с ростом скорости охлаждения расплава (см. рис. 7). Однако толщина слоя $\mathcal{Y}$, выросшего в результате понижения температуры на одну и ту же величину, убывает с ростом α (см. рис. 8).

Параметром, характеризующим эффективность процесса выращивания ЭС, может служить величина

$$\eta(t)=\frac{\overline{\mathcal{Y}}(t)}{\mathcal{Y}_п(t)}\cdot 100\%.$$

Она представляет собой выраженное в процентах отношение средней толщины ЭС, выросшего на подложке за время t, к толщине

Рис. 5. Линии уровня функции тока (*а*) и концентрации (*б*) ($l_1=2{,}7$ мм, $l_2=30$ мм, $\alpha=180°/ч$)

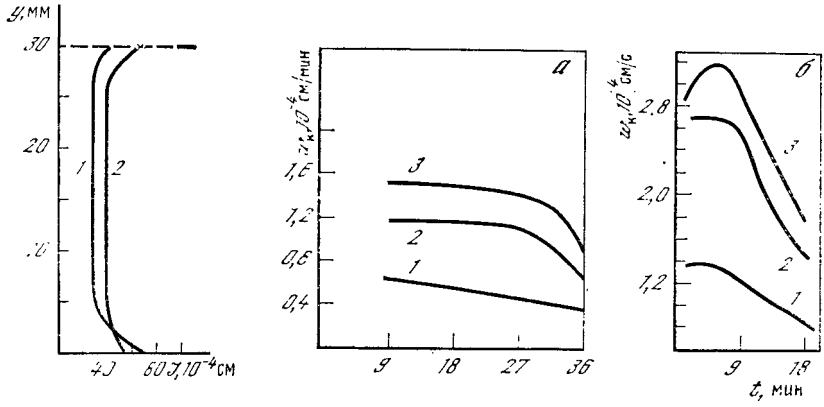


Рис. 6. Форма поверхности эпитаксиального слоя ($\alpha=180°/ч$)

1 — $l_1=2$ мм; *2* — $l_1=2{,}7$ мм

Рис. 7. Скорость роста эпитаксиального слоя при различных зазорах

а — $\alpha=180°/ч$; *б* — $\alpha=400°/ч$

1 — $l_1=1$ мм; *2*—2; *3* — 2,7

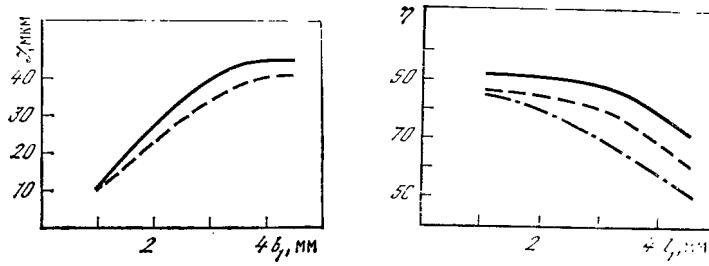


Рис. 8. Зависимость толщины эпитаксиального слоя от зазора

Сплошная кривая — $\alpha=90°/ч$; штриховая — $\alpha=180°/ч$

Рис. 9. График функции η (l_1)

Сплошная кривая — $\alpha=90°/ч$; штриховая — 180, штрихпунктирная — 400

$\mathcal{J}_п$ ЭС, вычисленной в предположении, что весь фосфор, выделившийся за это время из расплава, осел на подложки.

Полученные в расчетах зависимости η от величины зазора l_1 для различных значений α приведены на рис. 9. Здесь, как и раньше, $\delta T=80°$. Как видно из рисунка, η — убывающая функция l_1, хотя скорость роста и средняя толщина ЭС возрастают с увеличением l_1. Например, при $\alpha=400°/ч$ и $\delta T=80°$ увеличение зазора от 1 до 3 мм приводит к возрастанию средней толщины слоя в 2.5 раза, в то время как величина $\mathcal{J}_п$ возрастает в 3 раза.

3. Выращивание эпитаксиальных слоев в «градиенте температуры»

В реальном технологическом процессе при больших зазорах и высоких скоростях охлаждения не удается получить однородную по толщине эпитаксиальную пленку на всей подложке. У поверхности расплава вместо монокристаллического слоя образуется нарост из неправильно сросшихся кристаллов GaP. Анализ распределения фосфора по толщине расплава, проведенный по результатам расчетов, показал, что в верхней части расплава возникает значительное пересыщение Δc раствора относительно равновесной при данной температуре концентрации на границе:

$$\Delta c(y, t) = c(l_1/2, y, t) - q(T_0 - \alpha t),$$

где $c(l_1/2, y, t)$ — концентрация фосфора в центральной части расплава в момент времени t; $q(T_0 - \alpha t)$ — содержание фосфора в насыщенном при температуре $T = T_0 - \alpha t$ растворе.

Распределение по ширине зазора растворенного в расплаве фосфора имеет вид, приведенный на рис. 10. Кривая *1* соответствует участку, находящемуся в верхней части расплава, кривые *2* и *3* — центральной и нижней частям расплава ($t = 10$ мин).

Пересыщение Δc является важной характеристикой технологического процесса. Когда пересыщение расплава превышает критическое значение $\Delta c_{кр}$, в зазоре между подложками начинается процесс спонтанного зародышеобразования, который резко ухудшает условия роста ЭС, замедляя его скорость, понижая качество пленки. Именно с этим процессом связано наблюдаемое в экспериментах при больших зазорах и высоких скоростях охлаждения нарушение роста ЭС в верхней части подложек.

В математической модели, описанной в разд. 1, процесс спонтанного зародышеобразования не учитывается. Однако проведенные расчеты дают возможность проанализировать поведение функции $\Delta c(y, t)$ для различных величин зазоров и скоростей охлаждения. Например, при скорости снижения температуры 180°/ч и зазоре 2,7 мм значение функции $\Delta c(y, t)$ в центральной части подложек, т. е. при $y = 15$ мм, составляет при охлаждении на 25° 5% от $q(T_0 - 25)$ — концентрации фосфора в насыщенном при данной температуре растворе. Это значение Δc, пересчитанное по линии ликвидус, соответствует переохлаждению на 6°. Для $l_1 = 4{,}5$ мм Δc составляет 8%, что соответствует переохлаждению на 10°.

При $\alpha = 400$°/ч и тех же значениях l_1 Δc соответственно равно 11 и 14%.

Кроме того, необходимо отметить, что за счет конвективного массопереноса, существующего в расплаве, пересыщение у поверхности расплава больше, чем в нижней его части. Так, например, для $\alpha = 180$°/ч, $l_1 = 2{,}7$ мм, $l_2 = 30$ мм и охлаждения на 25° значение Δc при $y = 27$ мм соответствует переохлаждению на 9°, а при $y = 2$ мм — 5°. При зазоре 4,5 мм эти значения равны 18 и 6°. Поэтому

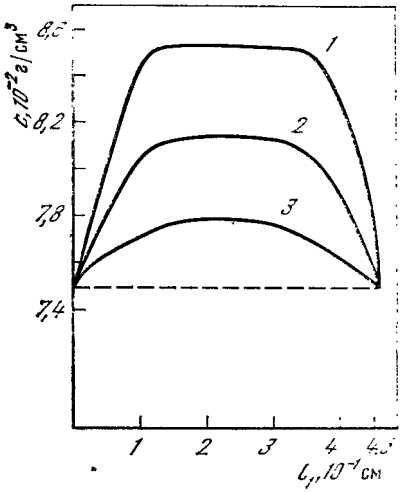
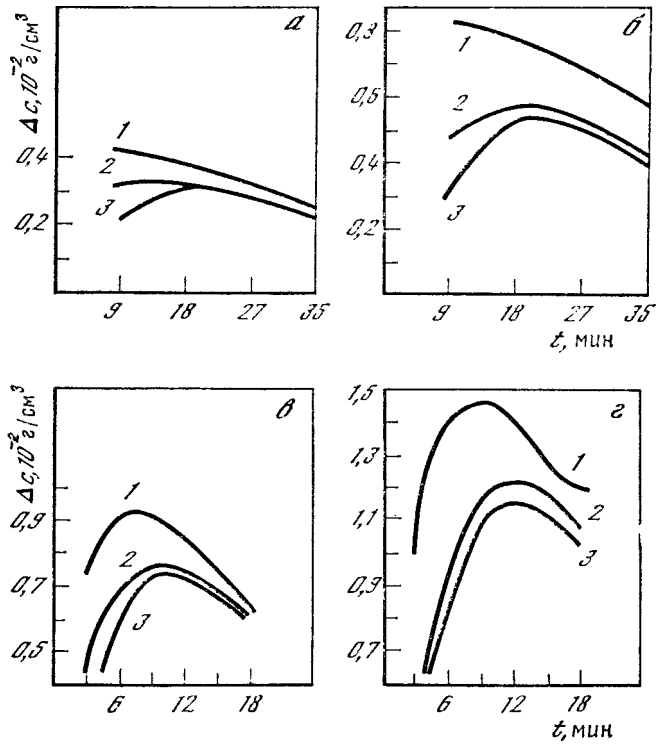


Рис. 10. Распределение по ширине зазора растворенного в расплаве фосфора ($l_1 = 4{,}5$ мм, $\alpha = 180°$/ч)

1 — $y = 27$ мм;
2—15; 3 - 3

Рис. 11. Зависимости степени пересыщения расплава от времени роста в верхней части расплава ($y = 27$ мм) при значениях $\Delta T = 0$ (1), 15 (2) и 20° (3)

а, б — $\alpha = 180°$/ч; а, в — $l_1 = 2{,}7$ мм,
в, г — $\alpha = 400°$/ч; б, г — $l_1 = 4{,}5$ мм



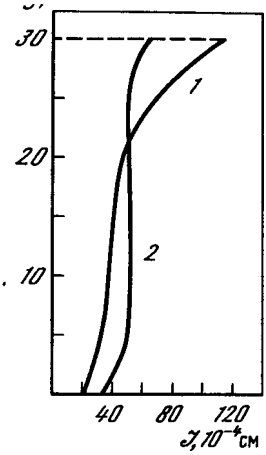


Рис. 12. Форма поверхности эпитаксиального слоя (l_1=4,5 мм, α=180°/ч)

1 — ΔT=0;
2 — ΔT=20°

в верхней части расплава при больших зазорах и скоростях охлаждения процесс спонтанного зародышеобразования проходит интенсивно.

Величину пересыщения Δc у поверхности расплава можно уменьшить, проводя выращивание эпитаксиальных слоев в «градиенте температуры», т. е. создавая вдоль подложек неоднородное распределение температуры.

В расчетах предполагалось, что на верхнем конце подложек в ходе всего процесса температура поддерживается на ΔT выше, чем на нижнем, и линейно изменяется по длине подложек:

$$T(y, t) = T(0, t) + (\Delta T/l_2)y,$$

где $T(0, t)$ — температура нижнего края, $T(0, t) = T_0 - \alpha t$.

Такое распределение температуры на подложках приводит к тому, что в граничном условии (4) функция $c|_{\Gamma_1}$ возрастает при $y \in [0, l_2]$ от $q(T_0 - \alpha t)$ до $q(T_0 + \Delta T - \alpha t)$.

На рис. 11 приведены графики зависимости степени пересыщения расплава от времени роста для зазоров l_1=2,7 и 4,5 мм, скоростей снижения температуры 180 и 400°/ч и ΔT=0, 15 и 20°. Высота расплава — 30 мм.

Как видно из этих графиков, при выращивании ЭС в «градиенте температуры» заметно снижается степень пересыщения в верхней части расплава. С понижением Δc замедляется процесс спонтанного зародышеобразования, увеличивается толщина выросшего эпитаксиального слоя, его однородность по толщине.

На рис. 12 изображена поверхность эпитаксиального слоя, выращенного при зазоре 4,5 мм и скорости охлаждения 180°/ч без градиента температуры, и в случае, когда разность температур между верхним и нижним краями подложки составляет ΔT=20°. Графики построены для момента времени, когда температура в центральной части расплава понизилась на 80°.

Необходимо подчеркнуть, что значение ΔT, обеспечивающее оптимальные условия роста, зависит от зазора и скорости охлаждения. Например, при l_1=2 мм и ΔT=25° происходит увеличение толщины эпитаксиального слоя в нижней части подложек.

Эксперименты по выращиванию ЭС фосфида галлия показали, что в соответствии с результатами математического моделирования в «градиенте температуры» даже при больших зазорах и высоких скоростях охлаждения удается получить однородные по толщине

слои полупроводникового соединения. Вместе с тем за счет замедления процесса спонтанного зародышеобразования увеличивается скорость роста ЭС и его толщина.

4. Выращивание эпитаксиальных слоев в горизонтальных системах

В практике наряду с вертикальными системами широко используются и горизонтальные (см. рис. 1, *б*). Если при вертикальном положении подложек процесс конвективного массопереноса в расплаве приводит к увеличению скорости роста в верхней части подложек и выросший эпитаксиальный слой имеет форму клина, то в горизонтальных системах наблюдается различие в толщине эпитаксиальных пленок, выращенных на подложках, находящихся над расплавом и под ним, появляется неоднородность поверхности растущей пленки [3, 5]. Указанные эффекты имеют место при превышении так называемой критической величины $l_{кр}$ зазора между подложками. Для арсенида галлия, например, $l_{кр} \approx 1$ мм.

Численное исследование процесса конвективного массопереноса в расплаве при горизонтальном положении подложек проводилось для случая получения эпитаксиальных слоев арсенида галлия. В этих расчетах коэффициенты диффузии и вязкости равны соответственно $\mathscr{D} = 1{,}78 \cdot 10^{-5}$ см²/с, $\nu = 1{,}15 \cdot 10^{-3}$ см²/с. Данные по растворимости мышьяка в расплаве арсенида галлия были взяты из работы [15].

На рис. 13 приведены линии уровня функции тока и концентрации для момента времени $t = 45$ мин и течения в области D с $l_2 = 1{,}8$ мм, $l_1 = 30$ мм, скоростью охлаждения 30°/ч, $T_0 = 950°$ С. Течение представляет собой систему вихрей, центры которых смещены к верхней подложке, лежат на одной прямой, параллельной

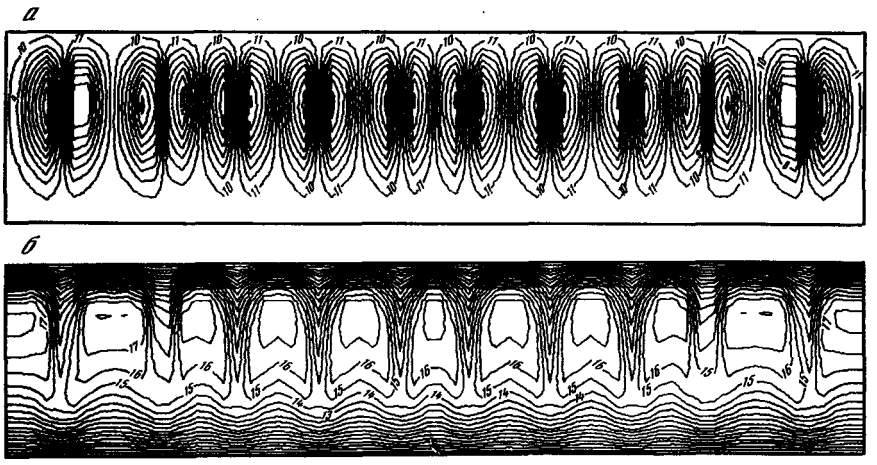


Рис. 13. Линии уровня функции тока (*а*) и концентрации (*б*) ($l_1 = 30$ мм, $l_2 = 1{,}8$ мм, $\alpha = 30°$/ч, $t = 45$ мин, $T_0 = 950°$ С)

оси ox, и в ходе всего процесса практически не перемещаются. Такой характер движения приводит к неоднородности потока растворенного компонента на подложки. В данном случае скорость роста, а вместе с ней и форма поверхности ЭС представляют собой функции, близкие к периодическим с периодом $L \approx 2{,}5 \div 3$ мм, причем амплитуда колебаний на верхней подложке больше, чем на нижней. Форма поверхности выросшего ЭС показана на рис. 14.

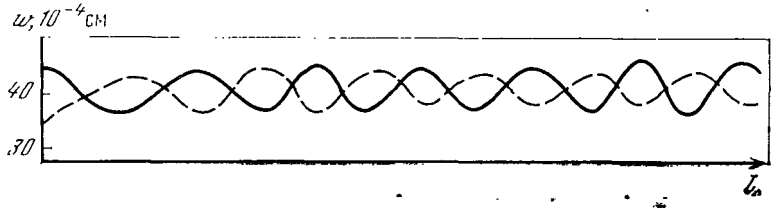


Рис. 14. Форма поверхности эпитаксиального слоя

Сплошная кривая — верхняя подложка; штриховая — нижняя подложка

Однако регулярная картина течения имеет место далеко не всегда. При других значениях длины области ($l_1 = 15{,}5$ мм) движение расплава в зазоре между подложками приобретает совсем иной характер: в ходе процесса число вихрей изменяется, их центры перемещаются вдоль оси (рис. 15). Скорость роста и поверхность ЭС уже не имеют периодической структуры.

Необходимо отметить, что незначительное изменение длины области, например $l_1 = 15$ мм вместо $l_1 = 15{,}5$ мм, может привести к тому, что в расплаве вновь возникает регулярная картина течения, полностью аналогичная той, которая представлена на рис. 13, только с меньшим числом вихрей.

На рис. 16 изображена полученная в расчетах форма поверхности эпитаксиального слоя для двух значений длины подложек: $l_1 = 1{,}5$ и 1,55 см. Величина зазора 0,18 см, скорость охлаждения 30°/ч, $T_0 = 950°$ С, $T_1 = 920°$ С ($\delta T = 30°$).

Оба расчета проводились на разностной сетке с одинаковыми значениями шагов по времени ($\tau = 1$) и по пространству ($h_x = 0{,}062$, $h_y = 0{,}12$) и отличались лишь числом узлов разностной сетки по направлению ox. Конкретные значения размеров области, при которых имеет место регулярная или нерегулярная структура течения, зависят от констант, используемых в расчетах. Например, при одних и тех же размерах области изменение коэффициента диффузии в 1,2—1,5 раза может привести к тому, что регулярная картина течения сменится нерегулярной. Расчеты проводились с постоянными значениями коэффициентов диффузии $\mathscr{D}$ и вязкости ν, в то время как в реальном процессе они не постоянны и зависят от ряда параметров, в частности от температуры. В связи с этим в ходе технологического процесса движение раствора-расплава в зазоре между подложками может изменить свой характер, переходя от регулярного к нерегулярному или наоборот.

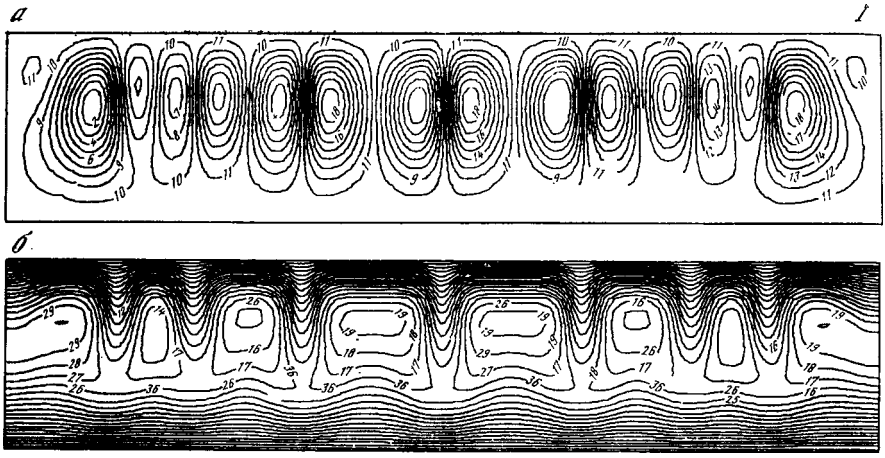


Рис. 15. Линии уровня тока (*а*) и концентрации (*б*) ($l_1=15{,}5$ мм, $l_2=1{,}8$ мм, $\alpha=30°/ч$)

I — $t=30$ мин; *II* — $t=45$ мин

Кроме того, на форму поверхности ЭС существенное влияние оказывает наличие тех или иных возмущений.

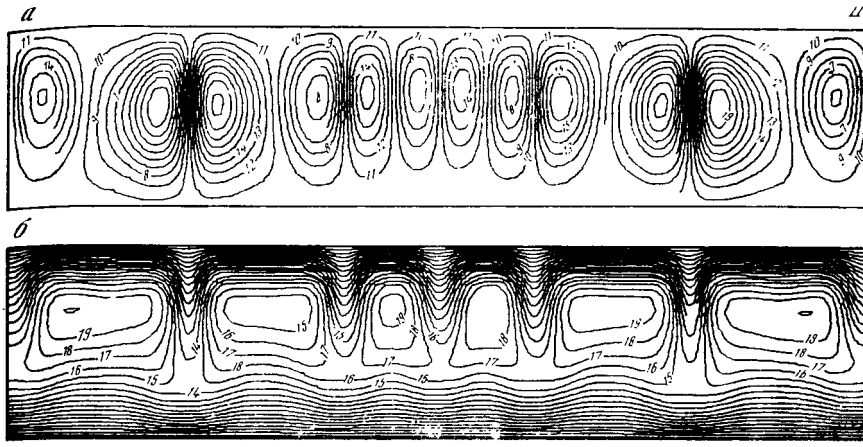
В расчетах в качестве возмущений задавались отличные от нуля на небольшом отрезке времени $[0, t_0]$ $t_0 \sim 1\% \bar{t}$ потоки растворенного компонента на боковые границы области. В реальном эксперименте это означает наличие потока мышьяка на графитовые стенки ячейки при $t \leqslant t_0$:

$$\mathcal{D}\frac{\partial c}{\partial n}\Big|_{\Gamma_2} = \begin{cases} w_0, & t \in [0, t_0], \\ 0, & t \in (t_0, \bar{t}). \end{cases}$$

На рис. 16 приведена полученная в расчетах форма поверхности ЭС на верхней подложке для $t_0=1{,}5$ мин. При скорости охлаждения 30°/ч температура расплава за это время изменится на 0,75°. Величина w_0 равна половине потока As на верхнюю подложку в момент времени $t=3$ мин.

При $t \gg t_0$ течение расплава в зазоре практически не отличается от случая, когда $w_0=0$ для всех значений t. Поверхности же эпитаксиальных слоев для случая возмущенного и невозмущенного движений заметно отличаются (см. рис. 16). Это связано с тем, что в начале процесса, когда скорость роста слоя максимальна, движение раствора-расплава, а значит и распределение потока растворенного компонента на подложку, зависит от возмущения.

Из описанных выше результатов следует, что в горизонтальном варианте течение расплава в зазоре между подложками, а вместе с ним и форма поверхности ЭС весьма чувствительны к входным данным расчета, наличию тех или иных возмущений. Даже незна-



чительное изменение параметров задачи, таких, например, как размеры области, значения коэффициентов диффузии или вязкости, скорости охлаждения расплава и т. п., может заметно повлиять на форму поверхности выросшего эпитаксиального слоя. Этим, по-видимому, объясняется то разнообразие форм поверхностей эпитаксиальных слоев, которое наблюдается в экспериментах. Как и в расчетах, здесь возникают регулярные, близкие к периодическим, и нерегулярные поверхности. В случае регулярной картины расстояния между максимумами толщины ЭС в экспериментах близки к тем, которые получаются в расчетах. На рис. 17 в качестве примера представлены результаты измерения толщины эпитаксиального слоя, полученного при скорости снижения температуры 30°/ч при зазоре 1,5 мм, $l_1=27$ мм (температурный интервал 900—890° С).

Проведенные численные исследования процесса массопереноса в растворе-расплаве при получении полупроводниковых структур методом жидкофазовой эпитаксии позволили оценить влияние раз-

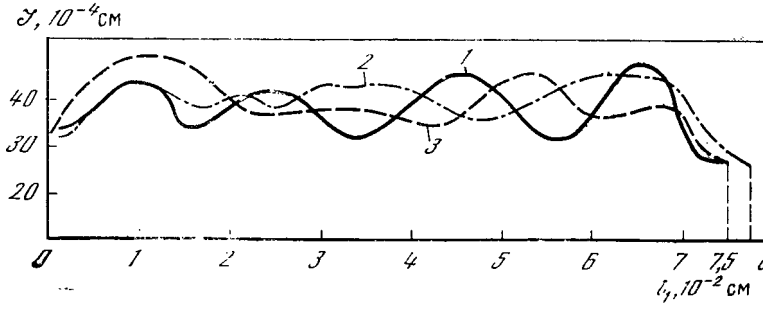


Рис. 16. Форма поверхности эпитаксиального слоя ($l_2=1{,}8$ мм, $\alpha=30°$/ч, $t=1$ ч)
1 — $l_1=15$ мм; *2* — 15,5; *3* — 15 ($\partial c/\partial n\,|_{\Gamma_2}\neq 0$)

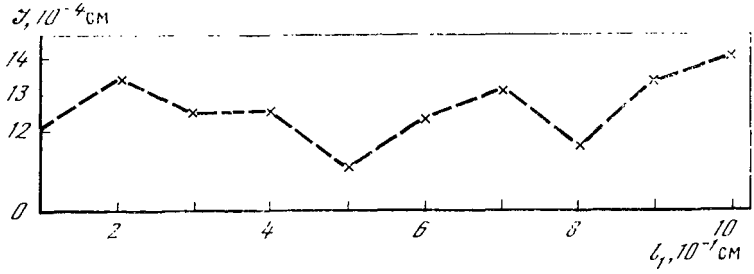


Рис. 17. Экспериментальная форма поверхности эпитаксиального слоя ($l_1=27$ мм, $l_2=1{,}5$ мм, $\alpha=30°/$ч, $t=20$ мин)

личных параметров технологического процесса на характер роста эпитаксиальных слоев. Сопоставление результатов расчетов и экспериментальных данных показало, что выбранная математическая модель хорошо описывает динамику роста слоя. Это дает возможность использовать полученные результаты при выборе параметров технологического процесса, обеспечивающих получение эпитаксиальных слоев с заданными свойствами, при оптимизации условий роста.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Андреев В. М., Долгинов Л. М., Третьянов Д. К.* Жидкофазовая эпитаксия в технологии полупроводниковых приборов. М.: Сов. радио, 1975. 328 с.
2. *Малинин А. Ю., Невский О. Б.* Теоретические основы кристаллизации при эпитаксиальном наращивании из раствора-расплава.— ДАН СССР, 1977, т. 236, № 5, с. 1177—1179.
3. *Small M. B., Crossley I.* The physical processes occuring during liquid phase epitaxial growth.— J. Cryst. Growth,, 1974, vol. 27, N 1, p. 35—48.
4. *Литвин А. А., Марончук И. Е., Марончук Ю. Е.* и др. Влияние массо- и теплопереноса на рост эпитаксиальных слоев A^3B^5 в процессе принудительного охлаждения раствора-расплава.— Изв. АН СССР. Неорган. материалы, 1980, т. 16, № 2, с. 204—207.
5. *Мажорова О. С., Попов Ю. П., Смирнов В. А., Шленский А. А.* Численное моделирование процесса выращивания монокристаллических слоев полупроводниковых материалов методом жидкофазовой эпитаксии.— Физика и химия обраб. материалов, 1983, № 4, с. 81—90.
6. *Wilcox W. R.* Influence of convection on the growth of crystals from solution.— J. Cryst. Growth, 1983, vol. 65, p. 133—142.
7. *Rosenberger F., Müller G.* Interfacial transport in crystal growth, a parametric comparison of convective effects.— J. Cryst. Growth, 1983, vol. 65, p. 91—101.
8. *Гершуни Г. З., Жуховицкий Е. М.* Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. М.: Наука, 1972. 392 с.
9. *Дмитриева Л. А., Мажорова О. С., Попов Ю. П., Твирова Э. А.* Математическое моделирование процесса жидкофазовой эпитаксии: Препр. ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР № 69. М., 1983. 19 с.
10. *Дмитриева Л. А., Мажорова О. С., Попов Ю. П., Твирова Э. А.* Исследование процесса массопереноса при жидкофазовой эпитаксии в вертикальных системах: Препр. ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР № 118. М., 1984. 30 с.
11. *Мажорова О. С., Попов Ю. П.* О методах численного решения уравнения Навье — Стокса.— Журн. вычисл. математики и мат. физики, 1980, т. 20, № 4, с. 1005—1020.

12. *Мажорова О. С., Попов Ю. П.* Матричный итерационный метод численного решения двумерных уравнений Навье — Стокса.— ДАН СССР, 1981, т. 259, № 3, с. 526—531.
13. *Tiller W. A., Kang C.* On the growth rate of crystals from solution.— J. Cryst. Growth, 1968, vol. 2, N 1, p. 69—74.
14. Физико-химические свойства элементов: Справ. Киев, 1965. 807 с.
15. *Hall R. N.* Solubility of III—V compound semiconductors of column III liquides.— J. Electrochem. Soc., 1963, vol. 110, N 5, p. 385—399.

УДК 536.25

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНВЕКЦИИ И КОНЦЕНТРАЦИОННЫХ ПОЛЕЙ ПРИ РОСТЕ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ СЛОЕВ

Н. А. Верезуб, В. И. Полежаев

Введение

Метод жидкостной эпитаксии используется для получения высококачественных слоев полупроводников для непосредственного применения в приборах. Этот метод заключается в кристаллизации из раствора-расплава разбавленного раствора кристаллизуемого компонента в легкоплавком растворителе. Толщина и структура эпитаксиального слоя определяются температурным диапазоном роста, скоростью охлаждения, геометрией и ориентацией области, занятой раствором-расплавом.

Приближенные значения скорости роста и толщины эпитаксиального слоя получены в ряде работ [1—3] в предположении молекулярного переноса растворенного компонента в расплаве. Однако этот подход не объясняет наличия негладкой поверхности, гребенчатых структур [4], зависимости толщины слоя от расположения подложки и объема расплава, изменения состава по площади слоя [5, 6]. Одной из причин этих эффектов является конвекция в расплаве [7—9], обусловленная изменением растворимости при понижении температуры и возникновением градиента концентрации. В зависимости от расположения подложек может реализовываться неустойчивость Рэлея—Бенара в горизонтальном слое расплава или гидродинамическая неустойчивость встречных потоков в вертикальном слое [10, с. 32—108].

При эпитаксиальном наращивании непосредственное наблюдение потоков в жидкой фазе весьма затруднено из-за непрозрачности (в случае полупроводниковых систем) и малых размеров области, занятой расплавом. Детальный анализ конвективных процессов может быть проведен при использовании математической модели на основе уравнений Навье—Стокса. В работе [11], где реализован такой подход, расплав полагается системой с внутренними источниками, мощность которых изменяется в соответствии с диаграммой состояния.

В настоящей работе также разрабатывается модель процесса жидкостной эпитаксии исходя из уравнений Навье—Стокса в при-

ближении Буссинеска [12], однако учет диаграммы температура—состав проводится путем постановки граничных условий для концентрации на границах расплава с подложками. Рассмотрены вопросы численной реализации, приведены результаты параметрических исследований для земных и орбитальных экспериментов при различной ориентации слоев.

1. Математическая модель и методика численной реализации

1.1. Предположения, исходные уравнения

Рассматриваемая ниже математическая модель процесса жидкостной эпитаксии строится для варианта роста слоев из ограниченного объема насыщенного раствора-расплава на две подложки (рис. 1) в следующих предположениях:

эпитаксиальный рост рассматривается в изотермических условиях,

поля течения и концентрации двумерные,

зависимость $c(T)$ по диаграмме состояния полагается линейной,

изменение размеров области за счет роста слоев не учитывается,

исходная поверхность подложки полагается гладкой,

кристаллизация происходит только на подложках,

кинетические явления на границе подложка—расплав не рассматриваются [13].

Моделирование осуществляется на основе методики и комплекса программ, рассмотренных в работе [14]. Исходная система двумерных нестационарных уравнений в переменных вихрь ω, функция тока ψ, концентрация C в декартовой системе координат в безразмерной форме имеет вид

$$\omega_t + U\omega_x + V\omega_y = \omega_{xx} + \omega_{yy} + F, \qquad \omega = \psi_{xx} + \psi_{yy}, \tag{1}$$

$$C_t + UC_x + VC_y = \mathrm{Sc}^{-1}(C_{xx} + C_{yy}),$$

где $U=\psi_y$; $V=-\psi_x$; $C=c/c_0$; $F=\mathrm{Gr}_D(C_x\cos\varphi + C_y\sin\varphi)$; Sc — число Шмидта; Gr_D — концентрационное число Грасгофа; φ — угол между направлением действия массовой силы и осью y; c_0 — размерная начальная концентрация B^5 по диаграмме состояния; c, C — текущая размерная и безразмерная концентрации. В качестве масштабов длины, времени, скорости и концентрации выбраны соответственно H, H^2/ν, ν/H, c_0, где H — характерный размер; ν — кинематическая вязкость, см²/с.

Граничные условия задаются в следующем виде:

$$0 \leqslant x \leqslant L, \quad y=0, \quad y=H: C=C_{\text{д. с}},$$

$$x=0, \quad x=L, \quad 0<y<H: \partial C/\partial n=0,$$

где $C_{д.с}$ — безразмерное значение концентрации по диаграмме состояния. На всех границах заданы условия прилипания: $\psi=0$, $\partial\psi/\partial n=0$. Начальные условия: $\psi=0$, $\omega=0$, $C=1$.

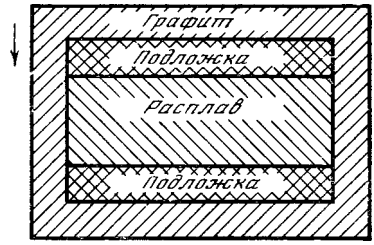


Рис. 1. Горизонтальный вариант ячейки роста

Искомое решение (например, поле концентрации) зависит от координат, безразмерного времени $Fo_D=Dt/H^2$ (D^t—диффузионное время процесса), значений безразмерных критериев подобия, геометрии области G_1, начальных условий G_2, граничных условий G_3 и может быть представлено так:

$$C=f(x,\ y,\ Fo_D,\ Sc,\ Gr_D,\ G_1,\ G_2,\ G_3). \qquad (2)$$

Установление зависимости (2) — основная задача моделирования конвективных процессов в расплаве. Если модель адекватна реальному процессу, то равенство безразмерных величин в правой части в модели и в этом процессе является необходимым и достаточным условием его математического моделирования.

Система уравнений (1) решается методом переменных направлений с использованием монотонной аппроксимации [15]. Граничные условия для ψ, ω аппроксимируются по методу, изложенному в работе [16]. Расчеты проведены на ЭВМ ЕС-1040, -1055 с использованием равномерных сеток 21×33, 21×65, 21×129.

В процессе счета вычислялись значения функции $Q=Sc^{-1}\int\limits_t C_Y dt'$, характеризующей величину безразмерного потока массы на единицу длины подложки за время t и ответственной за геометрическую структуру слоя.

1.2. Отработка расчетной методики

Численному моделированию процесса жидкостной эпитаксии предшествовала отработка модели на тестовых задачах [17, 18] и некоторые модификации схемы [14].

По сравнению с методикой [14] в расчетную схему введена релаксация вихря на границе по формуле

$$\omega^{\Gamma}_{n+1}=(1-\alpha)\,\omega^{\Gamma}_{n}+\omega^{\Gamma}_{n+1},$$

где $\alpha\in(0,\ 1)$ — параметр релаксации. Эта формула используется во внутреннем итерационном цикле, связанном с расчетом ω на границе (подробнее см. [19]). При выборе параметра релаксации из диапазона 0,3—0,7 временной шаг в модельной задаче при подогреве сбоку жидкости, ограниченной твердыми стенками ($Pr=110$, $Gr=130$), удается увеличить примерно в 10^3 раз.

При практической отработке методики вначале были выполнены тесты результатов расчетов для простейших модельных задач

Таблица 1. Максимальные значения средних пульсаций температуры, скоростей и число Нуссельта для горизонтального слоя при подогреве снизу ($Pr = 0{,}71$, $Ra = 3{,}81225 \cdot 10^5$)

Номер варианта	Сетка	$\sqrt{\langle T^2 \rangle_{max}}$	$\sqrt{\langle U^2 \rangle_{max}}$	$\sqrt{\langle V^2 \rangle_{max}}$	Nu
1	17×17	0,204	0,244	0,268	7,34
2	33×17	0,176	0,215	0,262	6,51
3	17×17	0,167	0,250	0,253	8,6
4	17×17×17	0,166	0,163	0,207	7,75±0,35*
5	33×17×17	0,157	0,151	0,207	7,44±0,29*

* Разброс данных указан в работе [18].

тепловой конвекции. В зависимости от величины числа Рэлея могут реализовываться как стационарные, так и нестационарные нерегулярные режимы конвекции, достоверный расчет которых представляет особые трудности. Максимальные значения функции тока для стационарного режима тепловой конвекции в прямоугольной области с твердыми границами при заданных температурах на боковых стенках и линейным профилем температур на верхнем и нижнем основаниях удовлетворительно согласуются с данными работы [17].

Табл. 1 содержит результаты расчетов осредненных характеристик нерегулярной конвекции в горизонтальном слое, ограниченном твердыми поверхностями, при подогреве снизу. На боковых границах ставятся периодические граничные условия, длина периода L/H взята равной 2,8. Варианты 3—5 соответствуют аналогичным осредненным характеристикам из [18] для двумерного и трехмерного случаев.

Согласование данных осредненных двумерных полей в работе [18] и нашей работе с точки зрения практических задач следует признать удовлетворительным, учитывая большое число сделанных выше предположений и степень неопределенности в исходных коэффициентах переноса.

1.3. Оценка критериев подобия для жидкостной эпитаксии в бинарных системах A^3—A^3B^5

Анализ процессов, происходящих в жидкой фазе, проведен для растворов-расплавов бинарных систем In—InSb, Ga—GaSb, In—InAs, In—InP, Ga—GaAs, Ga—GaP по значениям следующих чисел подобия: $Pr = \nu/a$ — число Прандтля, $Sc = \nu/D$ — число Шмидта, $Ra = g\beta_{\rho_T} H^3 \Delta T/\nu a = PrGr$ — число Рэлея, $Ra_D = g\beta_{\rho_C} H^3 \Delta c/\nu D = ScGr_D$ — концентрационное число Рэлея. При наличии свободной поверхности в рассмотрение включаются тепловое и концентрационное числа Марангони. В критерии подобия, кроме упомянутых выше, входят следующие параметры: ρ — плотность, г/см^3, a — температуропроводность, см^2/с; D — коэффициент диффузии, см^2/с; ΔT, Δc — характерные разности температуры и концентрации;

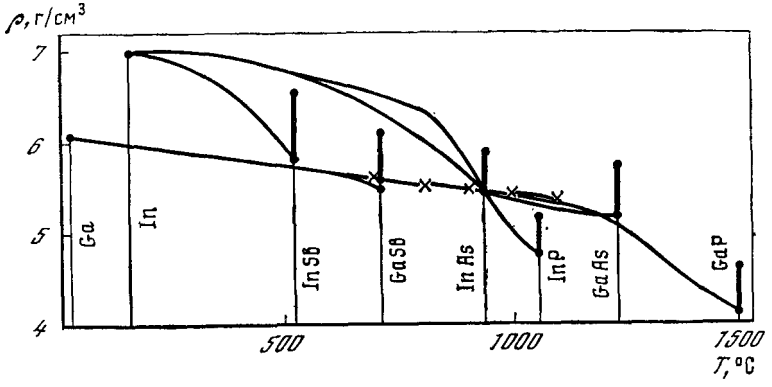


Рис. 2. Плотность насыщенных растворов систем A^3—A^3B^5

Кривые — расчет; значки — эксперимент [7]

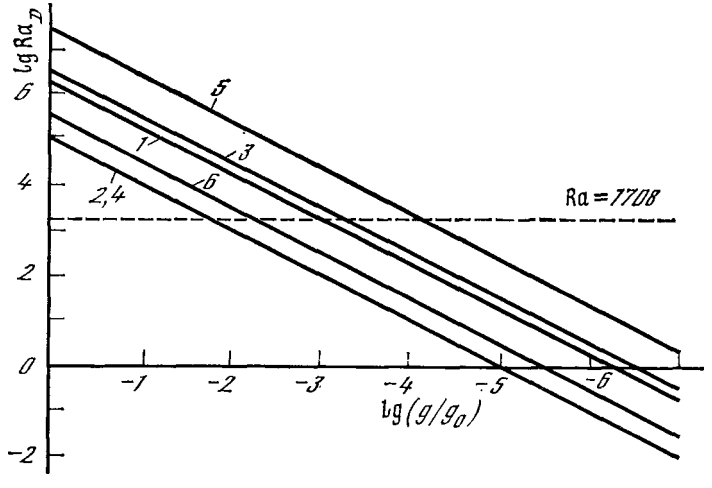


Рис. 3. Зависимость Ra_D от g/g_0 ($H = 0{,}1$ см)

1 — In—InSb; *2* — Ga—GaSb; *3* — In—InAs; *4* — In—InP; *5* — Ga—GaAs; *6* — Ga—GaP

$\beta_{\rho T}$, $\beta_{\rho C}$ — коэффициенты, характеризующие изменение плотности с изменением температуры и концентрации; g — ускорение, обусловленное действием массовой силы.

Конкретные значения физико-химических параметров раствора-расплава зависят от температуры и концентрации растворенного компонента. Концентрация в свою очередь определяется температурой [20] и изменяется в соответствии с диаграммой температура—состав [21]. Экспериментальные данные по зависимости параметров насыщенных растворов рассматриваемых систем от температуры в литературе отсутствуют, за исключением данных по

Таблица 2. Критерии подобия систем $A^3—A^3B^5$

Система	Pr	Sc	$(Gr/H^3\Delta T)\cdot 10^{-5}$	$(Gr_D/H^3)\cdot 10^{-7}$
In—InSb	0,007	118	1,2	2,0
Ga—GaSb	0,0076	32	0,39	0,45
In—InAs	0,0022	55	4,8	7,1
In—InP	0,0021	4	3,5	3,5
Ga—GaAs	0,0056	96	0,71	30
Ga—GaP	0,0047	21	1,2	1,8

плотности системы Ga—GaAs [7]. Значения $\rho(T, c)$ рассчитывались по значениям $\rho(T)$ для In или Ga и A^3B^5 с учетом диаграмм состояния (рис. 2). Аналогично вычислялись значения $\nu(T, c)$, $a(T, c)$.

В табл. 2 представлены критерии подобия для систем In, Ga—Sb, As, P по данным работ [13, 22—34]. Значения Gr и Gr_D рассчитаны для земных условий ($g_0=980$ см/с^2). Общей закономерностью рассматриваемых систем является существенное преобладание конвекции, обусловленной градиентом концентрации, над тепловой, что позволяет изучать этот процесс в изотермических условиях, исключив из рассмотрения тепловую конвекцию.

В горизонтальном слое для каждой из рассматриваемых систем в зависимости от условий процесса (см. рис. 1) существует критическая толщина H_*, соответствующая критическому значению числа Рэлея [10], при $H<H_*$ движения нет. С увеличением H в жидкой фазе развивается конвекция в соответствии с диаграммой режимов [35] в зависимости от ориентации слоя расплава и горизонтальных размеров подложки.

На рис. 3 представлены границы диффузионного режима в зависимости от микроускорений для каждой из рассматриваемых систем, построенные исходя из значения Ra=1708 для модельной задачи о конвекции в горизонтальном слое жидкости, ограниченном твердыми поверхностями и подогреваемом снизу.

2. Результаты параметрического исследования процесса роста эпитаксиальных слоев

При численном моделировании горизонтального варианта эпитаксиального наращивания в конце эксперимента получены слои различной геометрической структуры. На рис. 4 представлены распределения вдоль подложек потоков массы кристаллизуемого компонента, по которым оценивается геометрическая однородность слоя. Соответствующие поля концентрации и структура движения в расплаве показаны на рис. 5. В зависимости от величины Ra_D различаются три режима движения.

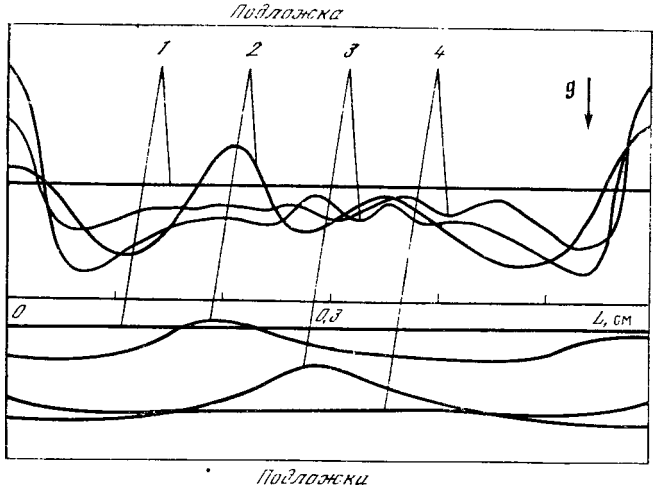


Рис. 4. Зависимость геометрической структуры слоев от значения Ra_D ($Sc=100$, $\varphi=0$, $L/H=3$, $v_{охл}=1°$/мин)

Ra_D: *1* — 10^5; *2* — 10^6; *3* — 10^7; *4* — $2\cdot10^7$

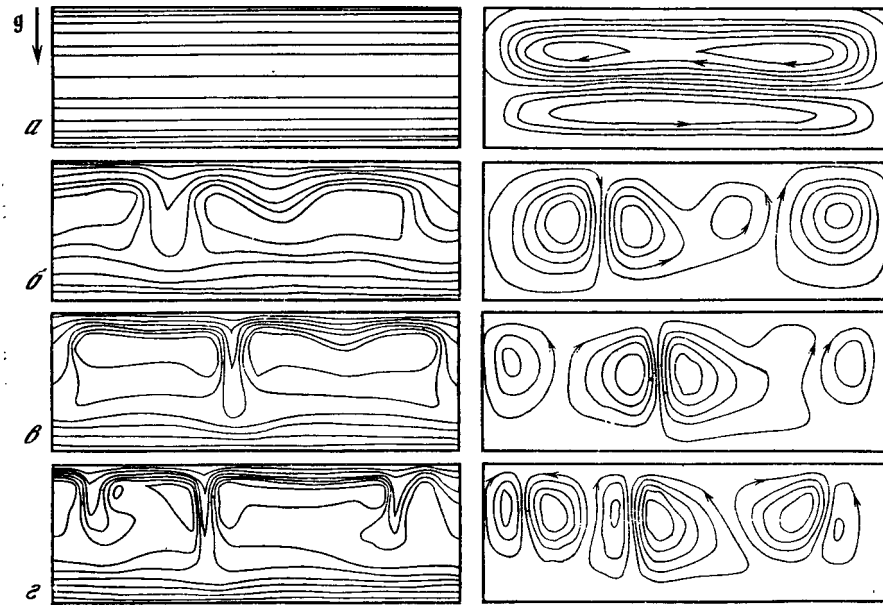


Рис. 5. Поля концентрации и структура движения в расплаве ($Sc=100$, $\varphi=0$, $L/H=3$, $v_{охл}=1°$/мин)

а — $Ra_D=10^5$ ($\psi_{max}=1{,}1\cdot10^{-5}$, $|-\psi_{max}|=7{,}2\cdot10^{-6}$);

б — $Ra_D=10^6$ ($\psi_{max}=8{,}2\cdot10^{-2}$, $|-\psi_{max}|=7{,}8\cdot10^{-2}$);

в — $Ra_D=10^7$ ($\psi_{max}=2{,}2\cdot10^{-1}$, $|-\psi_{max}|=2{,}4\cdot10^{-1}$);

г — $Ra_D=2\cdot10^7$ ($\psi_{max}=2{,}3\cdot10^{-1}$, $|-\psi_{max}|=2{,}9\cdot10^{-1}$)

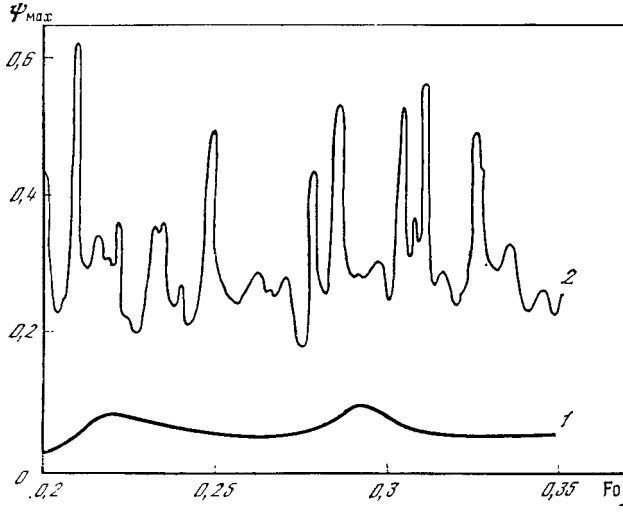


Рис. 6. График максимального значения функции тока ($Sc=100$, $\varphi=0$, $L/H=3$, $v_{охл}=1°$/мин)

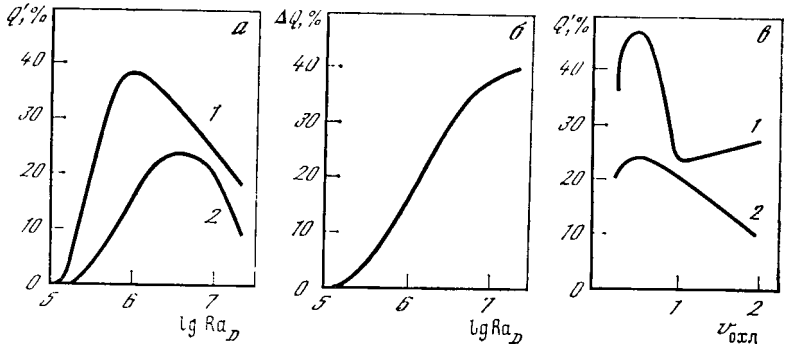
1 — $Ra_D=10^6$; 2 — $Ra_D=2\cdot10^7$

1. Регулярный стационарный режим. При $Ra_D=10^5$, что соответствует орбитальным условиям, процесс проходит в режиме, близком к диффузионному. При этом получаются наиболее однородные слои.

2. Регулярный нестационарный режим, который имеет место при числе Рэлея до 10^6. В этом случае растут неравномерные слои на верхней и нижней подложках.

3. Нерегулярный нестационарный режим, который реализуется при $Ra_D \geqslant 10^7$ (отметим, что $Ra_D=10^7$ соответствует земным условиям) и отличается повышением геометрической однородности слоев из-за сильного и нерегулярного движения в жидкой фазе. Однако нерегулярность движения приводит на практике к значительной неоднородности электрофизических свойств в легированных эпитаксиальных слоях.

На рис. 6 показано изменение во времени максимального значения функции тока в области, соответствующее упоминавшимся выше регулярному (кривая *1*) и нерегулярному (кривая *2*) нестационарным режимам. Максимальная неоднородность наблюдается в слоях, полученных в условиях регулярного нестационарного режима движения, что является следствием общего принципа максимума температурного и концентрационного расслоения в замкнутых объемах, установленного в работе [36]. Отметим, что для ячейковой конвекции максимальная неоднородность в распределении местного потока тепла вдоль границы была установлена в работе [37].



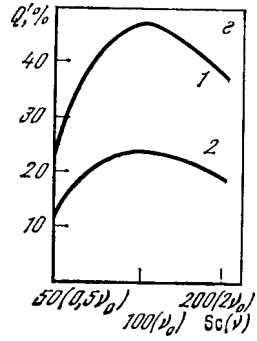


Рис. 7. Влияние Ra_D, $v_{охл}$ и вязкости расплава на геометрическую структуру слоев

1, 2 — слой на верхней и нижней подложках соответственно

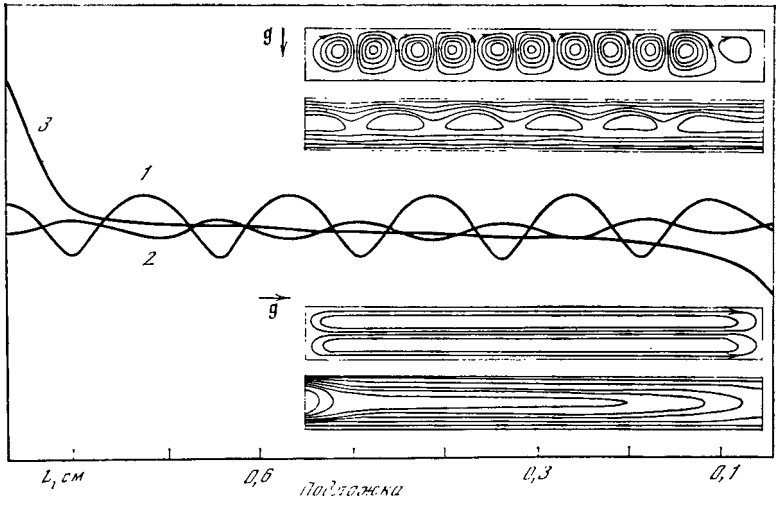


Рис. 8. Зависимость геометрической структуры слоев от ориентации области ($Sc=100$, $Ra_D=1{,}25\cdot10^6$, $L/H=9$, $v_{охл}=1°$/мин)

1, 2 — $\varphi=0$, слой на верхней и нижней подложках соответственно; *3* — $\varphi=90°$

На рис. 7 показана зависимость геометрической структуры слоев от параметров процесса. Определены значения функций $Q'=[(Q_{max}-Q_{min})/Q_{max}]\cdot 100\%$, описывающей неравномерность слоя по толщине, и $\Delta Q=[(Q_в-Q_н)/Q_в]\cdot 100\%$, характеризующей разницу в толщине слоев на верхней и нижней подложках. Смена режимов движения ответственна за нелинейность зависимости Q' от Ra_D, $v_{охл}$, ν. С увеличением Ra_D разница в толщине слоев на верхней и нижней подложках растет.

Увеличение скорости охлаждения, как и рост Ra_D, приводит к усилению нерегулярности течения в области.

Уменьшение толщины области расплава приводит к изменению структуры движения и геометрической структуры слоев (рис. 8). В вертикальном варианте формы слоев одинаковые на обеих подложках с ярко выраженным клином — это результат перехода от ячейкового к плоскопараллельному движению в области.

3. Моделирование орбитальных экспериментов

Модель процесса жидкостной эпитаксии использована для отработки и анализа результатов экспериментов по росту эпитаксиальных слоев в орбитальных условиях. Так как точное значение φ в этих условиях неизвестно, то расчеты проведены для различных значений $\varphi=0$, 45, 90°. Использованы параметры конкретного процесса [12]. В результате одного из экспериментов получены ровные слои арсенида галлия толщиной 192 и 144 мкм на подложках ориентации (100) и (111) соответственно. Из сопоставления с результатами расчетов можно сделать вывод о том, что в орбитальном эксперименте результирующий вектор **g** был направлен преимущественно перпендикулярно к подложкам, его величина составляла $\sim 10^{-5}\, g_0$.

В заключение отметим, что данные параметрических исследований позволяют сделать общий вывод о том, что для процессов роста эпитаксиальных слоев, удовлетворяющих условию $Ra_D \leqslant Ra_*$ (Ra_* — значение числа Рэлея, соответствующее максимальной геометрической неоднородности слоя (см. рис. 7, *а*)), переход в состояние невесомости будет способствовать уменьшению неоднородности, как и показывают результаты выполненных орбитальных экспериментов. Ввиду того что слои раствора-расплава, как правило, тонкие, упомянутое условие выполняется для широкого класса процессов жидкостной эпитаксии, это является одним из весьма важных аргументов в пользу космического производства эпитаксиальных структур. Другим важным обстоятельством в рассмотренном варианте жидкостной эпитаксии является наличие твердых подложек, в связи с чем отсутствует сложное воздействие термо- и концентрационно-капиллярной конвекции.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Minden H. T.* Constitutional supercooling in GaAs liquid phase epitaxy.— J. Cryst. Growth, 1970, vol. 6, p. 228—231.
2. *Bryskiewicz T.* Investigation of the mechanism and kinetics of growth of LPE GaAs.— J. Cryst. Growth, 1978, vol. 43, p. 101—104.
3. *Чикичев С. И., Иоффе В. М.* Расчет примесных профилей при неизотермической жидкофазной эпитаксии арсенида галлия.— Электрон. техника. Науч.-техн. сб. Материалы, 1984, вып. 1(186), с. 34—35.
4. *Rode D. L.* Isothermal diffusion theory of LPE: GaAs, GaP, bubble garnet.— J. Cryst. Growth, 1973, vol. 20, p. 13—17.
5. *Moon R. L.* The influence of growth solution thickness of the LPE layer thickness and constitutional supercooling requirement for diffusion-limited growth.— J. Cryst. Growth, 1974, vol. 27, p. 62—65.
6. *Литвин А. А., Марончук И. Е., Марончук Ю. Е.* и др. Влияние массо- и теплопереноса на рост эпитаксиальных слоев A^3B^5 в процессе принудительного охлаждения раствора-расплава.— Изв. АН СССР. Неорган. материалы, 1980, т. 16, № 2, с. 204—212.
7. *Мильвицкий М. Г., Орлов В. П., Цепилевич В. Г.* Особенности процессов массопереноса при жидкостной эпитаксии.— Изв. АН СССР. Неорган. материалы, 1980, т. 16, № 7, с. 1159—1164.
8. *Жовнир Г. И., Марончук И. Е.* Процессы массопереноса при получении эпитаксиальных структур соединений A^3B^5 из жидкой фазы.— Автометрия, 1980, № 6, с. 22—28.
9. *White E. A. D., Wood J. D. C.* Heat and mass transfer in LPE processes.— J. Cryst. Growth, 1972, vol. 17, p. 315—317.
10. *Гершуни Г. З., Жуховицкий Е. М.* Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. М.: Наука, 1972. 392 с.
11. *Мажорова О. С., Попов Ю. П.* Матричный итерационный метод численного решения двумерных уравнений Навье — Стокса.— ДАН СССР, 1981, т. 259, с. 535—540.
12. *Верезуб Н. А., Копелиович Э. С., Полежаев В. И., Раков В. В.* Особенности процессов тепломассообмена в расплавах некоторых элементарных полупроводников и соединений типа A^3B^5 в условиях невесомости.— В кн.: Технологические эксперименты в невесомости. Свердловск: УНЦ АН СССР, 1983, с. 79—92.
13. *Кузнецов В. В., Москвин П. П., Садовски В., Сорокин В. С.* Кинетика процесса растворения арсенида индия в расплавах системы индий — мышьяк.— Изв. АН СССР. Неорган. материалы, 1983, т. 19, № 4, с. 541—544.
14. *Бунэ А. В., Грязнов В. Л., Дубовик К. Г., Полежаев В. И.* Методика и комплекс программ численного моделирования гидродинамических процессов на основе нестационарных уравнений Навье — Стокса: Препр. ИПМ АН СССР № 173. М., 1981, 70 с.
15. *Самарский А. А.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1977. 656 с.
16. *Полежаев В. И., Грязнов В. Л.* Метод расчета граничных условий для уравнений Навье — Стокса в переменных «вихрь — функция тока».— ДАН СССР, 1974, т. 219, с. 301—304.
17. *Онянов В. А., Тарунин Е. Л.* Численные эксперименты по использованию различных разностных схем для задач свободной конвекции в замкнутой области.— В кн.: Гидродинамика. Пермь: Перм. ун-т, 1975, № 327, с. 156—173.
18. *Grotzbach G.* The direct numerical simulation of laminar and turbulent Benard convection.— J. Fluid Mech., 1982, vol. 119, N 6, p. 27—52.
19. *Бунэ А. В., Дубовик К. Г., Полежаев В. И., Федюшкин А. И.* Тесты и модификации конечно-разностных схем для двумерных уравнений Навье — Стокса: Препр. ИПМ АН СССР № 260. М., 1985. 60 с.
20. *Hall R. N.* Solubility of III—V compound semiconductors in column III liquids.— J. Electrochem. Soc., 1963, vol. 110, N 5, p. 385—389.
21. *Нашельский А. Я.* Производство полупроводниковых материалов. М.: Металлургия, 1982. 310 с.

22. *Данилевский М. Я.* О связи поверхностных свойств антимонида галлия с процессами роста легированных кристаллов этого соединения.— В кн.: Поверхностные явления в расплавах. Киев: Наук. думка, 1968, с. 73—78.
23. *Мильвидский М. Г., Сабанова Л. Д., Раков В. В.* Исследование взаимной диффузии компонентов в расплавах галлий — арсенид галлия.— Изв. АН СССР. Неорган. материалы, 1976, т. 12, № 6, с. 1108—1111.
24. *Chung E., Wilcox W.* Inhomogeneities due to thermocapillary flow in floating zone melting.— J. Cryst. Growth, 1975, vol. 28, p. 8—14.
25. *Вигдорович В. Н., Невский О. Б., Чофу Ю. Д.* Определение коэффициента диффузии фосфора в галлии.— Электрон. техника. Науч.-техн. сб. Материалы, 1979, вып. 5(130), с. 58—60.
26. *Амашукели М. Д., Каратаев В. В., Мильвидский М. Г.* и др. Исследование взаимной диффузии компонентов в расплавах системы индий — мышьяк.— Изв. АН СССР. Неорган. материалы, 1979, т. 15, с. 1161—1163.
27. *Tamargo M. C., Reynolds C. L.* Use of sapphire liners to eliminate edge growth in LPE (Al, Ga)As.— J. Cryst. Growth, 1981, vol. 55, p. 325—329.
28. *Регель А. Р., Глазов В. М.* Физические свойства электронных расплавов. М.: Наука, 1980. 296 с.
29. *Стрельченко С. С., Лебедев В. В.* Соединения A^3B^5: Справ. М.: Металлургия, 1984. 144 с.
30. *Kazantsev E. I.* Industrial furnaces. Moscow: Mir, 1977. 375 p.
31. *Зеликман А. Н., Меерсон Г. А.* Металлургия редких металлов. М.: Металлургия, 1973. 607 с.
32. Свойства элементов/Под ред. Г. В. Самсонова. М.: Металлургия, 1976. 600 с.
33. *Ниженко В. И., Флока Л. И.* Поверхностное натяжение жидких металлов и сплавов. М.: Металлургия, 1981. 208 с.
34. *Шпильрайн Э. Э., Фомин В. А., Сковородько С. Н., Сокол Т. Ф.* Исследование вязкости жидких металлов. М.: Наука, 1983. 243 с.
35. *Hart J. E.* Stability of the flow in a differentially heated inclined box.— J. Fluid Mech., 1971, vol. 47, N 3, p. 547—576.
36. *Полежаев В. И., Федюшкин А. И.* Гидродинамические эффекты концентрационного расслоения в замкнутых объемах.— Изв. АН СССР. МЖГ, 1980, № 3, с. 12—18.
37. *Полежаев В. И., Власюк М. П.* О ячейковой конвекции в бесконечно длинном горизонтальном слое газа, подогреваемом снизу.— ДАН СССР, 1970, т. 195, № 5, с. 1058—1061.

УДК 548.55 : 519.6

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛО- И МАССООБМЕНА В ГАЗОФАЗОВОМ РЕАКТОРЕ

Б. П. Герасимов, А. В. Лесуновский, В. В. Митин, Т. А. Борисова, Д. Я. Ровенский

Введение

Изучение течений многокомпонентных газовых смесей представляет большой интерес, поскольку эти процессы играют важную роль в природе и технике. Успешное протекание многих химических реакций, тепло- и массообмена зависит от правильного управления движением газовых смесей в теплообменниках, системах массообмена и химических реакторах. Изучать конвективное движение на достаточно полных физических моделях, охватывающих все основ-

ные эффекты, позволяют лишь методы математического моделирования [1].

Вычислительный эксперимент дает возможность провести детальное параметрическое исследование задачи, выявить основные закономерности и даже получить такую информацию об изучаемом явлении, которую невозможно извлечь в натурном эксперименте. Конечно, вычислительный эксперимент не заменяет других методов исследования, а дополняет их.

Целью настоящей работы является численное моделирование тепловой и концентрационной смешанной конвекции в цилиндрическом вертикальном эпитаксиальном реакторе с пьедесталом типа «пирамида». Изучается зависимость структуры конвекции от характера вдува газовой смеси, температурных условий на пьедестале и геометрии модельного реактора для получения эпитаксиальных структур кремния методом водородного восстановления хлорсиланов.

1. Постановка задачи

Рассмотрим нестационарную смешанную конвекцию многокомпонентной реагирующей газовой смеси в двумерной цилиндрической полости (рис. 1) высотой Z и радиуса R, внизу на оси которой находится усеченный конус высотой Z_1 и радиусами верхнего и нижнего оснований R_1 и R_2 соответственно. Газовая смесь равномерно и стационарно поступает через круглое отверстие радиуса $R_{вн}$ в верхнем основании реактора и выходит через кольцевой зазор между нижним основанием конуса и боковой стенкой реактора. Температура конуса T_3 превышает температуру стенок T_2, которая выше температуры вдуваемой смеси T_1. Поскольку газ в реакторе прозрачен для теплового излучения пьедестала, перенос излучения можно не рассматривать, хотя лучистый поток с поверхности пьедестала может быть значительным.

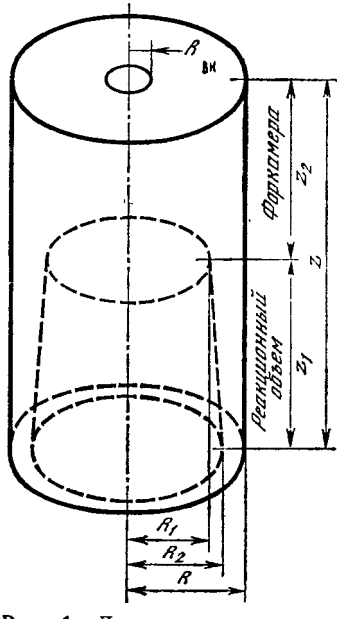


Рис. 1. Двумерная цилиндрическая полость, внизу на оси которой находится усеченный конус

Градиенты температуры и концентраций порождают в полости свободную конвекцию. Конвективное движение многокомпонентной газовой смеси в осесимметричном реакторе будем описывать системой уравнений Навье—Стокса в приближении Буссинеска [2] совместно с уравнениями химической кинетики и переноса каждого компонента. В переменных функция тока ψ — вихрь ω исходная система

имеет следующий безразмерный вид:

$$\frac{\partial\omega}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial r}(v_r\omega)+\frac{\partial}{\partial z}(v_z\omega)=\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\nu(T)\,\omega)\right)+\frac{\partial^2}{\partial z^2}(\nu(T)\,\omega)-$$
$$-G\frac{\partial T}{\partial r}-\sum_{i=1}^{N}G^{(i)}\frac{\partial c^{(i)}}{\partial r},$$

$$\frac{\partial T}{\partial t}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rv_rT)+\frac{\partial}{\partial z}(v_zT)=$$
$$=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\varkappa(T)\frac{\partial T}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\varkappa(T)\frac{\partial T}{\partial z}\right)+Q(r,z), \qquad (1)$$

$$\frac{\partial c^{(i)}}{\partial t}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rv_rc^{(i)})+\frac{\partial}{\partial z}(v_zc^{(i)})=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\varphi^{(i)}(T)\frac{\partial c^{(i)}}{\partial r}\right)+$$
$$+\frac{\partial}{\partial z}\left(\varphi^{(i)}(T)\frac{\partial c^{(i)}}{\partial z}\right)+F^{(i)}(c^{(1)},\ldots,c^{(N)}),$$

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r}\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}=-\omega,\quad i=1,\ldots,N-1,$$

где $v_r=-\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial z}$; $v_z=\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r}$; $\omega=\frac{\partial v_r}{\partial z}-\frac{\partial v_z}{\partial r}$; $c^{(N)}=1-\sum_{i=1}^{N-1}c^{(i)}$;

$G=\beta_T g$; $G^{(i)}=\beta_{c^{(i)}}g$; $V=(v_r,\ v_z)$ — скорость течения; T — отклонение температуры от T_1; $c^{(i)}$ — мольная концентрация i-го компонента; $Q(r,\ z)$ — мощность тепловых источников; $F^{(i)}(c^{(1)},\ \ldots,\ c^{(N)})$ — мощность источников или стоков, определяемых кинетикой химических реакций; $\nu(T)=\nu_0[(T+T_1)/T_0]^{0,678}$ — коэффициент кинематической вязкости; $\varkappa(T)=\varkappa_0[(T+T_1)/T_0]^{0,78}$ — коэффициент температуропроводности; $\varphi^{(i)}(T)=\varphi_0^{(i)}[(T+T_1)/T_0]^{0,78}$ — коэффициент диффузии i-го компонента в смеси (ν_0, $\varkappa_0$, $\varphi_0^{(i)}$ — значения коэффициентов при $T_0=(T_1+T_3)/2$); β_T — коэффициент температурного расширения вещества; $\beta_{c^{(i)}}$ — коэффициент концентрационного расширения i-го компонента; g — ускорение свободного падения.

В качестве основных размерных величин взяты радиус реактора R, характерный перепад температур $\delta T=T_3-T_1$, характерная скорость по расходу газовой смеси $V_0=\Theta/\pi R^2$ (Θ — объемный расход через реактор в единицу времени при $T_0=(T_1+T_3)/2$) и эффективная мольная концентрация смеси $c_0=\sum_{i=1}^{N}c_0^{(i)}$ при вдуве, а безразмерные переменные выражаются следующим образом (в (1) тильда у безразмерных величин опущена):

$$\tilde r=r/R,\quad \tilde z=z/R,\quad \tilde t=tV_0/R,\quad \tilde\psi=\psi/(V_0R^2),\quad \tilde\omega=\omega R/V_0,$$
$$\tilde V=V/V_0,\ \tilde T=(T-T_1)/\delta T,\ \tilde c^{(i)}=c^{(i)}/c_0,$$

$$\widetilde{Q} = QR/(V_0 \delta T),$$

$$\widetilde{F}^{(i)} = F^{(i)} R/(V_0 c_0),$$

$$\widetilde{\nu} = \nu/(V_0 R), \quad \widetilde{\varkappa} = \varkappa/(V_0 R),$$

$$\widetilde{\varphi}^{(i)} = \varphi_0^{(i)}/(V_0 R),$$

$$G = \mathrm{Gr}/\mathrm{Re}^2,$$

$$G^{(i)} = \mathrm{Gr}^{(i)}/\mathrm{Re}^2,$$

где $\mathrm{Gr} = \beta_T g \delta T R^3/\nu_0^2$ — число Грасгофа; $\mathrm{Gr}^{(i)} = \beta_{c^{(i)}} g c^{(0)} R^3/\nu_0^2$ — концентрационное число Грасгофа; $\mathrm{Re} = V_0 R/\nu_0$ — число Рейнольдса.

В представленной на рис. 2 области для системы уравнений (1) рассматривается внутренняя краевая задача, решение которой должно удовлетворять граничным условиям:

а) на твердых стенках

$$\psi|_\Gamma = \left.\frac{\partial \psi}{\partial n}\right|_\Gamma = \mathrm{const},$$

$$T|_\Gamma = T(\xi),$$

$$\varphi^{(i)}(T) \left.\frac{\partial c^{(i)}}{\partial n}\right|_\Gamma = q^{(i)}(\xi);$$

б) на оси симметрии

$$\psi|_{r=0} = 0, \quad \omega|_{r=0} = 0,$$

$$\left.\frac{\partial T}{\partial r}\right|_{r=0} = 0, \quad \left.\frac{\partial c^{(i)}}{\partial n}\right|_{r=0} = 0;$$

в) во входном отверстии и выходном кольцевом зазоре проточной полости

$$\psi|_{\text{вх}} = -\frac{1}{2}\frac{r^2}{R_{\text{вн}}^2},$$

$$\left.\frac{\partial \omega}{\partial n}\right|_{\text{вх.струи}} = 0, \quad T|_{\text{вх}} = T_1,$$

$$c^{(i)}|_{\text{вх}} = c_0^{(i)},$$

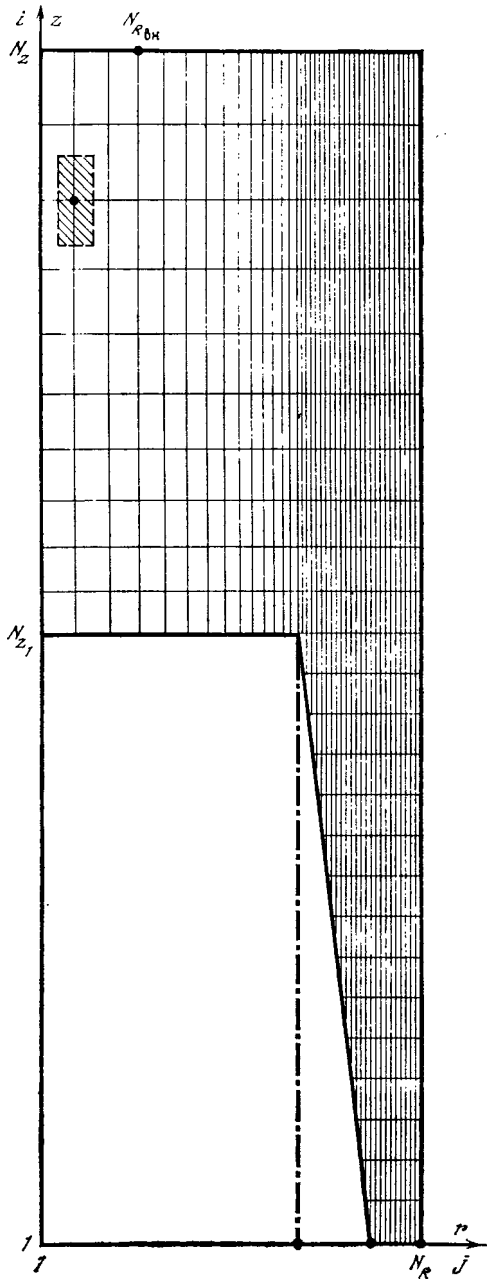


Рис. 2. Расчетная область

$$\psi|_{\text{вых}} = -\frac{1}{2}\frac{(r^2 - R_2^2)}{(R^2 - R_2^2)}, \quad \left.\frac{\partial\omega}{\partial n}\right|_{\text{вых}} = 0, \quad \left.\frac{\partial T}{\partial n}\right|_{\text{вых}} = 0, \quad \left.\frac{\partial c^{(i)}}{\partial n}\right|_{\text{вых}} = 0.$$

Эти условия отражают тот факт, что для втекающего потока задается распределение функции тока, температуры и концентрации химических компонентов. На выходе распределения этих величин неизвестны, поэтому предполагается, что линии тока параллельны оси, а значения всех переменных считаются постоянными вдоль линий тока.

Граничные условия для вихря ω на твердых стенках определяются в конечно-разностном виде (см. формулы (5)—(9)).

2. Методика численного решения

Исходную систему уравнений (1) можно записать в операторном виде

$$\begin{aligned}
\frac{\partial T}{\partial t} &= \mathscr{L}_r\left(\frac{1}{r}, r\varkappa(T), 1\right)T - \mathscr{C}_r\left(\frac{1}{r}, rv_r\right)T + \\
&\quad + \mathscr{L}_z(1, \varkappa(T), 1)T - \mathscr{C}_z(1, v_z)T + \mathscr{Q}(r, z), \\
\frac{\partial c^{(i)}}{\partial t} &= \mathscr{L}_r\left(\frac{1}{r}, r\varphi^{(i)}(T), 1\right)c^{(i)} - \mathscr{C}_r\left(\frac{1}{r}, rv_r\right)c^{(i)} + \\
&\quad + \mathscr{L}_z(1, \varphi^{(i)}(T), 1)c^{(i)} - \mathscr{C}_z(1, v_z)c^{(i)} + \mathscr{F}^{(i)}(c^{(1)}, \ldots, c^{(N)}), \\
\frac{\partial \omega}{\partial t} &= \mathscr{L}_r\left(1, \frac{1}{r}, r\nu(T)\right)\omega - \mathscr{C}_r(1, v_r)\omega + \mathscr{L}_z(1, \nu(T), 1)\omega - \\
&\quad - \mathscr{C}_z(1, v_z)\omega + \mathscr{F}(T) + \mathscr{F}(c^{(i)}), \\
&\mathscr{L}_r\left(1, \frac{1}{r}, 1\right)\psi + \mathscr{L}_z\left(\frac{1}{r}, 1, 1\right)\psi = -\omega,
\end{aligned} \tag{2}$$

где $\mathscr{L}_x(a, b, d)u = a\frac{\partial}{\partial x}\left(b\frac{\partial}{\partial x}(du)\right)$, $\mathscr{C}_x(a, b)u = a\frac{\partial}{\partial x}(bu)$.

Для численного решения системы (2) используется постоянный шаг по времени τ, а расчетная область (см. рис. 2) покрывается согласованной, неравномерной по z и r сеткой:

$$\Omega_h = \{z_i, \quad 1 \leqslant i \leqslant N_Z, \quad r_j, \quad 1 \leqslant j \leqslant N_R\},$$

для которой $h_i = z_{i+1} - z_i$ — переменный шаг по z; $h_j = r_{j+1} - r_j$ — переменный шаг по r; N_{Z_1} — количество точек по z на образующей пьедестала; N_{R_1} — количество точек по r на верхнем основании пьедестала; N_{R_2} — количество точек по r на нижнем основании пьедестала; $N_{R_2} = N_{R_1} + N_{Z_1} - 1$ — условие согласованности сетки.

Все переменные считаются определенными в узлах сетки — центрах ячеек.

На сетке Ω_h система уравнений (2) аппроксимируется продольно-поперечной схемой [3]:

$$\frac{\overline{T}-T}{\tau/2}=L_r\left(\frac{1}{r},r\varkappa(T),1\right)\overline{T}-k_r\left(\frac{1}{r},rv_r\right)\overline{T}+L_z(1,\varkappa(T),1)T-$$
$$-k_z(1,v_z)T+Q,$$
$$\frac{\hat{T}-\overline{T}}{\tau/2}=L_r\left(\frac{1}{r},r\varkappa(T),1\right)\overline{T}-k_r\left(\frac{1}{r},rv_r\right)\overline{T}+L_z(1,\varkappa(T),1)\hat{T}-$$
$$-k_z(1,v_z)\hat{T}+Q,$$
$$\frac{\overline{c^{(i)}}-c^{(i)}}{\tau/2}=L_r\left(\frac{1}{r},r\varphi^{(i)}(T),1\right)\overline{c^{(i)}}-k_r\left(\frac{1}{r},rv_r\right)\overline{c^{(i)}}+$$
$$+L_z(1,\varphi^{(i)}(T),1)c^{(i)}-k_z(1,v_z)c^{(i)}+F^{(i)}(c^{(1)},\ldots,c^{(N)}),$$
$$\frac{\hat{c}^{(i)}-\overline{c^{(i)}}}{\tau/2}=L_r\left(\frac{1}{r},r\varphi^{(i)}(T),1\right)\overline{c^{(i)}}-k_r\left(\frac{1}{r},rv_r\right)\overline{c^{(i)}}+$$
$$+L_z(1,\varphi^{(i)}(T),1)\hat{c}^{(i)}-k_z(1,v_z)\hat{c}^{(i)}+F^{(i)}(c^{(1)},\ldots,c^{(N)}),\tag{3}$$
$$\frac{\overline{\omega}-\omega}{\tau/2}=L_r\left(1,\frac{1}{r},r\nu(T)\right)\overline{\omega}-k_r(1,v_r)\overline{\omega}+$$
$$+L_z(1,1,\nu(T))\omega-k_z(1,v_z)\omega+F(\hat{T})+F(\hat{c}^{(i)}),$$
$$\frac{\hat{\omega}-\overline{\omega}}{\tau/2}=L_r\left(1,\frac{1}{r},r\nu(T)\right)\overline{\omega}-k_r(1,v_r)\overline{\omega}+$$
$$+L_z(1,1,\nu(T))\hat{\omega}-k_z(1,v_z)\hat{\omega}+F(\hat{T})+F(\hat{c}^{(i)}),$$
$$\frac{\overline{\psi}-\psi^s}{\tau_s'/2}=L_r\overline{\psi}+L_z\psi^s+\hat{\omega}r,$$
$$\frac{\psi^{s+1}-\overline{\psi}}{\tau_s''/2}=L_r\overline{\psi}+L_z\psi^{s+1}+\hat{\omega}r.$$

Здесь T, $c^{(i)}$, ω — температура, концентрации, вихрь на слое n; $\overline{T}$, $\overline{c^{(i)}}$, $\overline{\omega}$ — на слое $n+1/2$; $\hat{T}$, $\hat{c}^{(i)}$, $\hat{\omega}$ — на слое $n+1$; L_r, L_z, k_r, k_z — соответственно аппроксимируют операторы $\mathscr{L}_r$, $\mathscr{L}_z$, $\mathscr{C}_r$, $\mathscr{C}_z$; Q, $F(T)$, $F(c^{(i)})$, $F^{(i)}(c^{(1)},\ldots,c^{(N)})$ — соответственно аппроксимируют функции $Q(r,z)$, $\mathscr{F}(T)$; $\mathscr{F}(c^{(i)})$, $\mathscr{F}^{(i)}(c^{(1)},\ldots,c^{(N)})$; s — номер итерации ψ; τ_s', τ_s'' ($s=1,\ldots,n_{\text{итер}}$) — набор итерационных параметров.

Подробно аппроксимации $\mathscr{L}_r$, $\mathscr{L}_z$, $\mathscr{C}_r$, $\mathscr{C}_z$ рассмотрена в [4, 5]. Конвективные члены в (3) аппроксимируются консервативными направленными разностями, которые используют значения скоростей

в полуцелых узлах сетки — на границах ячеек [6]:

$$(v_r)_{i,j+1/2} = -\frac{1}{2}\left[\left(\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial z}\right)_{i,j} + \left(\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial z}\right)_{i,j+1}\right] =$$

$$= -\frac{1}{4\hbar_i}\left[\frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i-1,j}}{r_j} + \frac{\psi_{i+1,j+1} - \psi_{i-1,j+1}}{r_{j+1}}\right],$$

$$(v_r)_{i,j-1/2} = -\frac{1}{2}\left[\left(\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial z}\right)_{i,j} + \left(\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial z}\right)_{i,j-1}\right] =$$

$$= -\frac{1}{4\hbar_i}\left[\frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i-1,j}}{r_j} + \frac{\psi_{i+1,j-1} - \psi_{i-1,j-1}}{r_{j-1}}\right], \qquad (4)$$

$$(v_z)_{i+1/2,j} = \frac{1}{2}\left[\left(\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)_{i,j} + \left(\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)_{i+1,j}\right] =$$

$$= \frac{1}{4\hbar_j r_j}[\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j-1} + \psi_{i+1,j+1} - \psi_{i+1,j-1}].$$

$$(v_z)_{i-1/2,j} = \frac{1}{2}\left[\left(\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)_{i,j} + \left(\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)_{i-1,j}\right] =$$

$$= \frac{1}{4\hbar_j r_j}[\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j-1} + \psi_{i-1,j+1} - \psi_{i-1,j-1}].$$

Аппроксимация выражений (4) подробно рассмотрена в [5, 6]. На твердой боковой наклонной стенке пьедестала

$$v_z|_\Gamma = v_r|_\Gamma = 0.$$

Поэтому

$$(v_r)_{i,j-1/2} = -\frac{1}{2}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial z}\right)_{i,j} = -\frac{1}{4\hbar_i}\left[\frac{\psi_{i+1,j} + \psi_{i-1,j}}{r_j}\right],$$

$$(v_z)_{i-1/2,j} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)_{i,j} = \frac{1}{4\hbar_j r_j}[\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j-1}],$$

$$1 \leqslant i \leqslant N_{Z_1} + 1, \quad N_{R_1} \leqslant j \leqslant N_{R_2}.$$

Для определения температуры и концентраций на оси симметрии, раскрывая неопределенности типа 0/0 по правилу Лопиталя, получим специальную форму уравнений для температуры и концентраций, вид и аппроксимация которых рассмотрены в [5, 6].

Граничные условия для функции тока, температуры и концентраций аппроксимируются обычным образом [3]. Граничные условия для вихря вычисляются на каждом временном слое по формулам:

а) на входе и выходе (используя допущение об аксиальности линий тока во входящем и выходящем потоках)

$$\omega_{N_Z,j} = -(\psi_{N_Z,j} - \psi_{N_Z-1,j})/r_j^2 h_{N_Z}^2,$$

$$\omega_{1,j} = -(\psi_{1,j} - \psi_{2,j})/r_j^2 h_{N_Z}^2, \qquad (5)$$

при наличии во входном отверстии радиальной составляющей скорости $v_r = v_r|_{i=N_Z} = -\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial z}\Big|_{i=N_Z} \neq 0$:

$$\omega_{N_Z,j} = \frac{2}{r_j}\left[\psi\left(\left(1+\frac{h^{+2_1}}{h^{+1_1}}\right)^3 - 1\right) - \psi^{+1_1}\left(1+\frac{h^{+2_1}}{h^{+1_1}}\right)^3 + \right.$$

$$\left. + \psi^{+2_1} + h^{+1_1}\left(1+\frac{h^{+2_1}}{h^{+1_1}}\right)\left(1-\left(1+\frac{h^{+2_1}}{h^{+1_1}}\right)^2\right) r_j v_r\right] \Big/ [h^{+2_1}h^{+1_1}(1 +$$

$$+ h^{+2_1}/h^{+1_1})^2],$$

здесь и далее

$$\psi = \psi_{i,j},\quad \psi^{\pm 1_1} = \psi_{i\pm 1,j},\quad \psi^{\pm 1_2} = \psi_{i,j\pm 1},\quad \psi^{\pm 2_1} = \psi_{i\pm 2,j},\quad \psi^{\pm 2_2} = \psi_{i,j\pm 2},$$

$$h^{\pm 1_1} = h_{i\pm 1},\quad h^{\pm 1_2} = h_{j\pm 1},\quad h^{\pm 2_1} = h_{i\pm 2},\quad h^{\pm 2_2} = h_{j\pm 2};$$

б) на твердых стенках: на верхнем основании пьедестала ($i = N_{Z_1}$) и верхнем основании реактора ($i = N_Z$) граничные условия аналогичны:

$$\omega_{i,j} = \frac{2}{r_j}\frac{[\psi((1+h^{\pm 2_1}/h^{\pm 1_1})^3 - 1) - \psi^{\pm 1_1}(1+h^{\pm 2_1}/h^{\pm 1_1})^3 + \psi^{\pm 2_1}]}{h^{\pm 2_1}h^{\pm 1_1}(1+h^{\pm 2_1}/h^{\pm 1_1})^2}, \qquad (7)$$

на боковой стенке реактора ($j = N_R$)

$$\omega_{i,j} = \frac{2}{r_j}\frac{[\psi((1+h^{-2_2}/h^{-1_2})^3 - 1) - \psi^{-1_2}(1+h^{-2_2}/h^{-1_2})^3 + \psi^{-2_2}]}{h^{-2_2}h^{-1_2}(1+h^{-2_2}/h^{-1_2})^2}, \qquad (8)$$

на боковой наклонной стенке пьедестала вплоть до угла включительно

$$\omega_{i,j} = \frac{2}{r_j}\frac{[\psi((1+h^{+2_1}/h^{+1_1})^3 - 1) - \psi^{+1_1}(1+h^{+2_1}/h^{+1_1})^3 + \psi^{+2_1}]}{h^{+2_1}h^{+1_1}(1+h^{+2_1}/h^{+1_1})^2} +$$

$$+ \frac{2}{r_j}\frac{[\psi((1+h^{+2_2}/h^{+1_2})^3 - 1) - \psi^{+1_2}(1+h^{+2_2}/h^{+1_2})^3 + \psi^{+2_2}]}{h^{+2_2}h^{+1_2}(1+h^{+2_2}/h^{+1_2})^2}. \qquad (9)$$

Существенной частью разностной схемы (3)—(9) является аппроксимация граничных условий для вихря ω на наклонной стенке и угловой точке пьедестала. В [7] описано несколько способов вычисления ω в угловой точке, но все они оказались неудовлетворительными в данном случае, поскольку вызывали появление локального максимума температуры в узле, соседнем по радиусу с угловой точкой. Предложенные здесь условия (9) являются естественным обобщением формул (6)—(8) и обеспечивают непрерывность вихря при переходе конечно-разностного шаблона на поверхности пьедестала через угол и выполнение принципа максимума для температуры в окрестности угла.

Система уравнений (3) решается последовательными прогонками. Сначала по известным значениям T, $c^{(i)}$, ω, ψ в результате

прогонок находится новое значение температуры на новом слое $\hat{T}$. Подставляя найденное $\hat{T}$ в уравнения для концентраций $c^{(i)}$ и вихря ω, получаем новые $\hat{c}^{(i)}$ во всей области и $\hat{\omega}$ во внутренних точках. Используя новое значение $\hat{\omega}$, вычисляем функцию тока $\hat{\psi}$. Далее по формулам (5)—(9) определяем новые значения вихря на границе. На этом заканчивается расчет одного шага по времени. На каждом временном шаге уравнения для ψ итерируются до сходимости. Итерационные параметры τ_s', τ_s'' ($s=1, \ldots, n_{\text{итер}}$) определяются по Жордану [3] на основе оценок границ спектров разностных операторов L_z и L_r, которые для простоты вычисляются не по всей полости реактора, а в прямоугольнике аксиального сечения форкамеры $\{Z_1 \leqslant z \leqslant Z,\ 0 \leqslant r \leqslant R\}$. Хотя указанный набор итерационных параметров теоретически оптимален лишь для перестановочных операторов L_z и L_r, а в нашей задаче они не перестановочны, на практике сходимость достигается за 3—6 итераций. В качестве критерия сходимости выбирается малость невязки в норме L_2:

$$\left[\sum_{i,j} (L_r\psi^{s+1} + L_z\psi^{s+1} + \omega)^2\, rh_rh_z\right]^{1/2} < \varepsilon_\psi.$$

Это неравенство проверяется после завершения цикла из n итераций. Как показали многочисленные расчеты, при $\psi_{\max} \approx 1 \div 10$ достаточно взять $\varepsilon_\psi = 0{,}05$.

Расчет проводится до выхода на стационарный режим и прекращается при выполнении одного из условий:

$$\max_{i,j} \frac{|\hat{T}_{i,j} - T_{i,j}|}{\tau} < \varepsilon_T, \qquad \max_{i,j} \frac{|\hat{c}^{(i)}_{i,j} - c^{(i)}_{i,j}|}{\tau} < \varepsilon_{c^{(i)}},$$

$$\max_{i,j} \frac{|\hat{\omega}_{i,j} - \omega_{i,j}|}{\tau} < \varepsilon_\omega.$$

Для вычисления спектров используются служебные подпрограммы (утилиты) [8] функционального наполнения программного комплекса «Нептун».

Описанный алгоритм реализован в программе «Нептун» [5]. Поскольку пьедестал занимает значительную часть объема реактора, то разработана специальная версия программного комплекса «Нептун», использующая представление двумерных сеточных функций для области сложной формы (см. рис. 2) в виде одномерных массивов, что позволяет экономить память: вместо $26 \times 41 = 1066$ узлов в полном прямоугольнике запоминается лишь 720 узлов расчетной области. Для одномерной индексации всех сеточных функций вводится вспомогательный массив IC(J) длиной N_R, в котором запоминаются индексы начал каждого столбца узлов сетки на поверхности пьедестала и выходного зазора, так что элементу двумерной сеточной функции ARR2(I, J), взятому в расчетной области, соответствует элемент одномерного массива ARR1(I+IC(J)). Учет сквозной индексации всех узлов осуществля-

ется введением вспомогательных одномерных массивов JIN(I) длиной N_z для хранения значений индекса j первого узла сетки на данной строке и IIN(J) длиной N_R для хранения индекса i первого узла сетки данного столбца. Так, введенные массивы JIN и IIN являются левыми пределами прогонок в полости реактора, что экономит время счета.

Хранение двумерных сеточных функций в виде одномерных массивов, определение элементов массивов IC, JIN, IIN и обратное преобразование одномерных массивов в двумерные для графической обработки и печати реализуются служебными подпрограммами (утилитами) специальной версии комплекса «Нептун», автоматически учитывающими форму пьедестала.

3. Результаты численного анализа

Из-за малой конусности пьедестала и наличия больших градиентов температуры и скоростей использовались неравномерные по z и r согласованные сетки (см. рис. 2) размерностью 26×41 с соотношениями соседних шагов не более 1,3 и с соотношениями максимального и минимального шагов $h_{i_{max}}/h_{i_{min}}=1{,}9$, $h_{j_{max}}/h_{j_{min}}=7{,}2$. Проверочные расчеты проводились на сетке 31×51. Для установления стационарного решения требовалось около 1200 шагов по времени.

Структура конвекции в реакторе. Исследование структуры смешанной конвекции для первой рассмотренной геометрии реактора (рис. 3) проводилось для характерных чисел Re и Gr при различных радиусах входного канала. Температура поверхности пьедестала задавалась постоянной или с линейным возрастанием к нижнему основанию (рис. 3).

Числа Re и Gr в расчетах определялись по вязкости газовой смеси, соответствующей средней температуре реактора, в скобках приводятся значения чисел Re по вязкости вдуваемой смеси.

На рис. 3 для $Gr=7{,}2\cdot10^4$ показано изменение структуры стационарной конвекции при увеличении радиуса входного канала для Re=8,1 (60) и Re=12,2 (91) соответственно.

На рис. 4 (ξ — безразмерная координата по полупериметру аксиального сечения пьедестала, ξ_0 — безразмерный радиус верхнего основания пьедестала) показано распределение конвективной теплоотдачи по поверхности пьедестала, которая характеризуется числом Nu (безразмерным тепловым потоком по нормали к поверхности).

Представляет интерес поведение течения у боковой поверхности пьедестала, поэтому на рис. 5 изображены распределения характерной скорости газовой смеси v_τ вдоль образующей конуса, в качестве которой берется ее значение на расстоянии одного шага по r от образующей ($\xi-\xi_0$ — координата вдоль образующей пьедестала, считая от угла). Линейно возрастающее к нижнему основанию распределение температуры $T_з$ практически не влияет (кроме окрестности угла) на профили v_τ, поэтому приведены лишь режимы с $T_з=$ $=\text{const}$.

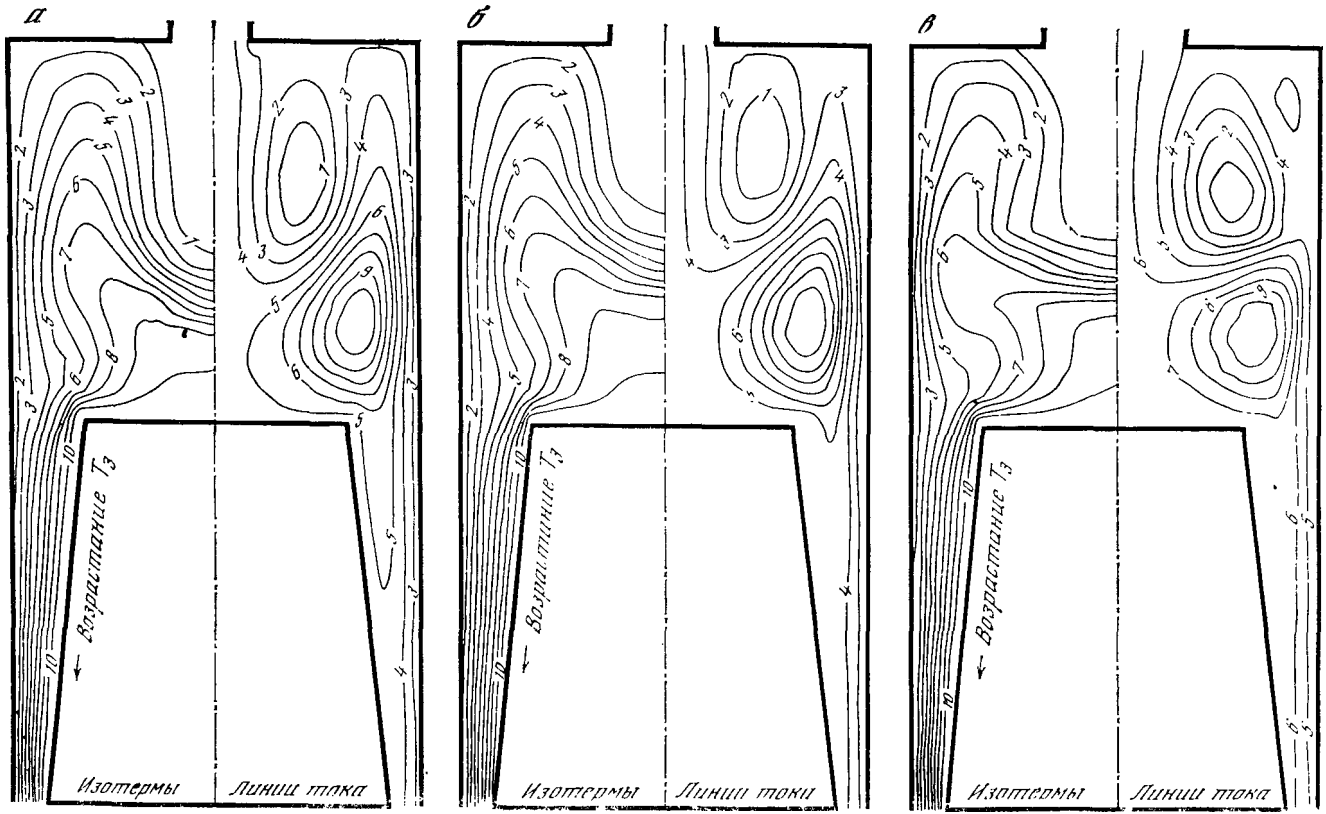


Рис. 3. Структура конвекции в реакторе для разных режимов

а — *е* — Re=8,1 (60); *ж* — *м* — Re=12,2 (91); *н* — *с* — $Ra_{вн}$ = 0,187, *о*, *п*, *р*, *т* — $Ra_{вн}$ = 0,20, *у*, *ф*, *х*, *ц* — $Ra_{вн}$ = 0,388, *ч* — *ш*, *щ* — *ы* — $Ra_{вн}$ = const

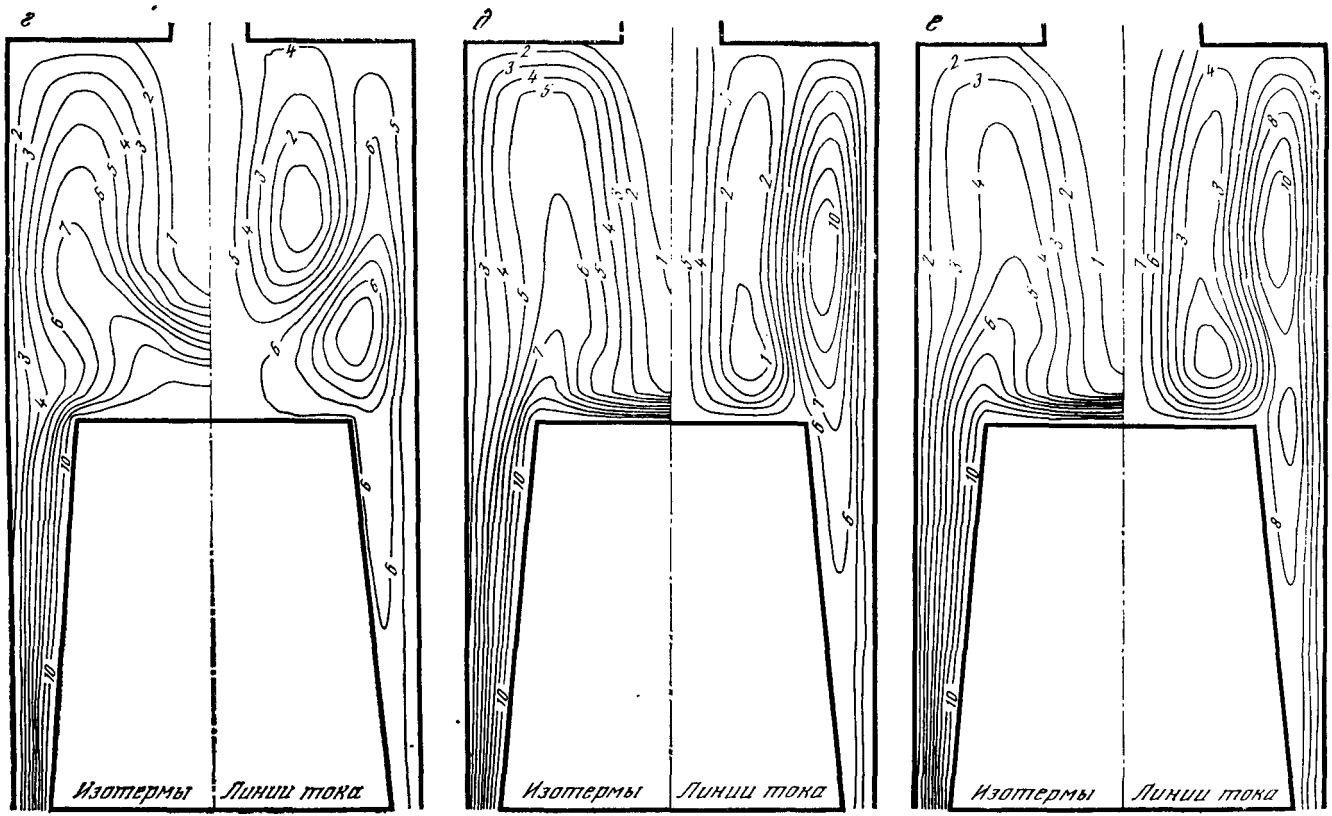


Рис. 3 (продолжение)

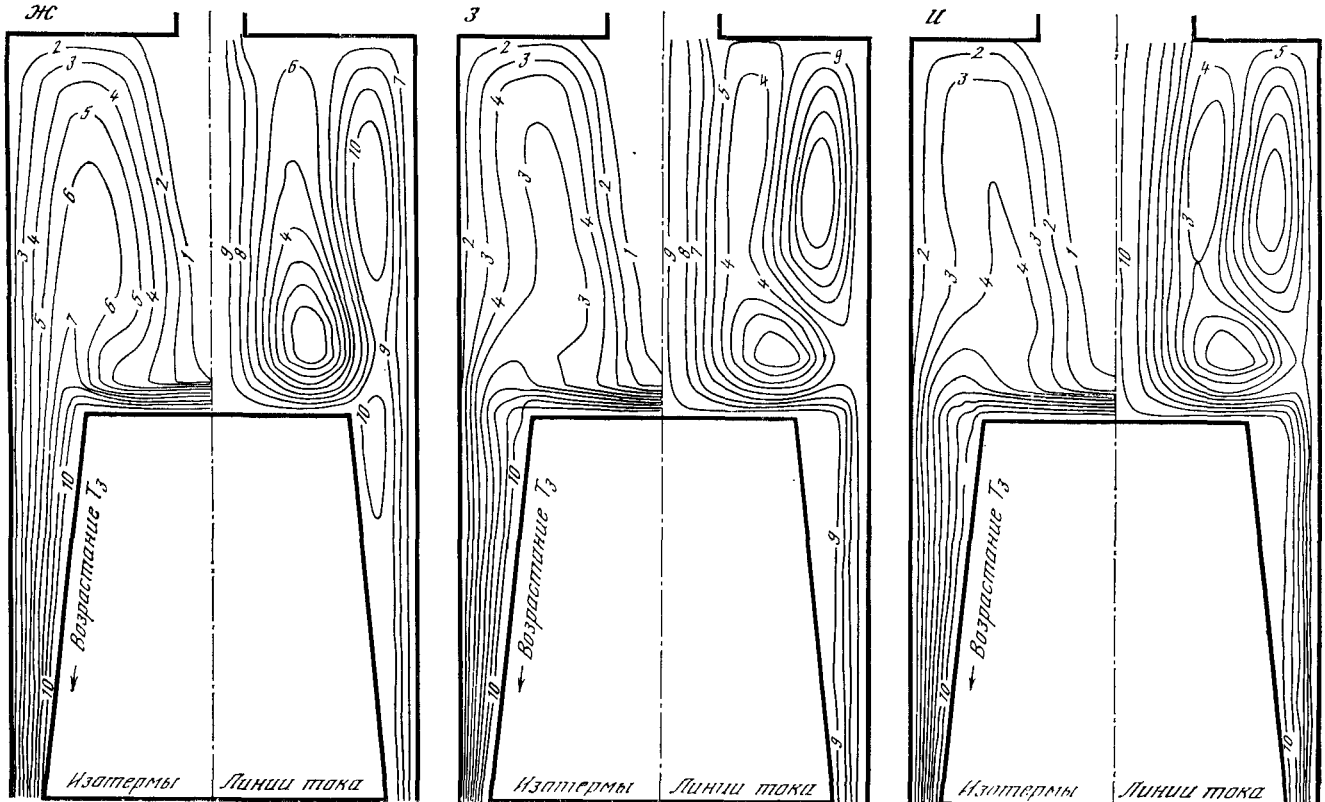


Рис. 3 (продолжение)

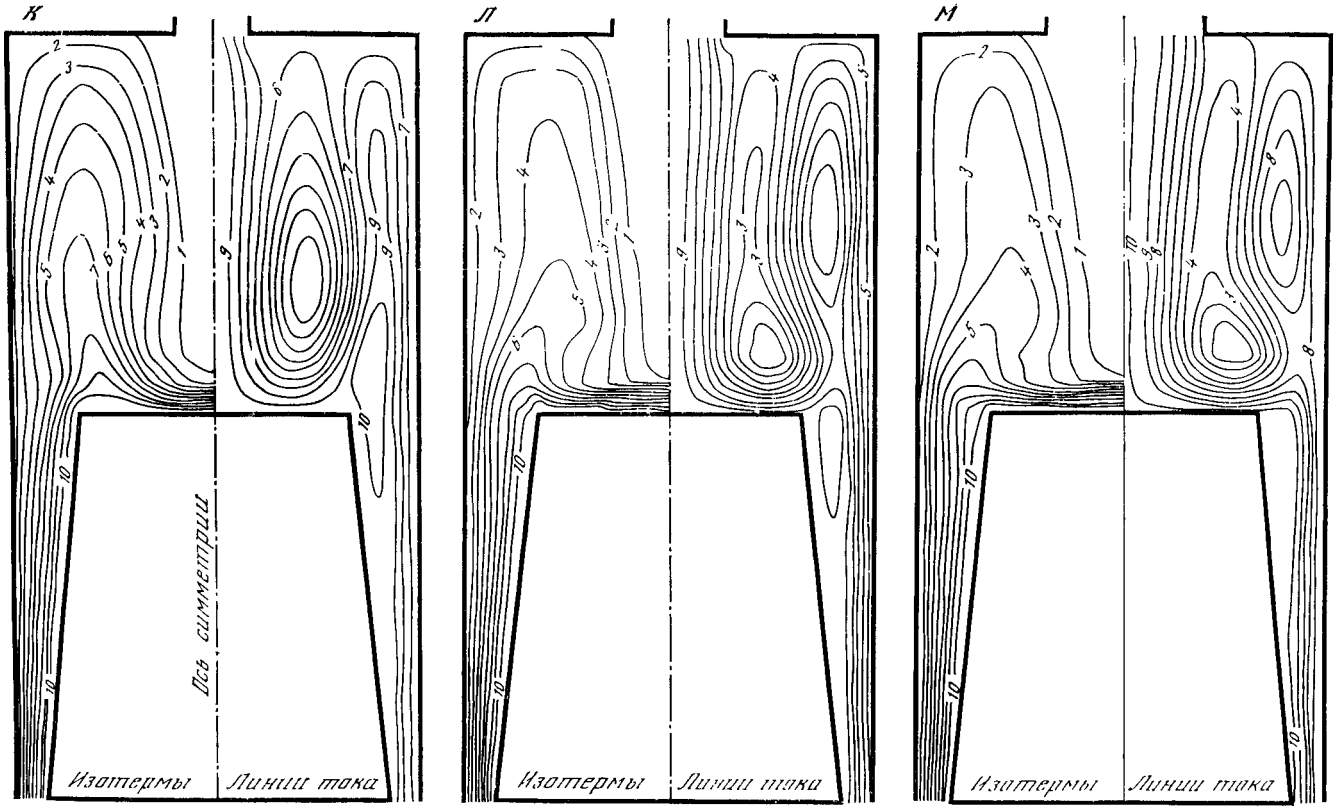


Рис. 3 (окончание)

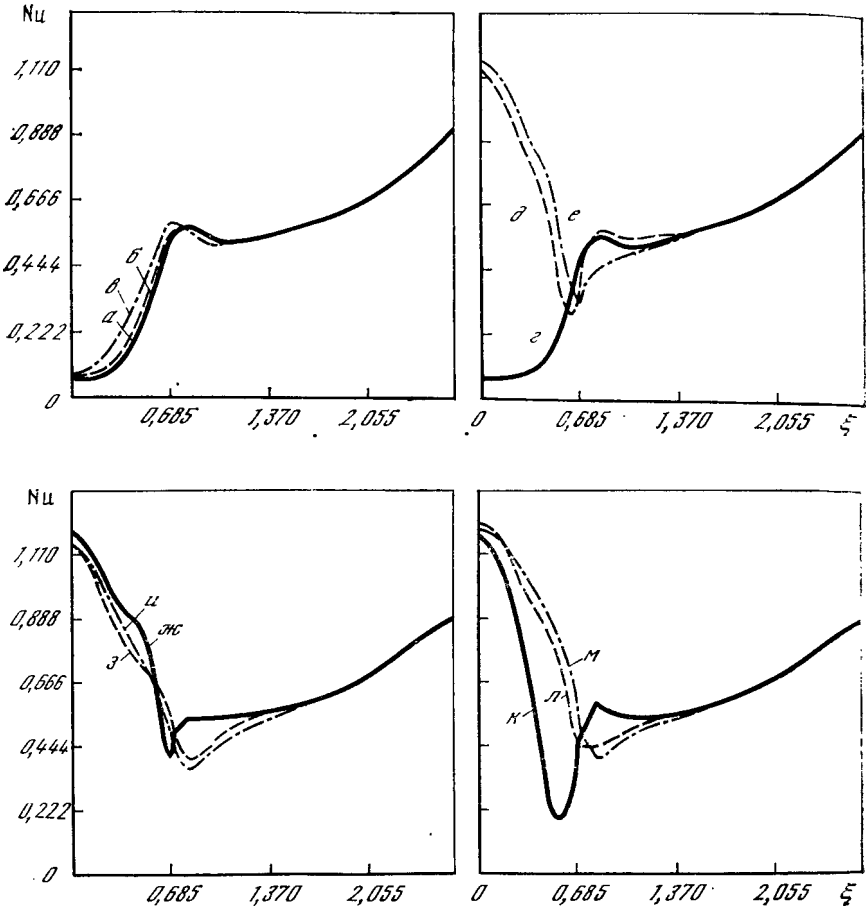


Рис. 4. Распределение конвективной теплоотдачи по поверхности пьедестала ($\xi_0=0{,}685$) для разных режимов

Кривые *а* — *м* соответствуют режимам *а* — *м* на рис. 3

Для второй рассмотренной геометрии реактора рис. 6 иллюстрирует влияние изменения направления вдува газовой смеси (6, *а* — вертикально вниз, 6, *б* — параллельно верхнему основанию реактора) на структуру стационарной конвекции для чисел Re=40 (976) и $Gr=2{,}4\cdot10^4$.

Отметим, что рис. 3 и 6 соответствуют установившемуся конвективному движению в реакторе. Характерным для всех режимов на рис. 3 и 6 является наличие вихря, порождаемого увлечением газовой смеси входящей струей, и свободно конвективного вихря, который с увеличением числа Re и радиуса входного канала разбивается по вертикали над пьедесталом на пару вихрей. При дальнейшем увеличении числа Re (при Re$\geqslant$14 (105)) сначала практиче-

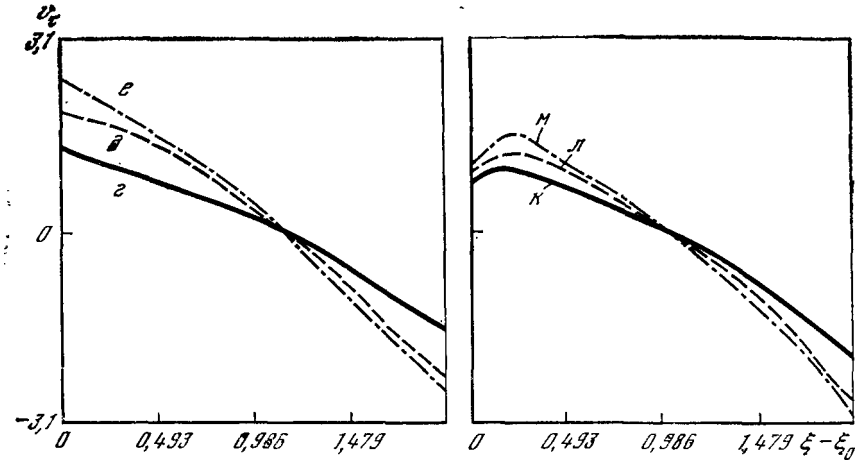


Рис. 5. Характерная скорость вдоль образующей пьедестала для разных режимов
Обозначения те же, что на рис. 4

ски исчезает нижний вихрь, а при Re$\geqslant$30 (225,5) исчезает и верхний [9].

Результаты вычислительных экспериментов для реакторов рассматриваемой геометрии позволяют сделать следующие выводы.

1. Течения в реакционном объеме вертикального эпитаксиального реактора кардинально отличаются от тех, которые можно получить в приближении пограничного слоя [10, 11]. На выходе из реактора течение имеет профиль вертикальной скорости, который слабо меняется для всех рассмотренных режимов, но существенно отличается от профиля скорости течения Пуазейля в кольцевом зазоре [9].

Следовательно, как на входе в реакционный объем, так и на выходе из реактора нельзя использовать профиль течения Пуазейля в качестве граничного условия.

2. По конвективной теплоотдаче с поверхности пьедестала можно выделить два типа существенно различающихся режимов: первый — см. рис. 3, *а—г*, второй — рис. 3, *д—м*. В режимах первого типа лучше прогревается смесь в форкамере. Число Nu на нижних двух третях пьедестала не зависит от радиуса вдува, слабо зависит от Re и распределения температуры пьедестала.

3. На образующей пьедестала существует точка изменения направления характерной касательной скорости v_τ. Положение этой точки на образующей не зависит от распределения температуры пьедестала и радиуса вдува; она поднимается вверх с ростом числа Re [9].

4. Сильнее всего структура течения меняется в верхней части пьедестала.

Исследование массообмена в реакторе. Рассмотрим кинетику химических реакций при водородном восстановлении хлорсиланов

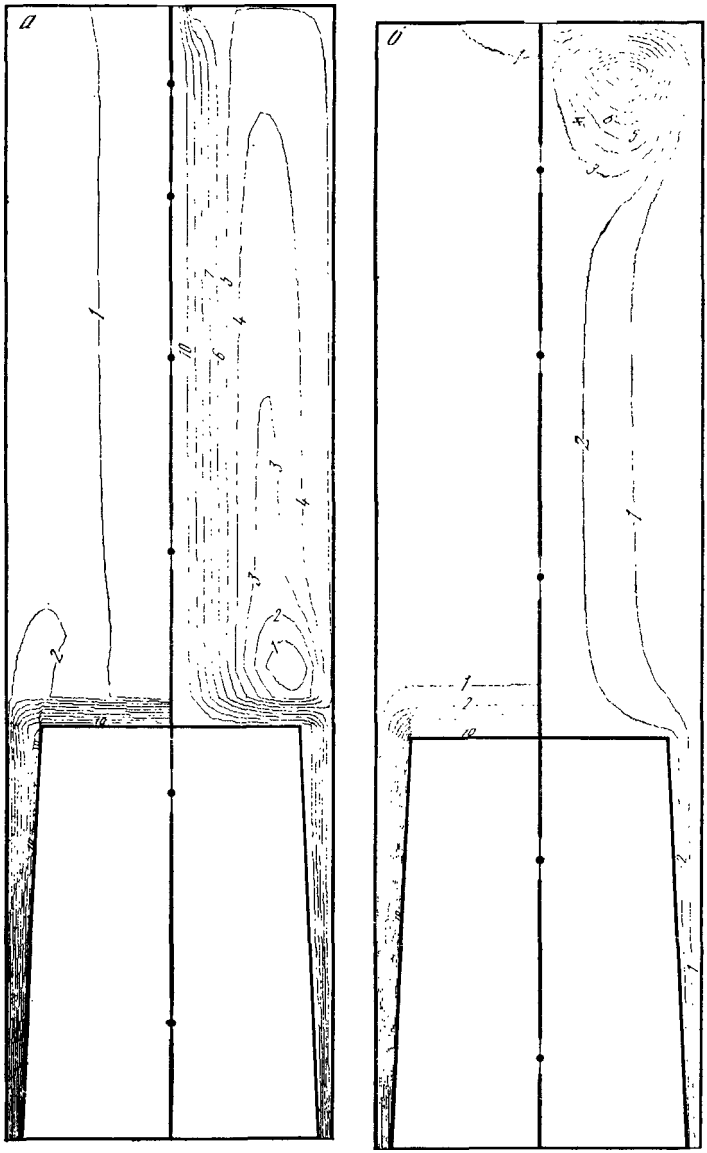


Рис. 6. Структура конвекции в реакторе ($R_{вн}=0{,}132$, $Re=40$ (976), $T_з=const$)

с целью получения чистого монокристаллического кремния Si методом осаждения эпитаксиальных слоев. В реактор поступает смесь H_2 и $SiCl_4$, в которой под действием высокой температуры протекает ряд гомогенных и гетерогенных реакций. Эти реакции имеют многостадийный характер с многочисленными промежуточными продуктами. Детальное описание этих реакций невозможно по при-

чине отсутствия точных данных о промежуточных реакциях. В данной работе рассматривается модель из следующих эффективных реакций:

1) в газовом объеме реактора [12]

$$H + SiCl_4 \to SiCl_3 + HCl, \qquad SiCl_3 + H_2 \to SiHCl_3 + H; \tag{10}$$

2) на поверхности пьедестала

$$SiHCl_3 \rightleftarrows \frac{1}{2} Si + \frac{1}{2} SiCl_4 + HCl; \tag{11}$$

эта реакция является суммой двух элементарных:

$$SiHCl_3 \rightleftarrows SiCl_2 + HCl, \qquad SiCl_2 \rightleftarrows \frac{1}{2} Si + \frac{1}{2} SiCl_4.$$

Для скоростей образования $SiHCl_3$ и Si в результате реакций (10) и (11) имеем

$$\frac{d\,[SiHCl_3]}{dt} = K_1\,[SiCl_4]\,[H_2]^{1/2}, \quad \frac{d\,[Si]}{dt} = K_2\,[SiHCl_3] - K_3[SiCl_4]^{1/2}[HCl].$$

Здесь и далее квадратные скобки обозначают концентрацию, а константы скоростей реакций K_1, K_2 и K_3 даются выражениями

$$K_1 = 7{,}8 \cdot 10^{10} \exp\left(-\frac{27500}{T_3 + T_1}\right), \qquad K_2 = 1{,}63 \exp\left(-\frac{11800}{T_3 + T_1}\right),$$

$$K_3 = 1{,}63 \exp\left(-\frac{11800}{T_3 + T_1}\right) \Big/ \left(4630\,(T_3 + T_1)^{-0{,}5} \exp\left(-\frac{9665}{T_3 + T_1}\right)\right).$$

Для изучения зависимости скорости осаждения от структуры течения используется система уравнений (1).

Из-за большой скорости диффузии считаем водород равномерно распределенным по объему реактора и, переходя к безразмерным переменным с использованием обозначений $c^{(1)} = [SiHCl_3]$, $c^{(2)} = [SiCl_4]$, $c^{(3)} = [HCl]$, $c^{(4)} = [H_2] = 1 - \sum_{i=1}^{3} c^{(i)}$, получим

$$\mathcal{F}^{(1)}(c^{(1)}, \ldots, c^{(4)}) = -\mathcal{F}^{(2)}(c^{(1)}, \ldots, c^{(4)}) = \mathcal{F}^{(3)}(c^{(1)}, \ldots, c^{(4)}) = \frac{dc^{(1)}}{dt},$$

$$-\frac{1}{2} q^{(1)} = q^{(2)} = \frac{1}{2} q^{(3)} = \frac{d\,[Si]}{dt}.$$

Безразмерная скорость осаждения Si вычисляется по распределению концентраций компонентов смеси.

В результате расчетов получено, что из-за большой скорости течения у верхнего основания пьедестала концентрационный пограничный слой возникает лишь у боковой поверхности пьедестала, вследствие чего реакции идут только внутри этого слоя. На рис. 7 изображены линии уровня для геометрической прогрессии значений

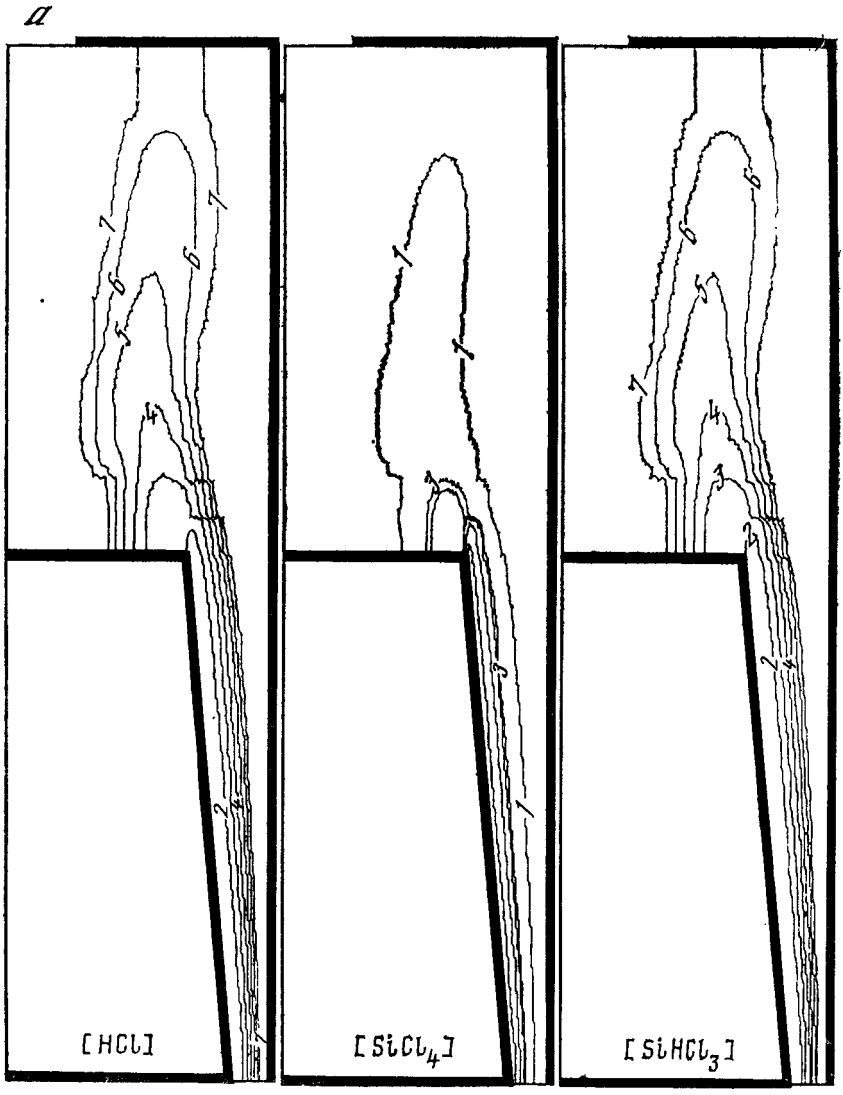


Рис. 7. Поля концентраций химических компонентов в реакторе (T_3=const, $R_{вн}$=0,26)

а и *б* соответствуют режимам *д* и *л* на рис. 3

концентраций $c^{(1)}$, $c^{(2)}$ и $c^{(3)}$. Видно, что при большем расходе (числе Re) роль свободной конвекции уменьшается, что приводит к более слабому прогреву форкамеры и ослаблению химических реакций.

Рис. 8 иллюстрирует распределение скорости роста кремния по длине образующей пьедестала для режимов, представленных на

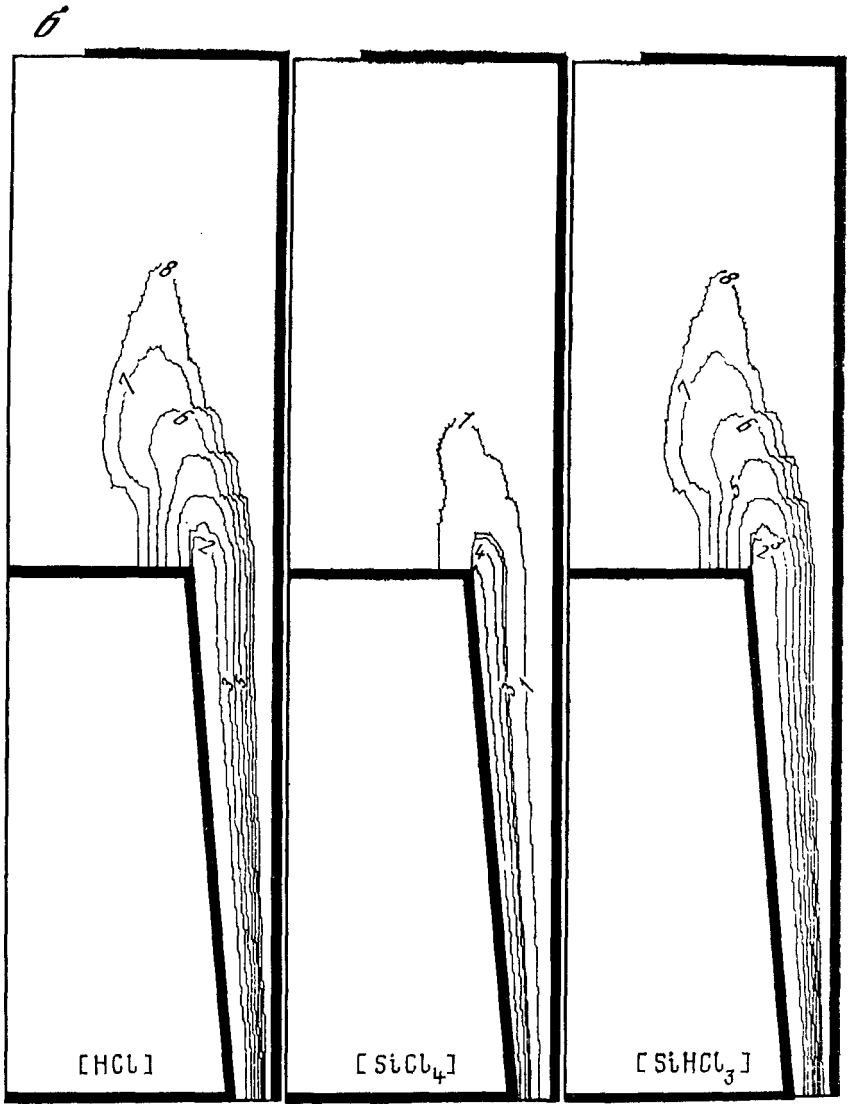


рис. 3, *г—е* и *к—м*. Для всех приведенных режимов скорость роста сначала быстро возрастает, а потом спадает по длине образующей, что качественно согласуется с экспериментальными данными. В точке на образующей, которая соответствует нулю характерной касательной скорости ($v_\tau=0$), скорость осаждения имеет перегиб. Равномерность осаждения повышается при сужении входного канала, хотя при этом от 5 (режим на рис. 3, *к*) до 20% (режим на рис. 3, *г*) выросшего кремния приходится на область ($0{,}8\,R_1<r<R_1$) верхнего основания пьедестала.

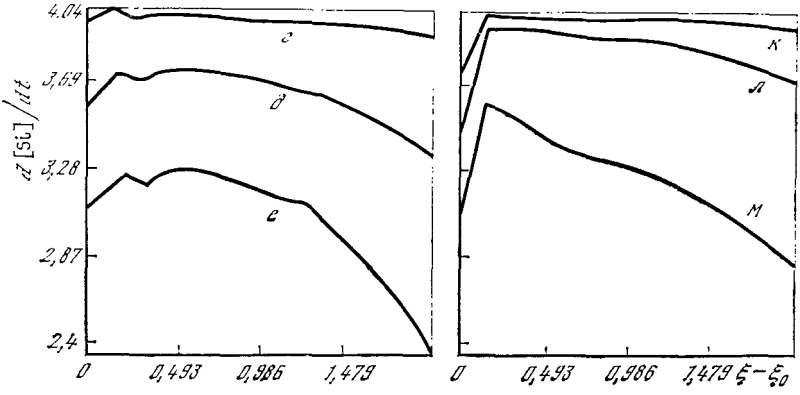


Рис. 8. Распределение скорости роста пленки по рабочей поверхности пьедестала для разных режимов

Обозначения те же, что на рис. 4

В заключение авторы считают своим долгом выразить благодарность А. Г. Чурбанову и И. С. Калачинской за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Самарский А. А.* Современная прикладная математика и вычислительный эксперимент.— Коммунист, 1983, № 18 (1244), с. 31—42.
2. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Механика сплошных сред. М.: Гостехтеориздат, 1954. 795 с.
3. *Самарский А. А.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1983. 616 с.
4. *Герасимов Б. П., Калачинская И. С.* Численное исследование тепло-массообмена в некоторых химических реакторах: Препр. ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР № 197. М., 1979. 28 с.
5. *Бакирова М. И., Герасимов Б. П., Калачинская И. С.* и др. Программа расчета уравнений Навье — Стокса в приближени Буссинеска: Препр. ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР № 13. М., 1983. 24 с.
6. *Герасимов Б. П.* Один метод расчета задач конвекции несжимаемой жидкости: Препр. ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР № 131. М., 1974. 36 с.
7. *Роуч П.* Вычислительная гидродинамика. М.: Мир, 1980. 616 с.
8. *Гайфулин С. А., Карпов В. Я., Мищенко Т. В.* САФРА. Функциональное наполнение. Система OLYMPUS: Препр. ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР № 27. М., 1980. 64 с.
9. *Герасимов Б. П., Лесуновский А. В.* Численное исследование смешанной конвекции в газофазном реакторе: Препр. ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР № 66. М., 1985. 28 с.
10. *Manke C. W., Donaghey L. F.* Analysis of transport processes in vertical cylinder epitaxy reactors.— J. Electrochem. Soc., 1974, vol. 124, N 4, p. 561—569.
11. *Juza J., Cermak J.* Phenomenological model of CVD epitaxial reactor.— J. Electrochem. Soc., 1982, vol. 120, N 7, p. 1627—1634.
12. *Ashen D. J., Bromberger G. C., Lewis T. J.* Kinetics of the reduction of silicon tetrachloride and trichlorsilane by hydrogen.— J. Appl. Chem., 1968, vol. 18, p. 348—352.

IV. ВЫРАЩИВАНИЕ ОБЪЕМНЫХ МОНОКРИСТАЛЛОВ ИЗ РАСПЛАВА. РЕШЕНИЕ СОПРЯЖЕННЫХ ЗАДАЧ

УДК 548.55

ИССЛЕДОВАНИЕ ГАЗОДИНАМИКИ В КАМЕРЕ УСТАНОВОК ВЫРАЩИВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ КРЕМНИЯ ПО ЧОХРАЛЬСКОМУ

И. П. Воронов, Б. П. Герасимов, А. И. Погодин, А. Г. Чурбанов

Введение

Многолетний опыт промышленного производства кремния показывает, что получение бездислокационных монокристаллов во многом зависит от газодинамики в объеме камеры установки выращивания. Общая картина потоков газа определяет условия отвода монооксиси кремния, образующейся в результате взаимодействия расплава с кварцевым тиглем. Испаряясь с поверхности расплава и конденсируясь в газовом объеме установки выращивания, монооксись кремния может снова попадать в расплав, способствуя возникновению дислокаций или поликристаллических областей в выращиваемых слитках [1].

Для устранения этого негативного явления в производстве монокристаллического кремния пропускают инертный газ через ростовую камеру при невысоком остаточном давлении.

Тем не менее и в этом случае может происходить нарушение структуры выращиваемого кристалла, обусловленное попаданием твердых частиц монооксиси кремния в расплав. Очевидно, что оптимизация газовых потоков за счет скорости протока газа и остаточного давления, а также некоторые изменения геометрии теплового узла могут способствовать устойчивости роста бездислокационных монокристаллов кремния.

В статье исследуется структура смешанной конвекции газа в камере ростовой установки с целью обеспечения устойчивого выращивания бездислокационных монокристаллов кремния методом Чохральского.

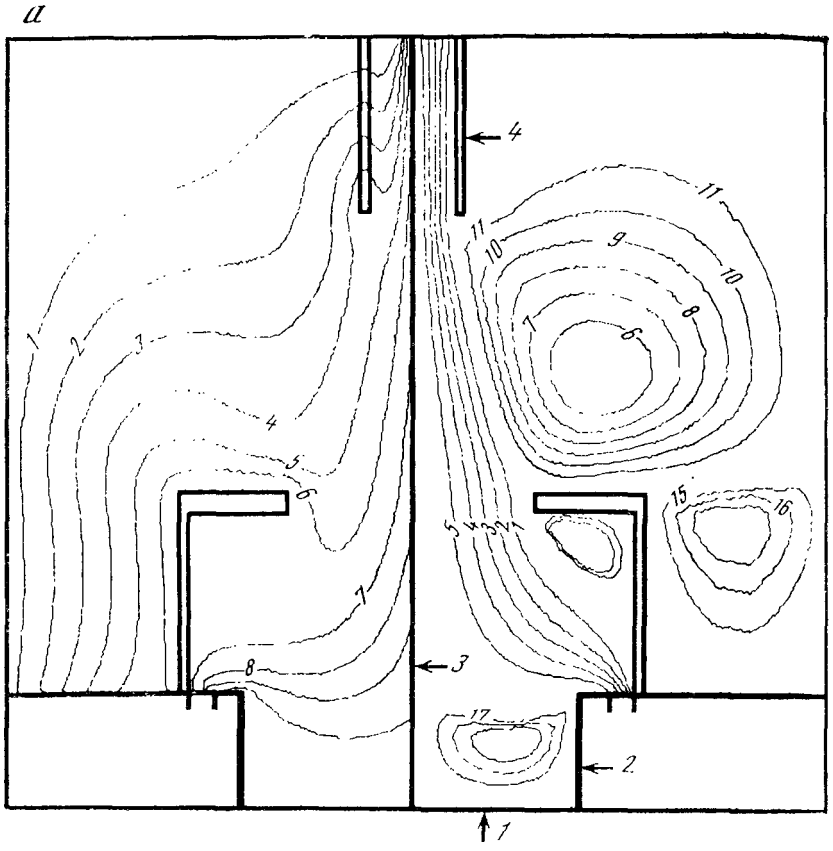


Рис. 1. Изотермы (слева) и линии уровня функции тока (справа) в камере установки выращивания монокристаллов кремния диаметром 125 мм при различном положении стенки тигля относительно поверхности расплава (Re=230, Gr/Re^2=0,0115)

а, *б* и *в* — начальное, среднее и конечное положения тигля; *г* — со стабилизирующей вставкой в тепловом узле; *1* — поверхность расплава; *2* — стенка тигля; *3* — образующая слитка; *4* — направляющий входной патрубок. Ось симметрии — поверхность выращиваемого цилиндрического слитка

Математическая постановка задачи

Поскольку решение уравнений движения сжимаемого газа при невысоких скоростях затруднительно, задача исследования газовых потоков рассматривается в рамках модели несжимаемой вязкой жидкости в приближении Буссинеска. При наличии осевой симметрии в переменных функция тока ψ — вихрь скорости ω уравнения Навье—Стокса записываются в виде

$$\frac{\partial T}{\partial t}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(ruT)+\frac{\partial}{\partial z}(vT)=\frac{1}{\mathrm{Pr}\cdot\mathrm{Re}}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial T}{\partial r}\right)+\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}\right],$$

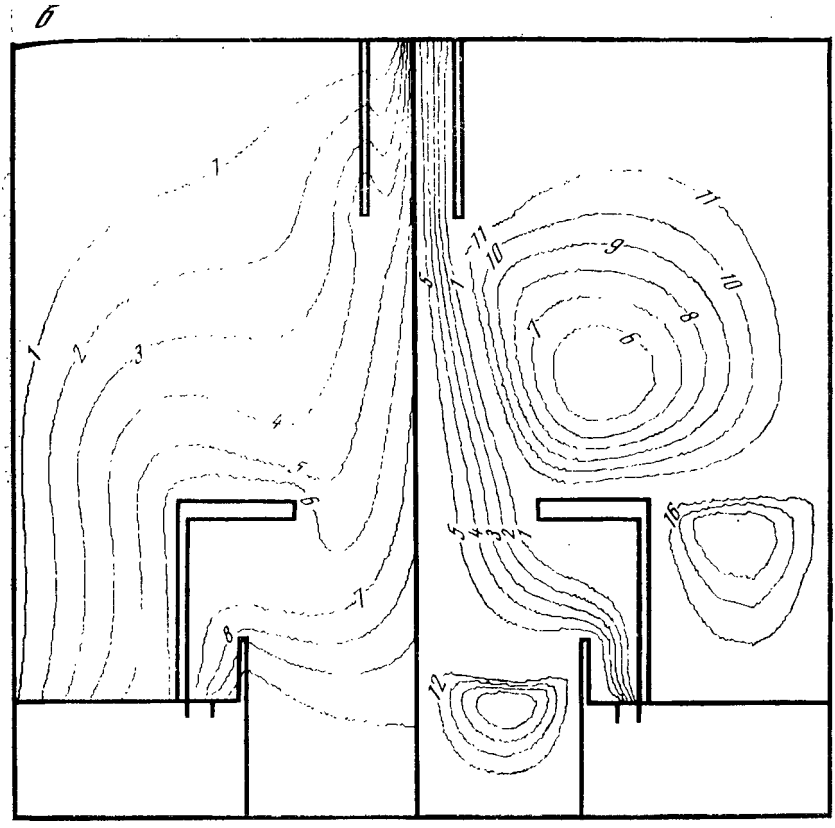


Рис. 1 (продолжение)

$$\frac{\partial\omega}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial r}(u\omega)+\frac{\partial}{\partial z}(v\omega)=\frac{1}{\mathrm{Re}}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\omega)\right)+\frac{\partial^2\omega}{\partial z^2}\right]-\frac{\mathrm{Gr}}{\mathrm{Re}^2}\frac{\partial T}{\partial r},$$

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r}\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}=-\omega,\qquad u=-\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial z},\qquad v=\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r},\tag{1}$$

где Pr, Re, Gr — числа Прандтля, Рейнольдса и Грасгофа соответственно; T — температура; u, v — радиальная и осевая компоненты скорости.

Указанные выше уравнения рассматриваются в области сложной формы, моделирующей камеру выращивания технологической установки. Различные варианты исследуемой области представлены на рис. 1. Ростовая камера имеет цилиндрическую форму. В нижней части камеры расположен тигель с расплавом, из которого вытягивается цилиндрический слиток, расположенный на оси симметрии установки. В процессе выращивания тигель поднимается с заданной скоростью так, что уровень расплава в нем остается постоянным относительно стенок ростовой камеры. При этом стенка

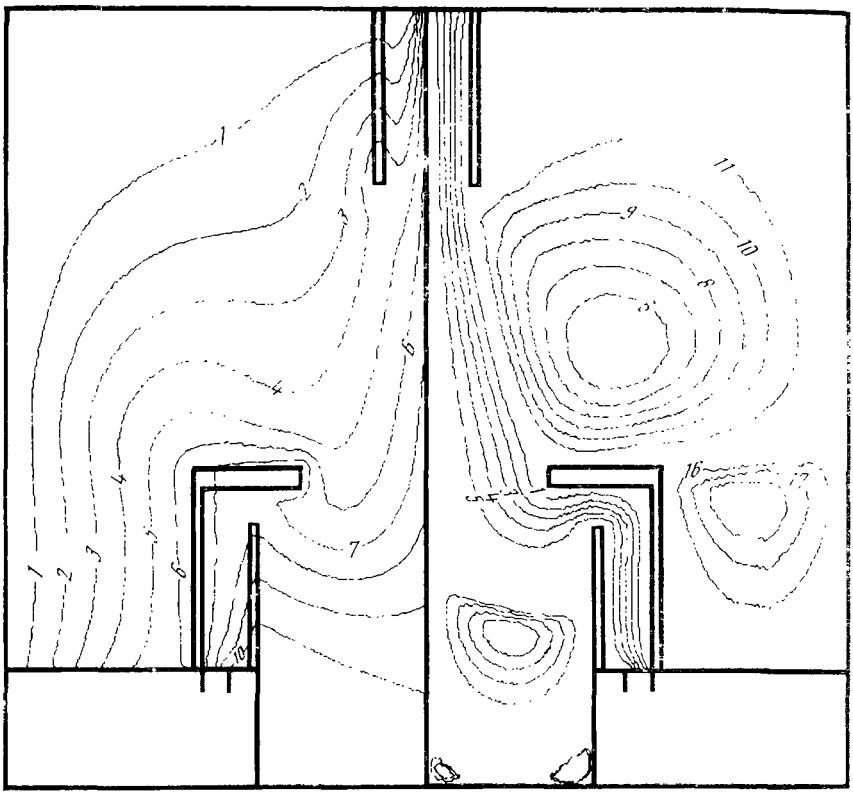


Рис. 1 (продолжение)

тигля выступает над уровнем расплава на различную высоту. Для формирования нужной структуры газовых потоков иногда в тепловом узле используется направляющий патрубок. Газ вдувается сверху через кольцевую щель между выращиваемым цилиндрическим слитком и патрубком, а отсасывается через отверстие кольцевой формы вокруг тигля.

Поскольку характерное время установления структуры конвекции много меньше времени изменения геометрии области (подъема тигля), то в каждый момент времени поля скоростей и температур в камере выращивания можно считать квазистационарными.

Граничные условия для температуры задаются на основе экспериментальных измерений в характерных точках с использованием линейной интерполяции между ними. Температура вдуваемого газа известна. На выходе задается разумное условие отсутствия кондуктивного теплового потока $\partial T/\partial n=0$. Граничные условия для функции тока соответствуют задаваемым профилям скорости на входе и выходе, которые для простоты считаются равномерными.

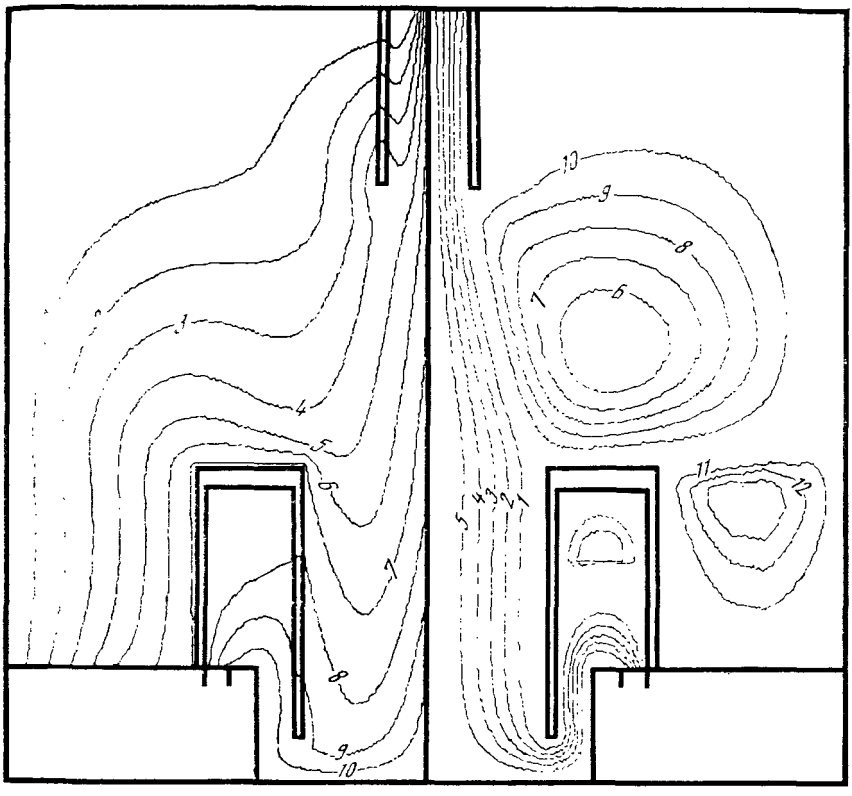


Рис. 1 (окончание)

Для получения безразмерных уравнений (1) использовались следующие характерные величины: $v_{вд}$ — средняя скорость вдува; $R_{р.к}$ — радиус ростовой камеры; $\delta T = T_{max} - T_{min}$ — характерный перепад температур. Максимальную температуру имеет поверхность расплава в тигле, минимальную — вдуваемый газ. Число Прандтля для газов в широком диапазоне изменения температур равно $Pr = 0{,}7$. Числа Грасгофа и Рейнольдса вычисляются по средней температуре газа и являются входными параметрами задачи, соответствующими конкретным режимам продувки газа.

Метод решения и результаты расчетов

Система уравнений (1) решалась по методике, заложенной в программный комплекс «Нептун» [2].

Дифференциальные уравнения аппроксимируются консервативной разностной схемой с использованием направленных разностей для конвективных членов. Разностная схема строится на неравно-

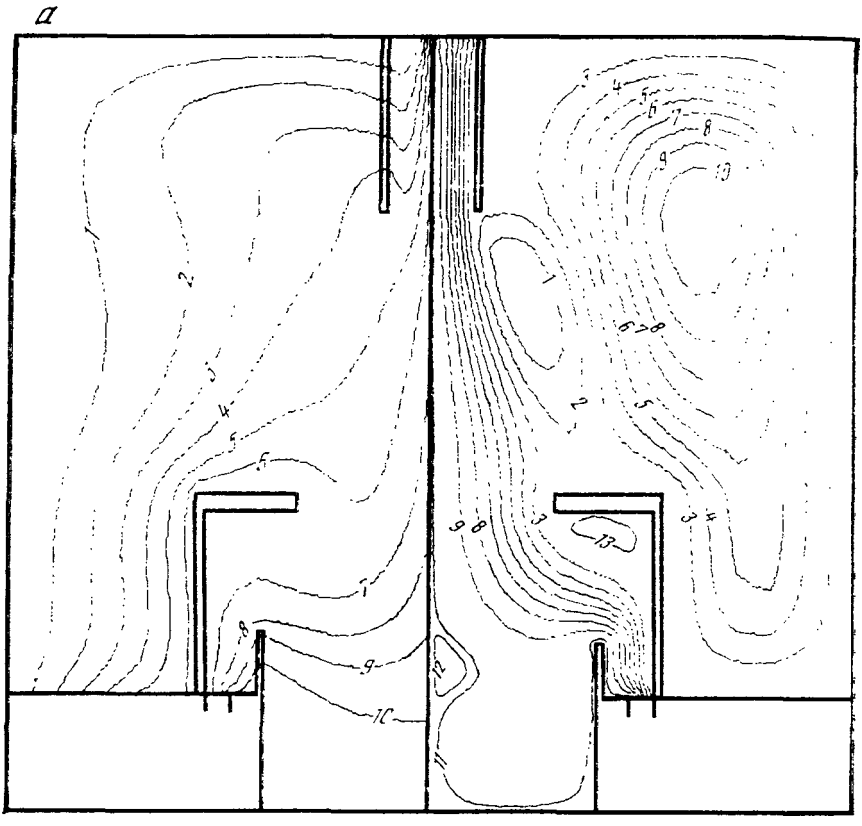


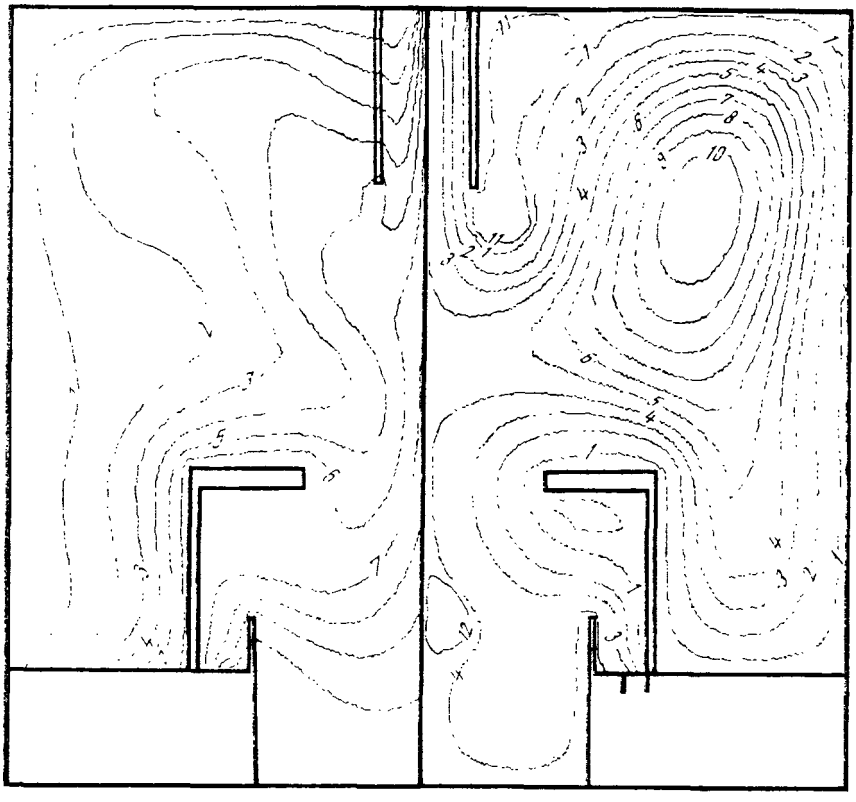
Рис. 2. Изотермы (слева) и линии уровня функции тока (справа) в камере установки выращивания монокристаллов кремния диаметром 125 мм при остаточном давлении газа в камере 50 (*а*) и 100 мм. рт. ст. (*б*) (Re=230)

а — $Gr/Re^2=0{,}83$; *б* — 3,32

мерной, согласованной сетке со сгущением в областях больших градиентов рассчитываемых величин. Использовалась сетка 40×40 шагов с отношением двух соседних шагов сетки не более 1,4. Толщина всех внутренних перегородок в рассчитываемой области равняется одному шагу сетки.

Для уравнений температуры и вихря использовалась продольно-поперечная схема [3], решаемая одномерными прогонками. Стационарное решение находилось установлением во времени. Граничные условия для вихря на твердых стенках рассчитывались по формулам второго порядка точности [4] с использованием значения функции тока на границе и в двух ближайших к ней узлах. В угловых точках вихрь вычислялся из его определения через функцию тока с учетом условия $\partial\psi/\partial n=0$ на обеих поверхностях, образующих угол. На входе и выходе из камеры для вихря использовались

б



«мягкие» условия невозмущенного потока вне рассматриваемой области, т. е. вихрь определялся через функцию тока с учетом равенства ψ вне области значению ψ на границе.

Уравнение для функции тока решалось итерационным методом переменных направлений [5]. Оптимальные итерационные параметры выбирались по Жордану для прямоугольника, включающего исследуемую область. Несмотря на то что соответствующая теория формально неприменима для рассматриваемых областей сложной формы, опыт численных экспериментов многих авторов [6] показал высокую сходимость итераций. Действительно, в данных расчетах при всех конфигурациях внутренних перегородок наблюдалась практически такая же скорость сходимости, как и для задачи в прямоугольной области. Программная реализация алгоритма для внутренних перегородок прямоугольной области довольно проста, и, таким образом, метод переменных направлений с оптимальными по Жордану параметрами является весьма эффективным для задач вычислительной гидродинамики в различных областях.

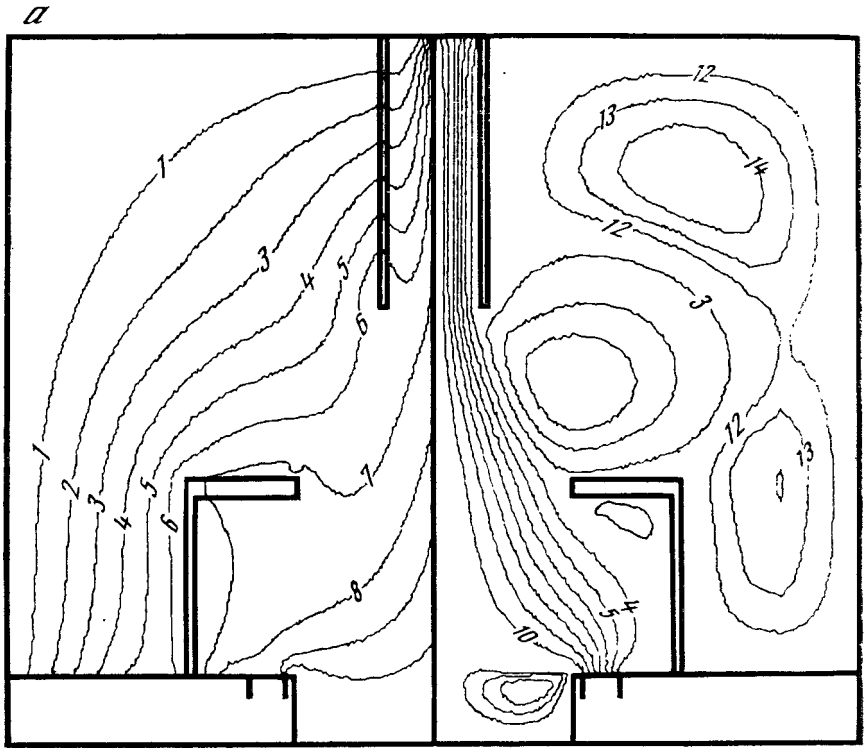


Рис. 3. Изотермы (слева) и линии уровня функции тока (справа) в камере установки выращивания монокристаллов кремния диаметром 100 мм при различном положении стенки тигля относительно поверхности расплава ($Re=133$, $Gr/Re^2=0{,}11$)

а, б — начальное и конечное положения тигля

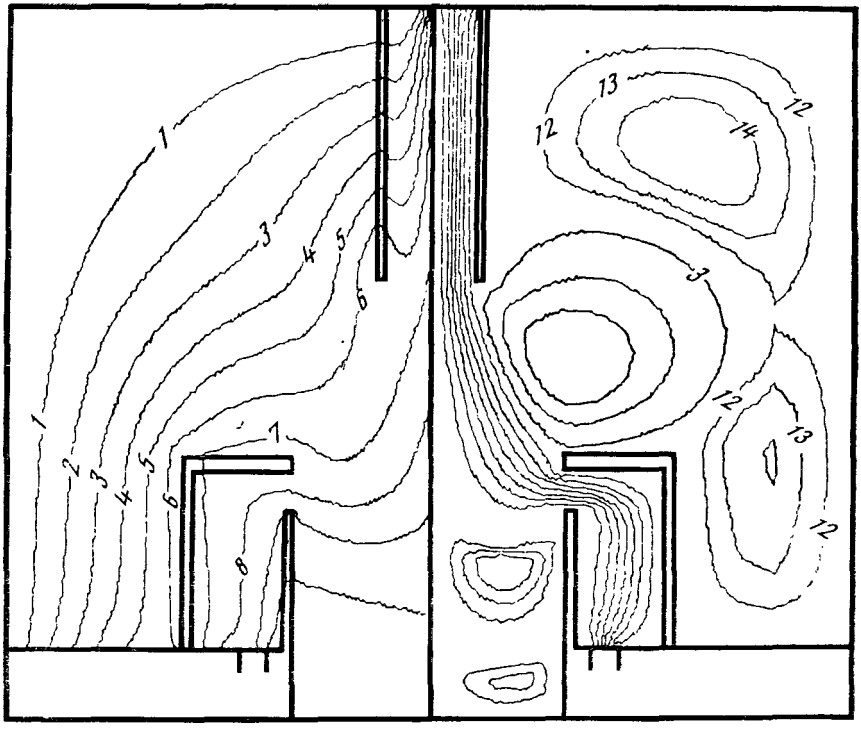
На рис. 1 представлены варианты расчетов для тигля диаметром 330 мм (загрузка металла в тигель 30 кг) с диаметром выращиваемого кристалла 125 мм. Объемный расход газа (аргона) 1200 нл/ч, давление в камере 6 мм. рт. ст. На рис. 1, *а—в* показаны квазистационарные структуры газового потока на начальной стадии выращивания кристалла, при среднем положении стенки тигля и в конце процесса, когда стенка тигля выступает над расплавом на максимальную высоту.

У поверхности расплава существует вихревое течение газа, увлекающее испаряющуюся моноокись кремния вверх в область более низких температур, где она может конденсироваться и попадать обратно в расплав. При поднятии тигля вихрь увеличивается и достигает области с температурой ниже 1100° С. Значения изотерм на рисунках вычисляются по формуле

$$T_i(°C) = i \cdot 122{,}7 + 60,$$

где i — номер изотермы.

б



В эксперименте, соответствующем рис. 1, *б*, при длине выращенного кристалла 330 мм произошел срыв бездислокационного роста по причине попадания твердой частицы на фронт кристаллизации. С целью ликвидации вихревого течения у поверхности расплава была установлена дополнительная направляющая графитовая вставка, при использовании которой безвихревой поток от поверхности расплава сразу уходит из камеры (см. рис. 1, *г*), обеспечивая устойчивый рост бездислокационного монокристалла.

На рис. 2 прослеживается изменение газовых потоков при увеличении давления в камере выращивания до 50 и 100 мм. рт. ст. Рост давления способствует увеличению вклада свободной конвекции в формирование течения газа. Подъемное течение у поверхности кристалла отжимает вдуваемый поток в объем камеры. Дальнейшее повышение давления приводит к гидродинамической неустойчивости течения и возникновению колебаний потока газа вдоль радиуса, что явно нежелательно.

На рис. 3 представлены результаты расчетов для камеры с тиглем 270 мм и диаметром выращиваемого кристалла 100 мм для начального и конечного положений тигля. Объемный расход газа 1000 нл/ч при технологическом давлении в камере 6 мм. рт. ст. Вих-

ревое течение у поверхности расплава не достигает области температур ниже 1100° С, и при таком режиме наблюдается стабильный рост бездислокационных кристаллов.

Проведенный численный анализ газодинамики в камере установки выращивания монокристаллов кремния по Чохральскому показал, что для обеспечения устойчивого роста кристаллов необходимо не допускать возникновения у поверхности расплава вихревых течений, способных поднимать испаряющуюся моноокись кремния в области температур ниже 1100° С; давление газа в камере должно находиться в пределах 5—50 мм. рт. ст.

Авторы выражают свою признательность А. А. Самарскому и В. А. Смирнову за поддержку работы и постоянное внимание к ней.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Милевский Л. С., Зарифьянц З. А.* Сопоставление совершенства структуры монокристаллов кремния, выращенных в различных условиях.— В кн.: Свойства легированных полупроводников. М.: Наука, 1977, с. 146—150.
2. *Герасимов Б. П., Елизарова Т. Г., Калачинская И. С.* и др. Комплекс программ «Нептун» для численного моделирования течения вязкой несжимаемой жидкости: Препр. ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР № 65. М., 1985. 40 с.
3. *Самарский А. А.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1983. 616 с.
4. *Роуч П.* Вычислительная гидродинамика. М.: Мир, 1980. 616 с.
5. *Самарский А. А., Николаев Е. С.* Методы решения сеточных уравнений. М.: Наука, 1978. 592 с.
6. *Федоренко Р. П.* Итерационные методы решения разностных эллиптических уравнений.— УМН, 1973, т. 28, вып. 2(170), с. 121—182.

УДК 548.55

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ЗОННОЙ ПЛАВКИ НА ОСНОВЕ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ О ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ В БИНАРНОЙ СИСТЕМЕ

О. И. Бакирова

Введение

Применение широко известных технологических процессов зонной плавки [1] и направленной кристаллизации [2] позволяет получать твердые бинарные растворы заданной концентрации [3]. Кратко опишем схему такого процесса.

На внутренних стенках цилиндрической печи поддерживается определенный температурный профиль (рис. 1), характеризующийся двумя участками постоянной температуры (T_2 и T_3) и градиентным участком между ними. В начальный момент длинная цилиндрическая ампула заполнена твердым бинарным раствором взаимно неограниченно-растворимых компонентов A и B и помещена на горячее температурное плато (T_3). Концентрация компонента A рав-

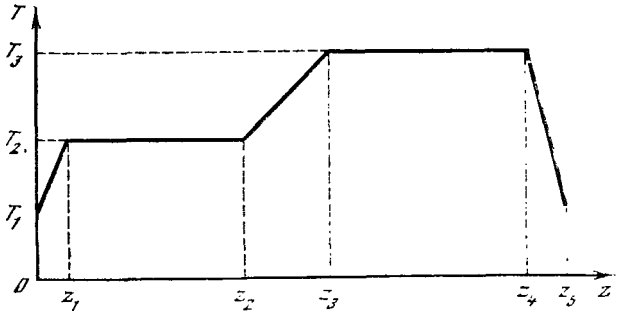
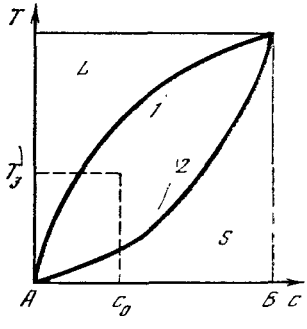


Рис. 1. Температурный профиль на внутренней стенке печи



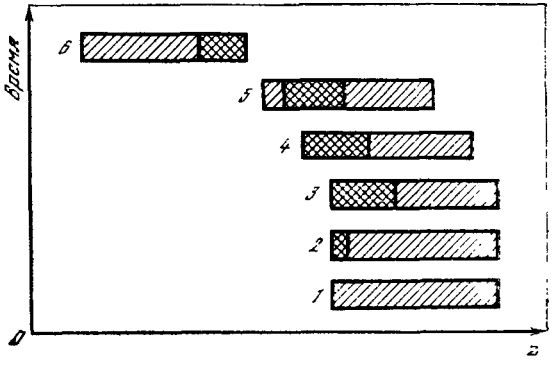


Рис. 2. Диаграмма состояний бинарной системы

1 — $T = \varphi(C)$; *2* — $T = \psi(C)$

Рис. 3. Схема процесса по времени

1 — первый этап; *2, 3* — начало и конец второго этапа; *4* — третий этап; *5, 6* — начало и конец четвертого этапа

на c_0. Диаграмма состояний бинарной системы представлена на рис. 2.

На первом этапе процесса ампула нагревается до тех пор, пока твердый раствор, став неустойчивым, не начинает плавиться. На втором этапе процесса система состоит из жидкой и твердой зон, а ампула достаточно долго выдерживается неподвижно на горячем температурном плато. Плавление постепенно прекращается, и происходит полное выравнивание концентраций как в жидкой, так и в твердой зоне (рис. 3). На третьем этапе ампулу с некоторой скоростью u_0 перемещают в направлении холодного температурного плато. Попадая в более холодную область, жидкий раствор становится неустойчивым, и при достижении критического переохлаждения начинается четвертый этап — кристаллизация. На четвертом этапе в системе имеются три основные области: вновь кристаллизующийся твердый раствор S_1, жидкая зона L и переплавляемый

твердый раствор S_2. По мере перемещения ампулы в более холодную область жидкая зона сдвигается по ампуле в противоположную сторону. Исчезновением твердой зоны S_2 заканчивается четвертый этап процесса.

Распределение концентрации в твердой зоне S_1 является результатом сложного взаимодействия тепловых и диффузионных явлений в течение всего процесса. Изменяя исходные данные — тепловой режим печи, геометрию системы, скорость перемещения ампулы u_0, начальное распределение концентрации, можно повлиять на тепло- и массообмен в системе и соответственно на распределение концентрации в твердой фазе S_1.

Обычно управляющие параметры подбираются эмпирически путем проведения большого количества трудоемких, дорогостоящих и продолжительных натурных экспериментов. Чтобы сократить их число, выяснить некоторые общие закономерности данного технологического процесса, определить управляющие параметры, необходимо провести вычислительный эксперимент [4].

1. Математическая модель процесса

1.1. Описание состояния системы

Математическое моделирование описанного выше процесса проводится в данной работе на основе численного решения одномерной нестационарной задачи о кристаллизации и плавлении бинарной системы [5].

Состояние системы в одномерном случае однозначно описывается следующей совокупностью функций:

$\bar{T}(x, t)$ — средняя температура в ампуле в сечении x в момент времени t:

$$\bar{T}(x, t) = \frac{2}{r_0^2} \int_0^{r_0} T(r, x, t)\, r dr,$$

где r_0 — радиус ампулы; $\bar{C}(x, t)$ — средняя концентрация компонента A в сечении x в момент времени t:

$$\bar{C}(x, t) = \frac{2}{r_0^2} \int_0^{r_0} C(r, x, t)\, r dr;$$

$\eta(x, t)$ — функция, описывающая состояние вещества в сечении x в момент времени t ($\eta=0$, если в сечении x вещество находится в твердом состоянии, $\eta=1$, если в жидком состоянии).

Поскольку фронты плавления и кристаллизации предполагаются плоскими, то их расположение однозначно описывается функциями $\xi_1(t)$ и $\xi_2(t)$: $\xi_1(t)$ — положение фронта кристаллизации в ампуле в момент времени t (если имеется фронт кристаллизации);

$\xi_2(t)$ — положение фронта плавления в ампуле в момент времени t (если имеется фронт плавления).

Различным этапам процесса соответствуют разные постановки задачи. Замена одной постановки на другую происходит при условии, что полученное в некоторый момент времени решение удовлетворяет некоторым соотношениям. Задача решается в системе координат, связанной с ампулой. Граничные условия для температуры, зависящие от падающего на ампулу излучения нагретых стенок печи, в этом случае зависят от времени.

1.2. Постановка задачи на первом этапе процесса

Внутри ампулы температурное поле $T(r, x, t)$ удовлетворяет уравнению

$$\varkappa\rho\frac{\partial T}{\partial t}=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(kr\frac{\partial T}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial x}\left(k\frac{\partial T}{\partial x}\right), \tag{1}$$

$0<r<r_0$, $0<x<l$,
где l — длина ампулы; $\varkappa$ — удельная теплоемкость.

На поверхности ампулы, имеющей степень черноты $\varepsilon=1$, имеем условие излучения

$$-k(\operatorname{grad} T)_n=\sigma T^4-Q_R(M); \tag{2}$$

здесь n — внешняя нормаль в точке M поверхности ампулы; $Q_R(M)$ — падающий на ампулу в точке M тепловой поток, излучаемый нагретыми внутренними поверхностями печи.

Определим функцию $T_R(M)$ (температура в потоке падающего излучения) следующим образом:

$$Q_R(M)=\sigma T_R^4(M).$$

Чтобы получить уравнение для функции $\overline{T}(x, t)$, проинтегрируем уравнение (1) по r:

$$\frac{2}{r_0^2}\int_0^{r_0}\varkappa\rho\frac{\partial T}{\partial t}rdr=\frac{2}{r_0^2}\int_0^{r_0}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(kr\frac{\partial T}{\partial r}\right)rdr+\frac{2}{r_0^2}\int_0^{r_0}\frac{\partial}{\partial x}\left(k\frac{\partial T}{\partial x}\right)rdr$$

или

$$\varkappa\rho\frac{\partial\overline{T}}{\partial t}=\frac{2}{r_0^2}\left(kr\frac{\partial T}{\partial r}\bigg|_{r=r_0}-kr\frac{\partial T}{\partial r}\bigg|_{r=0}\right)+\frac{\partial}{\partial x}\left(k\frac{\partial\overline{T}}{\partial x}\right).$$

Используя условие на оси симметрии $\partial T/\partial r|_{r=0}=0$, а также условие (2), в правой части которого заменим $T(r, x, t)$ на $\overline{T}(x, t)$, получаем

$$\varkappa\rho\frac{\partial\overline{T}}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}\left(k\frac{\partial\overline{T}}{\partial x}\right)-q(\overline{T}^4(x, t)-T_R^4(x, t)). \tag{3}$$

Интегрируя (2) по r, получаем граничное условие для функции $\bar{T}(x, t)$ при $x=0$ и $x=l$. При $x=0$

$$k\frac{\partial T}{\partial x}=\sigma(T^4(r, 0, t)-T_R^4(r, 0, t)),$$

$$k\frac{\partial \bar{T}}{\partial x}=\sigma\frac{2}{r_0^2}\int_0^{r_0}(T^4-T_R^4)\,rdr.$$

Заменяя $\frac{2}{r_0^2}\int_0^{r_0}T^4rdr$ на $\bar{T}^4$ и определяя $\bar{T}_T$ равенством

$$\bar{T}_T^4(x, t)=\frac{2}{r_0^2}\int_0^{r_0}T_R^4(r, x, t)\,rdr,$$

получаем

$$k\partial\bar{T}/\partial x=\sigma(\bar{T}^4(0, t)-\bar{T}_T^4(0, t)). \tag{4}$$

Аналогично при $x=l$

$$k\partial\bar{T}/\partial x=-\sigma(\bar{T}^4(l, t)-\bar{T}_T^4(l, t)). \tag{5}$$

Поле концентрации $C(r, x, t)$ удовлетворяет всюду внутри ампулы уравнению

$$\frac{\partial C}{\partial t}=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(rD\frac{\partial C}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial C}{\partial x}\right), \tag{6}$$

а на поверхности ампулы условию

$$\partial C/\partial n=0. \tag{7}$$

Интегрируя уравнение (6) по r, используя условие (7) и условие на оси симметрии $\partial C/\partial r=0$, получаем

$$\frac{\partial\bar{C}}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial\bar{C}}{\partial x}\right). \tag{8}$$

Аналогично из условия (7) получаем граничные условия для $\bar{C}(x, t)$ при $x=0$ и $x=l$:

$$\partial\bar{C}/\partial x=0. \tag{9}$$

Начальные условия имеют вид

$$\bar{T}(x, 0)\equiv T_0, \tag{10}$$

$$\bar{C}(x, 0)\equiv C_0. \tag{11}$$

Итак, на первом этапе процесса имеем две независимые краевые задачи для $\bar{T}$ (задача (3)—(5), (10)) и для $\bar{C}$ (задача (8), (9), (11)).

Эта постановка задачи имеет место на ограниченном интервале времени $0\leqslant t<t_1$. Момент времени t_1 определяется следующим об-

разом по диаграмме состояний. Пусть диаграмма состояний задана уравнениями $T=\varphi(C)$ — линия ликвидуса и $T=\psi(C)$ — линия солидуса. Тогда $T>\varphi(C)$ — область устойчивых состояний жидкого раствора; $T<\psi(C)$ — область устойчивых состояний твердого раствора; $\psi(C)<T<\varphi(C)$ — область неустойчивых состояний.

Пусть в некоторый момент времени t $\bar{T}(x, t)$ и $\bar{C}(x, t)$ — решения задачи. Тогда если $\bar{T}(0, t)<\psi(\bar{C}(0, t))$, то $t<t_1$, если же $\bar{T}(0, t)\geqslant\psi(\bar{C}(0, t))$, то $t\geqslant t_1$.

1.3. Постановка задачи на втором и третьем этапах процесса

На втором и третьем этапах процесса ($t>t_1$) система состоит из двух областей: зоны жидкого раствора ($0<x<\xi_2(t)$, где $\xi_2(t)$ — положение фронта плавления) и зоны твердого раствора ($\xi_2(t)<x<l$). Уравнения (3) и (8) справедливы внутри каждой из зон (коэффициенты теплопроводности и диффузии в различных зонах разные), граничные условия (4), (5), (9) остаются прежними. Начальные условия: $\bar{T}(x, t_1)$ и $\bar{C}(x, t_1)$ — решение задачи первого этапа при $t=t_1$.

На границе раздела фаз $x=\xi_2(t)$ терпят разрыв функции $\bar{C}(x, t)$, $\partial\bar{C}/\partial x$, $\partial\bar{T}/\partial x$. Аналогами уравнений (3), (8) при $x=\xi_2(t)$ являются условия типа Стефана (следствия законов сохранения энергии и массы):

$$k(\xi_2+0)\frac{\partial\bar{T}}{\partial x}(\xi_2+0)-k(\xi_2-0)\frac{\partial\bar{T}}{\partial x}(\xi_2-0)=\lambda\rho\frac{d\xi_2}{dt}, \tag{12}$$

$$D(\xi_2+0)\frac{\partial\bar{C}}{\partial x}(\xi_2+0)-D(\xi_2-0)\frac{\partial\bar{C}}{\partial x}(\xi_2-0)=$$
$$=[\bar{C}(\xi_2-0)-\bar{C}(\xi_2+0)]\frac{d\xi_2}{dt}. \tag{13}$$

Замыкают систему соотношения, связывающие $\bar{T}(\xi_2(t), t)$, $\bar{C}(\xi_2(t)-0, t)$ и $\bar{C}(\xi_2(t)+0, t)$ в соответствии с диаграммой состояний

$$\begin{aligned}&\bar{T}(\xi_2(t), t)=\varphi(\bar{C}(\xi_2(t)-0, t)),\\&\bar{T}(\xi_2(t), t)=\psi(\bar{C}(\xi_2(t)+0, t)).\end{aligned} \tag{14}$$

Задачи для функций $\bar{T}(x, t)$ и $\bar{C}(x, t)$ на втором и третьем этапах перестают быть независимыми, они связаны совокупностью нелинейных условий на границе раздела фаз (12)—(14).

На втором этапе ампула неподвижна, $u_0=0$, граничные условия для $\bar{T}(x, t)$ и член $q\bar{T}_R^4(x, t)$ в уравнении (3) от времени не зависят. В постановке, соответствующей второму этапу, задача имеет стационарное решение $\bar{T}^{(2)}(x, \infty)$, $\bar{C}^{(2)}(x, \infty)$. Функция $\bar{C}^{(2)}(x, \infty)$

имеет вид ступеньки:

$$\bar{C}^{(2)}(x, \infty) \equiv c_1 \quad \text{при} \quad 0 \leqslant x \leqslant \xi_1^0,$$

$$\bar{C}^{(2)}(x, \infty) \equiv c_2 \quad \text{при} \quad \xi_1^0 < x \leqslant l.$$

На третьем этапе задача имеет ту же постановку, что и на втором. Начинается новый отсчет времени ($t \geqslant 0$). Начальными условиями для третьего этапа являются стационарные решения задачи второго этапа: $\bar{T}(x, 0) = \bar{T}^{(2)}(x, \infty)$, $\bar{C}(x, 0) = \bar{C}^{(2)}(x, \infty)$. На третьем этапе $u_0 < 0$, функция $T_R(M)$ зависит от времени.

Третий этап продолжается до момента времени t_3, такого, что

$$\bar{T}(0, t) + \Delta T_{\text{кр}} > \varphi(\bar{C}(0, t)) \quad \text{при} \quad t < t_3,$$

$$\bar{T}(0, t) + \Delta T_{\text{кр}} \leqslant \varphi(\bar{C}(0, t)) \quad \text{при} \quad t \geqslant t_3,$$

где $\Delta T_{\text{кр}}$ — критическое переохлаждение жидкого раствора, при достижении которого начинается кристаллизация.

1.4. Постановка задачи на четвертом этапе

На четвертом этапе процесса система имеет три зоны: зону вновь кристаллизующегося раствора S_1 ($0 < x < \xi_1(t)$, где $\xi_1(t)$ — координата фронта кристаллизации), зону жидкого раствора L ($\xi_1(t) < x < \xi_2(t)$, где $\xi_2(t)$ — координата фронта плавления) и зону переплавляемого твердого раствора S_2 ($\xi_2(t) < x < l$). Скорость перемещения ампулы $u_0 < 0$, функция $T_R(M, t)$ зависит от времени.

Уравнения (3) и (8) справедливы внутри каждой из зон, граничные условия имеют тот же вид. Начальные условия: $\bar{T}(x, t_3)$ и $\bar{C}(x, t_3)$ — решения задачи третьего этапа при $t = t_3$. При $x = \xi_2(t)$ имеем совокупность условий (12)—(14). При $x = \xi_1(t)$ справедливы аналогичные соотношения

$$k(\xi_1 + 0)\frac{\partial \bar{T}}{\partial x}(\xi_1 + 0) - k(\xi_1 - 0)\frac{\partial \bar{T}}{\partial x}(\xi_1 - 0) = -\lambda\rho\frac{d\xi_1}{dt}, \tag{15}$$

$$D(\xi_1 + 0)\frac{\partial \bar{C}}{\partial x}(\xi_1 + 0) - D(\xi_1 - 0)\frac{\partial \bar{C}}{\partial x}(\xi_1 - 0) =$$

$$= [\bar{C}(\xi_1 - 0) - \bar{C}(\xi_1 + 0)]\frac{d\xi_1}{dt}, \tag{16}$$

$$\bar{T}(\xi_1(t), t) = \psi(\bar{C}(\xi_1(t) - 0, t)),$$

$$\bar{T}(\xi_1(t), t) = \varphi(\bar{C}(\xi_1(t) + 0, t)). \tag{17}$$

Решение задачи четвертого этапа (3)—(5), (8), (9), (12)—(17) представляет интерес при $t \leqslant t_4$, где t_4 определено соотношением $\xi_2(t_4) = l$.

2. Построение разностных схем

2.1. Основные тождества

Если задача первого этапа процесса тривиальна, то расчет перехода от первого этапа ко второму, а также расчет последующих стадий процесса требуют применения эффективных и достаточно точных численных методов решения задачи о фазовом переходе в бинарной системе. Близкие вопросы рассматривались в работе [6]. В данной статье построение методики в основном следует работе [7].

Консервативные разностные схемы для задачи о фазовом переходе в бинарной системе будут строиться как разностные аппроксимации законов сохранения энергии и массы на перестраивающихся по решению задачи разностных сетках. Выведем основные тождества — интегродифференциальную форму записи законов сохранения энергии и массы на изменяющихся во времени отрезках.

Пусть $[x^-(t),\ x^+(t)]$ — отрезок с изменяющимися во времени границами, принадлежащий отрезку $[0,\ l]$. Получим закон изменения энергии вещества, заключенного между $x^-(t)$ и $x^+(t)$. Определим внутреннюю энергию $\mathscr{E}(x,\ t)$ равенством

$$\mathscr{E}(x,\ t)=\varkappa\rho T(x,\ t)+\lambda\rho\eta(x,\ t),$$

где λ — удельная теплота фазового перехода. Если в точке x в момент времени t вещество находится в жидком состоянии, то $\eta(x,\ t)=1$, если в твердом состоянии, то $\eta(x,\ t)=0$. Здесь и далее будем опускать черту над функциями $\overline{T}(x,\ t)$ и $\overline{C}(x,\ t)$.

Если точки $x=\xi_1(t)$ или $x=\xi_2(t)$ не принадлежат интервалу $(x^-(t),\ x^+(t))$, то всюду внутри отрезка имеет место уравнение теплопроводности, используя которое получаем

$$\frac{d}{dt}\int\limits_{x^-(t)}^{x^+(t)}\mathscr{E}(x,\ t)\,dx=\int\limits_{x^-(t)}^{x^+(t)}\frac{\partial\mathscr{E}(x,\ t)}{\partial t}dx+\frac{dx^+(t)}{dt}\mathscr{E}(x^+-0,\ t)-\frac{dx^-(t)}{dt}\mathscr{E}(x^-+$$

$$+0,t)=\int\limits_{x^-(t)}^{x^+(t)}\varkappa\rho\frac{\partial T}{\partial t}dx+\frac{dx^+(t)}{dt}\mathscr{E}(x^+-0,\ t)-\frac{dx^-}{dt}\mathscr{E}(x^-+0,\ t)=$$

$$=\int\limits_{x^-(t)}^{x^+(t)}\left[\frac{\partial}{\partial x}\left(k(x)\frac{\partial T}{\partial x}\right)-q(T^4-T_R^4)\right]+$$

$$+\frac{dx^+}{dt}\mathscr{E}(x^+-0,\ t)-\frac{dx^-}{dt}\mathscr{E}(x^-+0,\ t)=$$

$$=k(x^+-0)\frac{\partial T}{\partial x}(x^+-0)-k(x^-+0)\frac{\partial T}{\partial x}(x^-+0)-q\int\limits_{x^-(t)}^{x^+(t)}(T^4-$$

$$-T_R^4)\,dx+\frac{dx^+}{dt}\mathscr{E}(x^+-0,\ t)-\frac{dx^-}{dt}\mathscr{E}(x^-+0,\ t).$$

Итак, основное тождество для функции $\mathscr{E}(x, t)$ имеет вид

$$\frac{d}{dt}\int\limits_{x^-(t)}^{x^+(t)} \mathscr{E}(x, t)\,dx = k(x^+ - 0)\frac{\partial T}{\partial x}(x^+ - 0) - k(x^- + 0)\frac{\partial T}{\partial x}(x^- + 0) -$$

$$- q\int\limits_{x^-(t)}^{x^+(t)} (T^4 - T_R^4)\,dx + \frac{dx^+}{dt}\mathscr{E}(x^+ - 0, t) - \frac{dx^-}{dt}\mathscr{E}(x^- + 0, t). \quad (18)$$

Если внутри отрезка $[x^-(t), x^+(t)]$ содержится точка $x = \xi_1^-(t)$ или $x = \xi_2^+(t)$, то

$$\frac{d}{dx}\int\limits_{x^-(t)}^{x^+(t)} \mathscr{E}(x, t)\,dx = \frac{d}{dx}\int\limits_{x^-(t)}^{\xi(t)} \mathscr{E}(x, t)\,dx + \frac{d}{dx}\int\limits_{\xi(t)}^{x^+(t)} \mathscr{E}(x, t)\,dx.$$

Применяя к каждому из слагаемых тождество (18), имеем

$$\frac{d}{dt}\int\limits_{x^-(t)}^{x^+(t)} \mathscr{E}(x, t)\,dx = k(x^+ - 0)\frac{\partial T}{\partial x}(x^+ - 0) - k(x^- + 0)\frac{\partial T}{\partial x}(x^- + 0) -$$

$$- q\int\limits_{x^-(t)}^{x^+(t)} (T^4 - T_R^4)\,dx + \frac{dx^+}{dt}\mathscr{E}(x^+ - 0, t) - \frac{dx^-}{dt}\mathscr{E}(x^- + 0, t) +$$

$$+ \left\{\left[k(\xi + 0)\frac{\partial T}{\partial x}(\xi + 0) - k(\xi - 0)\frac{\partial T}{\partial x}(\xi - 0)\right] -\right.$$

$$\left. - \frac{d\xi}{dt}[-\varepsilon(\xi + 0, t) + \mathscr{E}(\xi - 0, t)]\right\}. \quad (19)$$

В силу условия (12) фигурная скобка в (19) обращается в нуль. Следовательно, и в том случае, когда отрезок $[x^-(t), x^+(t)]$ содержит точку фазового перехода, основное тождество для функции $\mathscr{E}(x, t)$ имеет вид (18).

Аналогично выводится закон изменения массы на отрезке $[x^-(t), x^+(t)]$. Основное тождество для функции $C(x, t)$ имеет вид

$$\frac{d}{dt}\int\limits_{x^-(t)}^{x^+(t)} C(x, t)\,dx = \left[D(x^+ - 0)\frac{\partial C}{\partial x}(x^+ - 0) - D(x^- + 0)\frac{\partial C}{\partial x}(x^- + 0)\right] +$$

$$+ \frac{dx^+}{dt}C(x^+ - 0, t) - \frac{dx^-}{dt}C(x^- + 0, t). \quad (20)$$

При выводе основных тождеств в случае, когда $x^-(t) \equiv 0$ или $x^+(t) \equiv 0$, надо использовать граничные условия (4), (5) и (9), заменяя значения $\partial T/\partial x$ или $\partial C/\partial x$ на концах отрезка $[0, l]$ их экви-

валентами. Например, при $x^-=0$ имеем

$$\frac{d}{dt}\int\limits_0^{x^+(t)} \mathscr{E}dx = \int\limits_0^{x^+(t)} \frac{\partial \mathscr{E}}{\partial t}\,dt + \frac{dx^+}{dt}\mathscr{E}(x^+-0,t) =$$

$$= \int\limits_0^{x^+(t)} \left[\frac{\partial}{\partial x}\left(k\frac{\partial T}{\partial x}\right) - q\left(T^4 - T_R^4(x)\right)\right]dx + \frac{dx^+}{dt}\mathscr{E}(x^+-0,t) =$$

$$= k\frac{\partial T}{\partial x}(x^+-0) - k\frac{\partial T}{\partial x}(0) - q\int\limits_0^{x^+(t)}\left(T^4 - T_R^4(x)\right)dx + \frac{dx^+}{dt}\mathscr{E}(x^+-0,t).$$

Используя граничное условие (4) при $x=0$, получим основное тождество на торце ампулы $x=0$:

$$\frac{d}{dt}\int\limits_0^{x^+(t)} \mathscr{E}dx = k\frac{\partial T}{\partial x}(x^+-0) - \sigma\left(T^4 - T_T^4(0,t)\right) -$$

$$- q\int\limits_0^{x^+(t)}\left(T^4 - T_R^4(x,t)\right)dx + \frac{dx^+}{dt}\mathscr{E}(x^+-0,t). \tag{21}$$

2.2. Разностная сетка

Проведем построение разностной сетки для четвертого этапа (для всех остальных этапов сетка строится аналогично). Пусть $\xi_1(t)$ и $\xi_2(t)$ — положения фронтов кристаллизации и плавления соответственно в момент времени t. Предположим, что известны некоторые их приближения y_1 и y_2 соответственно. Тогда точки y_1 и y_2 будут узлами сетки. В каждом из отрезков $[0, y_1]$, $[y_1, y_2]$ и $[y_2, l]$ вводится равномерная сетка, а затем на тех отрезках, одним из концов которых является точка y_1 (или y_2), помещается некоторое количество точек, сгущающихся к точке y_1 (или y_2) как геометрическая прогрессия. При этом шаги сетки являются функциями y_1 и y_2, а следовательно, будут изменяться не только в зависимости от времени, но и от номера итерации при определении решения задачи на новом временно́м слое. Сетка будет перестраиваться на каждой итерации. Число узлов на каждом из отрезков $[0, y_1]$, $[y_1, y_2]$ и $[y_2, l]$ фиксировано; 0, $n1$, $n2$ и $n3$ — номера узлов $x=0$, $x=y_1$, $x=y_2$ и $x=l$ соответственно.

2.3. Разностная аппроксимация задачи

Проведем построение разностных схем интегроинтерполяционным методом. Каждому узлу i сопоставим отрезок интегрирования $[x_i^-(t), x_i^+(t)]$, определив

$$x_i^-(t) = 0{,}5\left(x_{i-1}(t) + x_i(t)\right), \tag{22}$$

$$x_i^+(t) = 0{,}5\left(x_i(t) + x_{i+1}(t)\right). \tag{23}$$

Если $i=0$, то $x_0^-(t)=0$, а $x_0^+(t)$ определено формулой (23); если $i=n$, то $x_n^-(t)$ определено (22), а $x_n^+(t)=l$.

Обозначим $E_i(t)$ — интеграл внутренней энергии по i-му отрезку и $M_i(t)$ — интеграл концентрации компонента A по i-му отрезку:

$$E_i(t)=\int\limits_{x_i^-(t)}^{x_i^+(t)} \mathscr{E}(x,t)\,dx, \qquad M_i(t)=\int\limits_{x_i^-(t)}^{x_i^+(t)} C(x,t)\,dx.$$

В качестве аппроксимации задачи (3)—(5), (8), (9), (12)—(17) в i-м узле сетки выберем разностную форму законов изменения энергии и массы во времени на отрезке $[x_i^-(t), x_i^+(t)]$, выражаемых основными тождествами. Для замыкания системы разностных уравнений необходимо добавить еще условия (14) при $x_{n1}(t)=\xi_1(t)$ и условия (17) при $x_{n2}(t)=\xi_2(t)$.

Во всех узлах сетки i, кроме $i=0$ и $i=n$, функциям $\mathscr{E}(x,t)$ и $C(x,t)$ сопоставлены значения $\mathscr{E}^j(x_i-0)$, $\mathscr{E}^j(x_i+0)$, $C^j(x_i-0)$, $C^j(x_i+0)$, аппроксимирующие соответственно левое и правое предельные значения функций $\mathscr{E}(x,i)$ и $C(x,t)$ в точке x_i в момент времени t_j (для единообразия записи схемы во всех узлах сетки, включая границы фаз). Во всех узлах сетки, кроме $x_{n1}(t)=\xi_1(t)$ и $x_{n2}(t)=\xi_2(t)$, $\mathscr{E}^j(x_i-0)=\mathscr{E}^j(x_i+0)$, $C^j(x_i-0)=C^j(x_i+0)$.

Обозначим $\Delta x^j_{i-1/2}=x_i^j-x^j_{i-1}$.

Построим полностью неявную схему для перехода со слоя j (момент времени t_j) на слой $j+1$ (момент времени t_{j+1}). Опишем аппроксимацию основного тождества (18) для функции $\mathscr{E}(x,t)$ при $0<i<n3$. Аппроксимация основных тождеств для функции $\mathscr{E}(x,t)$ при $i=0$ и $i=n3$, а также аппроксимация основных тождеств для функции $C(x,t)$ при $0\leqslant i\leqslant n3$ проводится аналогично.

Аппроксимируем интеграл $E_i(t)$ на сетке

$$E_i(\mathscr{E}^j, x^j)=0{,}5\,(\mathscr{E}^j(x_i-0)\,\Delta x^j_{i-1/2}+\mathscr{E}^j(x_i+0)\,\Delta x^j_{i+1/2}),$$

$$i=1,\ldots,n3-1,$$

$$E_0(\mathscr{E}^j, x^j)=0{,}5\mathscr{E}^j(0)\,\Delta x^j_{1/2}, \quad i=0,$$

$$E_{n3}(\mathscr{E}^j, x^j)=0{,}5\mathscr{E}^j(x_{n3})\,\Delta x^j_{n3-1/2}, \quad i=n3.$$

Здесь и далее функции непрерывного аргумента и их сеточные аналоги обозначаются одинаковыми буквами.

Левая часть основного тождества (18) аппроксимируется выражением

$$L_i=[E_i(\mathscr{E}^{j+1}, x^{j+1})-E_i(\mathscr{E}^j, x^j)]/\tau, \quad i=0,1,\ldots,n3 \tag{24}$$

Потоки энергии аппроксимируются как обычно:

$$Q_{i+1/2}=k(x_{i+1/2})\,[\mathscr{E}_{i+1}(x_{i+1}-0)-\mathscr{E}_i(x_i+0)]/\Delta x_{i+1/2},$$
$$i=0,1,\ldots,n3-1. \tag{25}$$

Суммарный поток энергии излучения (ампулы на печь и печи на ампулу)

$$q \int\limits_{x^-(t)}^{x^+(t)} (T^4 - T_R^4)\, dx$$

аппроксимируется на сетке выражением

$$R_i = q \cdot 0{,}5\,(\Delta x_{i-1/2} + \Delta x_{i+1/2})\,(T_i - T_{Ri})\,J\,(T_i, T_{Ri}), \tag{26}$$

где $J(a, b) = a^3 + a^2 b + ab^2 + b^3$.

Все значения функций x_i, $\mathscr{E}_i$, T_i и C_i в выражениях (25) и (26) надо взять на $(j+1)$-м слое.

В качестве аппроксимации членов типа переноса $(dx/dt)\mathscr{E}(x, t)$, отражающих в основном тождестве движение сетки во времени, выбрана следующая:

$$W_{i-1/2} = \frac{x_{i-1/2}^{j+1} - x_{i-1/2}^{j}}{\tau}\,\frac{\mathscr{E}_{i-1}^{j+1} + \mathscr{E}_i^{j+1}}{2}, \quad i = 1, \ldots, n3. \tag{27}$$

Из-за наличия в схеме членов типа переноса необходимо ввести монотонизацию. Это позволяет вести расчет с существенно большим шагом по времени [7]. Монотонизация выражается во внесении поправки в аппроксимацию потока энергии (25):

$$\overline{Q}_{i+1/2} = Q_{i+1/2}\,(1 + \mu_{i+1/2}), \tag{28}$$

где

$$\mu_{i+1/2} = \frac{d_{i+1/2}^2}{1 + |d_{i+1/2}|},$$

$$d_{i+1/2} = \frac{(x_{i+1/2}^{j+1} - x_{i+1/2}^{j})\,\Delta x_{i+1/2}^{j+1}}{\tau k_{i+1/2}\,(x_{i+1/2}^{j+1})}.$$

Полностью неявная (все неизвестные значения функций T, $\mathscr{E}$, C и x взяты на $(j+1)$-м слое) разностная схема, аппроксимирующая основное тождество (18), имеет вид

$$L_i = \widetilde{Q}_{i+1/2} - \widetilde{Q}_{i-1/2} - R_i + W_{i+1/2} - W_{i-1/2}, \qquad i = 1, \ldots, n3 - 1. \tag{29}$$

Здесь L, $\widetilde{Q}$, R и W определены равенствами (24)—(28).

Разностная схема для $i=0$ и $i=n3$ записывается в виде

$$L_0 = \widetilde{Q}_{1/2} - R_0^- - R_0 + W_{1/2}, \quad i = 0, \tag{30}$$

$$L_{n3} = R_{n3}^+ - \widetilde{Q}_{n3-1/2} - R_{n3} - W_{n3-1/2}, \quad i = n3, \tag{31}$$

где $R_0^- = \sigma(T_0 - T_T(0, t^{j+1}))\,J(T_0, T_T(0, t^{j+1}))$ аппроксимирует выражение $\sigma(T^4 - T_T^4(0, t))$ в основном тождестве (21) для границы $x = 0$, а R^+_{n3} — аналогичное выражение для границы $x = l$.

Система нелинейных разностных уравнений (29)—(31) дополняется аналогичными уравнениями для концентрации, а также условиями сопряжения

$$T_{n1}^{j+1} = \varphi\,[C_{n1}^{j+1}\,(x_{n1}^{j+1} + 0)],$$
$$T_{n1}^{j+1} = \psi\,[C_{n1}^{j+1}\,(x_{n1}^{j+1} - 0)], \tag{32}$$

$$T_{n2}^{j+1} = \psi\,[C_{n2}^{j+1}\,(x_{n2}^{j+1} + 0)],$$
$$T_{n2}^{j+1} = \varphi\,[C_{n2}^{j+1}\,(x_{n2}^{j+1} - 0)]. \tag{33}$$

Значения x_i^{j+1} есть координаты узлов сетки, построенной по значениям $x_{n1}^{j+1} = \xi_1^{j+1}$ и $x_{n2}^{j+1} = \xi_2^{j+1}$.

Полученная система уравнений относительно неизвестных $\mathscr{E}^{j+1}$ (или T^{j+1}), C^{j+1}, ξ_1^{j+1}, ξ_2^{j+1} представляет собой консервативную схему, удовлетворяющую разностным аналогам основных свойств дифференциальной системы. Действительно, складывая уравнения (29) при $i=1, \ldots, n3-1$ с уравнениями (30) и (31), получим, что полное изменение внутренней энергии в ампуле за время τ равно разности между энергией падающего на ампулу излучения нагретых стенок печи и энергией, излучаемой ампулой в течение интервала времени τ.

Складывая аналоги уравнений (29)—(31) для функций C, получим, что полная масса компонента A в ампуле не изменяется во времени.

3. Итерационный процесс

3.1. Итерационный процесс для задачи четвертого этапа

Пусть известны ξ_1^j, ξ_2^j, x_i^j, $\mathscr{E}^j(x_i \pm 0)$, $C^j(x_i \pm 0)$. Обозначим $\xi_1^{(s)}$, $\xi_2^{(s)}$, $x^{(s)}$, $\mathscr{E}^{(s)}$, $C^{(s)}$ s-ю итерацию при определении ξ_1^{j+1}, ξ_2^{j+1}, x^{j+1}, $\mathscr{E}^{j+1}$, C^{j+1}.

Положим $\xi_1^{(0)} = \xi_1^j$, $\xi_2^{(0)} = \xi_2^j$, $x^{(0)} = x^j$, $\mathscr{E}^{(0)} = \mathscr{E}^j$, $C^{(0)} = C^j$.

Пусть значения всех искомых функций на s-й итерации известны. Определение их значений на $(s+1)$-й итерации начинается с определения положения фронтов плавления и кристаллизации $\xi_2^{(s+1)}$ и $\xi_1^{(s+1)}$, а также правых и левых предельных значений концентрации и энергии на фронтах, т. е. определяются две совокупности неизвестных:

$$\{\xi_1^{(s+1)}, T_{n1}^{(s+1)}, C_{n1}^{(s+1)}\,(x_{n1}^{(s+1)} + 0), C_{n1}^{(s+1)}\,(x_{n1}^{(s+1)} - 0)\}, \tag{34}$$

$$\{\xi_2^{(s+1)}, T_{n2}^{(s+1)}, C_{n2}^{(s+1)}\,(x_{n2}^{(s+1)} + 0), C_{n2}^{(s+1)}\,(x_{n2}^{(s+1)} - 0)\}. \tag{35}$$

Для определения четырех значений из совокупности (34) используем систему четырех уравнений, в которую входят уравнение (29) и аналогичное ему уравнение для функции C при $i=n1$, а также два условия сопряжения (32).

Система уравнений для определения значений совокупности (35) включает уравнение (29) и аналогичное ему уравнение для функции C при $i=n2$ и условия сопряжения (33).

При решении первой из этих систем все значения x_i^{j+1}, зависящие от ξ_2^{j+1}, определяются по $\xi_2^{(s)}$, а при решении второй системы значения x_i^{j+1}, зависящие от ξ_1^{j+1}, определяются по $\xi_1^{(s)}$. Таким образом, эти две системы перестают быть явно связанными через значения $\xi_1^{(s+1)}$ и $\xi_2^{(s+1)}$.

Опишем допущения, принимаемые при решении первой из этих систем:

1) вместо значений $C_{n1\pm1}^{j+1}$ и $\mathscr{E}_{n1\pm1}^{j-1}$ в выражении (25) и (27) для $Q_{n1\pm1}$ и $W_{n1\pm1}$ подставляются значения $C_{n1\pm1}^{(s)}$ и $\mathscr{E}_{n1\pm1}^{(s)}$ соответственно;

2) во входящее в формулу (28) выражение для поправки $\mu_{i+1/2}$ вместо $x_{i\pm1/2}^{j+1}$ подставляются значения с s-й итерации;

3) в формуле (26) для R_i выражение $J(T_{n1}^{j+1}, T_{Rn1}^{j+1})$ заменяется на выражение $J(T_{n1}^{(s)}, T_R(x_{n1}^{(s)}, t_{j+1}))$;

4) все остальные величины с $(j+1)$-го слоя считаются неизвестными с $(s+1)$-й итерации.

Допущения для второй из описанных выше систем совершенно аналогичны. В силу принятого выше эти две системы могут решаться независимо. Каждая из них является нелинейной алгебраической системой четырех уравнений для четырех неизвестных и может быть решена методом Ньютона. В качестве начальных приближений следует взять значения соответствующих величин с s-й итерации.

Итак, найдены значения из совокупностей (34) и (35). По известным теперь значениям $\xi_1^{(s+1)}$ и $\xi_2^{(s+1)}$ строится новая сетка так, как это описано выше, находятся $x_i^{(s+1)}$ и $\Delta x_{i+1/2}^{(s-1)}$, которые подставляются в уравнения (29)—(31) (и в аналоги этих уравнений для C). После этого система для определения оставшихся неизвестных $\mathscr{E}_i^{(s+1)}$ и $C_i^{(s+1)}$ при $i=0,1,\ldots,n3$ $(i\neq n1,\ i\neq n2)$ распадается на шесть независимых между собой краевых задач для определения функций $\mathscr{E}$ и C в трех зонах $S1$, L и $S2$, которые могут быть решены прогонкой.

Так, функция $\mathscr{E}^{(s+1)}$ в твердой зоне $S1$ определяется из системы (29) при $i=1,\ldots,n1-1$ с граничными условиями третьего рода (30) и с граничным условием первого рода при $i=n1$ (поскольку $T_{n1}^{(s+1)}$ уже известно). Функция $\mathscr{E}^{(s+1)}$ в твердой зоне $S2$ определяется из системы (29) при $i=n2+1,\ldots,n3-1$ с граничными условиями первого рода при $i=n2$ (так как $T_{n2}^{(s+1)}$ уже известно) и с граничным условием третьего рода (31) при $i=n3$.

В жидкой зоне L система (29) при $i=n1+1,\ldots,n2-1$ для определения $\mathscr{E}^{(s+1)}$ замыкается заданием условий первого рода при $i=n1$ и $i=n2$.

Аналогично определяются оставшиеся неизвестные $C_i^{(s+1)}$, $i=0,1,\ldots,n3$ $(i\neq n1,\ i\neq n2)$.

Таким образом найдена $(s+1)$-я итерация.

3.2. Итерационный процесс при смене постановки задачи

Не представляет труда построить итерационный процесс для решения задачи на первом, втором и третьем этапах. Пусть решается задача первого этапа и найдено решение на очередном слое $(j+1)$ — T^{j+1}, C^{j+1}. Если $T^{j+1}(0)\leqslant\psi(C^{j+1}(0))$, то счет продолжается в постановке первого этапа, если же $T^{j+1}>\psi(C^{j+1}(0))$, то полученное на $(j+1)$-м слое решение отбрасывается и вновь определяется из разностной схемы для второго и третьего этапов, записанной для слоев j и $j+1$. При этом на j-м слое определяются функции ξ_2^j, x_i^j, $\mathscr{E}_i^j$, C_i^j для $i=n1,\ldots,n2$. При $i=n1,\ldots,n2$ $\xi_2^j=0$, $x_i^j=0$, $\mathscr{E}_i^j=0$, $C_i^j=0$, следовательно, $E_i^j=M_i^j=0$.

Необходимо правильно выбрать начальное приближение $\xi_2^{(0)}$, $x_i^{(0)}$, $\mathscr{E}_i^{(0)}$, $C_i^{(0)}$, так как при $\xi_2^{(0)}=\xi_2^j$ разностные уравнения для определения следующей итерации не имеют смысла (нуль в знаменателе), а при $\mathscr{E}_i^{(0)}=\mathscr{E}_i^j$, $C_i^{(0)}=C_i^j$ (как это имеет место во всех остальных случаях) итерационный процесс не сходится.

Итерационный процесс хорошо сходится, если начальное приближение выбрать следующим образом: $\xi_1^{(0)}=\varepsilon$, где ε — малое положительное число того же порядка, что и характерное смещение фронта за один шаг по времени в данной задаче (далее в расчетах $\varepsilon=0{,}01$, $\varepsilon=0{,}001$); $T_i^{(0)}=T_{n2}^j$; $C_i^{(0)}(x_i^{(0)}-0)=\varphi^{-1}(T_{n2}^j)$; $C^{(0)}(x_{n2}^{(0)}-0)=\psi^{-1}(T_{n2}^j)$, $i=n1,\ldots,n2$.

Пусть теперь решается задача третьего этапа и найдено решение задачи на новом $(j+1)$-м слое: ξ_2^{j+1}, x^{j+1}, $T^{j+1}(x^{j+1})$, $C^{j+1}(x^{j+1})$. Если $T^{j+1}(0)+\Delta T_{\text{кр}}\geqslant\varphi(C^{j+1}(0))$, то счет продолжается в той же постановке. Если $T^{j+1}(0)+\Delta T_{\text{кр}}<\varphi(C^{j+1}(0))$, то решение, полученное на $(j+1)$-м слое, в постановке третьего этапа отбрасывается и для расчета $(j+1)$-го слоя используется разностная схема для четвертого этапа. При этом на j-м слое доопределяются значения функций x_i^j, $\mathscr{E}_i^j$ и C_i^j для $i=0,\ldots,n1$: $\xi_1^j=0$, $x_i^j=0$, $T_i^j=0$, $C_i^j=0$ (для $n1$ — левые предельные значения $\mathscr{E}$ и C).

В качестве начального приближения для $(j+1)$-го слоя можно выбрать: $\xi_1^{(0)}=\varepsilon$, $x_i^{(0)}$ рассчитывается по $\xi_1^{(0)}$; $T_i^{(0)}=T_{n1}^j$; $C^{(0)}(x_i^{(0)}-0)=\psi^{-1}(T_{n1}^j)$; $C^{(0)}(x_{n1}^{(0)}+0)=\varphi^{-1}(T_{n1}^j)$, $i=0,\ldots,n1$.

4. Результаты расчетов

Расчеты проводились при следующих значениях параметров: $l=10$, $k_L=200$, $k_S=50$, $D_S=10^{-6}$, $r_0=0{,}5$, $q=10^{-7}$, $c_0=0{,}25$, $u_0=0{,}01$, $\lambda=100$, $T_1=5$, $T_2=10$, $T_3=20$, $T_{\text{кр}}=0{,}1$.

Варьировались параметры D_L и $n4$ (количество точек в твердой фазе $S2$): $D_L=1$; 0,1; 0,01 и $n4=4$, 11.

Иллюстрируются расчеты на четвертом этапе процесса, когда формируется новая твердая фаза $S1$.

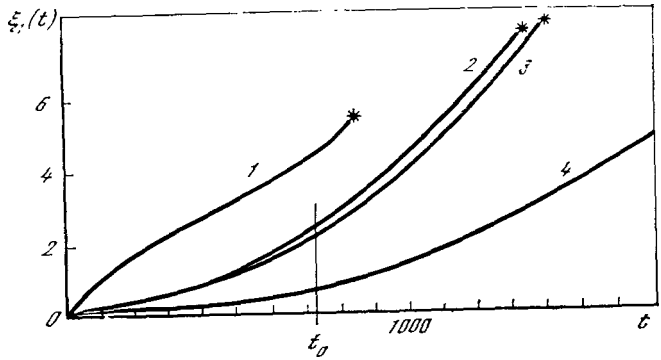
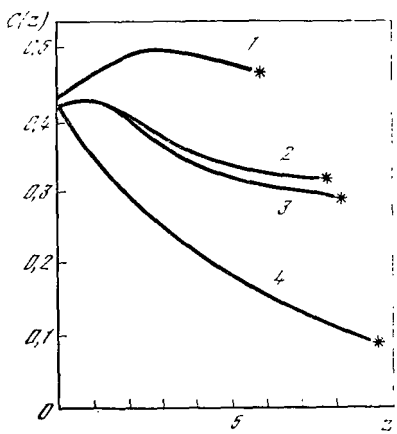


Рис. 4. Зависимость координаты фронта кристаллизации от времени
1 — D_L =1,0, k_{S2} =6,0; 2—0,1, 6,0; 3 0,1, 2,0; 4—0,01, 6,0



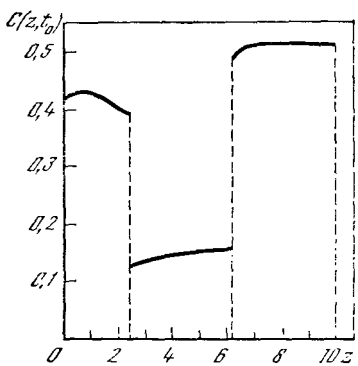


Рис. 5. Профили концентрации во вновь закристаллизовавшейся твердой фазе
Обозначения те же, что на рис. 4

Рис. 6. Профиль концентрации в ампуле в момент времени t_0

На рис. 4 представлены зависимости положения фронта кристаллизации от времени. Скорость формирования новой твердой фазы растет при увеличении коэффициента диффузии в жидкой фазе. Звездочками отмечен момент времени t_4 для различных вариантов данных. Профили концентрации во вновь закристаллизовавшейся твердой фазе показаны на рис. 5. Сравнение кривых *2* и *3* на рис. 4 и 5 показывает, что расчеты, проведенные на грубых сетках, дают результаты, близкие к результатам, полученным на подробных сетках.

На рис. 6 представлен профиль концентрации в ампуле в момент времени, отмеченный t_0 для кривой *2* на рис. 4.

ЛИТЕРАТУРА

1. Зонная плавка: [Сб. пер. ст.]/Под ред. В. Н. Вигдоровича. М.: Металлургия, 1966. 436 с.
2 Полупроводниковые соединения A^3B^5: [Сборник]/Под ред. Р. Виллардсона, Х. Гёринга. М.: Металлургия, 1967. 728 с.
3. Курс физической химии/Герасимов Ф. И., Древинг В. П., Еремин Е. Н. и др. М.: Химия, 1969. Т. 1. 592 с.
4. *Самарский А. А.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1977. 656 с.
5. *Рубинштейн Л. И.* Проблема Стефана. Рига: Звайгзне, 1967. 457 с.
6. *Авдонин Н. А.* Математическое описание процессов кристаллизации. Рига: Зинатне, 1980. 178 с.
7. *Бакирова О. И.* Метод решения термодиффузионной задачи: Препр. ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР № 163. М., 1982. 28 с.

УДК 519.6 : 539.379.4

ПОСТАНОВКА И ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ТЕРМОУПРУГОПЛАСТИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ С УЧЕТОМ ДВИЖЕНИЯ ДИСЛОКАЦИЙ В ПЛОСКОСТЯХ СКОЛЬЖЕНИЯ КРИСТАЛЛОВ, ВЫРАЩИВАЕМЫХ ИЗ РАСПЛАВА

Н. А. Авдонин, С. С. Вахрамеев, В. Б. Освенский

При выращивании монокристаллов из высокотемпературных расплавов ввиду неоднородного распределения температуры в кристалле возникают термические напряжения, которые являются основной причиной образования и размножения дислокаций. Плотность дислокаций и их распределение в кристалле являются одной из основных характеристик качества получаемых монокристаллов. Для прогнозирования плотности дислокаций в зависимости от условий выращивания монокристаллов необходимо решить задачу упругопластического деформирования с учетом особенностей движения и размножения дислокаций в кристаллах.

В настоящей работе дается замкнутая постановка упругопластической задачи при условии малых деформаций, характерных для монокристаллов. Вначале приводится постановка задачи в общем случае с использованием полуэмпирических соотношений Орована [1] и Гилмана [2] для скорости движения и размножения дислокаций в плоскостях скольжения. Далее приводится метод решения задачи для конкретного случая выращивания кристалла цилиндрической формы в осесимметричном температурном поле. Задача предварительно сводится к двумерной путем осреднения тензора пластической деформации. Приводятся результаты расчетов и их анализ на конкретных примерах.

1. Постановка упругопластической задачи для монокристаллов

В процессе выращивания из расплава возникают существенные температурные градиенты, которые вызывают в кристаллах термические напряжения. Действующие в кристаллографических плоскостях сдвиговые напряжения обусловливают движение и размножение дислокаций, среднюю плотность которых можно интерпретировать как объемную пластическую деформацию в кристалле.

Для записи уравнений упругопластического равновесия в объеме воспользуемся наряду с тензорами напряжений σ_{ij} и деформаций ε_{ij} девиаторами напряжений S_{ij} и деформаций e_{ij}, которые определяются следующим образом [3]:

$$S_{ij} = \sigma_{ij} - \sigma\delta_{ij}, \quad e_{ij} = \varepsilon_{ij} - \varepsilon\delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2, 3, \tag{1}$$

где δ_{ij} — символ Кронекера;

$$\sigma = {}^1/_3\sigma_{ii}, \quad \varepsilon = {}^1/_3\varepsilon_{ii} \tag{2}$$

— среднее нормальное напряжение и объемное расширение соответственно. Здесь принята индексная система обозначений в декартовой системе координат x_i $(i=1, 2, 3)$.

При малых упругопластических деформациях девиатор общей деформации можно представить в виде суммы двух слагаемых

$$e_{ij} = e^{\text{у}}_{ij} + e^{\text{п}}_{ij}. \tag{3}$$

Девиатор упругой деформации $e^{\text{у}}_{ij}$, как известно, связан с напряжениями законом Гука [3] и с учетом теплового расширения αT выражается в виде следующих двух соотношений:

$$S_{ij} = 2Ge^{\text{у}}_{ij}, \quad \sigma = 2G\frac{1+\mu}{1-2\mu}(\varepsilon^{\text{у}} - \alpha T), \tag{4}$$

здесь μ, α — коэффициенты Пуассона и термического расширения; G — модуль сдвига; T — температура кристалла.

Выражая из (3) упругую часть девиатора деформаций $e^{\text{у}}_{ij}$ и переходя снова к тензорам напряжений и деформаций согласно (1), (2), запишем уравнение состояния (4)

$$\sigma_{ij} = 2G\left[\varepsilon_{ij} - \varepsilon^{\text{п}}_{ij} + \frac{3\mu}{1-2\mu}\varepsilon\delta_{ij} - \frac{1+\mu}{1-2\mu}\alpha T\delta_{ij}\right]. \tag{5}$$

Задачу будем рассматривать в случае установившегося температурного поля в постановке несвязной квазистатической задачи термоупругости [3]. В этом случае выполняются уравнения равновесия в напряжениях:

$$\partial\sigma_{ij}/\partial x_j = 0. \tag{6}$$

Подставив в (6) значения σ_{ij} из (5) с учетом соотношений

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right),$$

получим систему уравнений упругопластического равновесия в перемещениях u_i:

$$\Delta u_i + \frac{3}{1+2\mu}\frac{\partial\varepsilon}{\partial x_i} = 2\frac{1+\mu}{1-2\mu}\alpha\frac{\partial T}{\partial x_i} + 2\frac{\partial}{\partial x_j}\varepsilon^{\text{п}}_{ij}. \tag{7}$$

На границе кристалла зададим условия свободной поверхности

$$\sigma_{ij}n_j = 0, \tag{8}$$

где n_j — направляющие косинусы внешней нормали к поверхности.

В перемещениях условия (8) принимают вид (см. выражение (5)):

$$\left[\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) + \left(\frac{\mu}{1-2\mu}\frac{\partial u_i}{\partial x_i} - \frac{1+\mu}{1-2\mu}\alpha T\right)\delta_{ij} - \varepsilon^{\text{п}}_{ij}\right]n_j = 0. \tag{9}$$

Уравнения (7) и условия (9) полностью определяют компоненты смещений u_i, если определить температурное поле и тензор пластической деформации $\varepsilon^{\text{п}}_{ij}$. В несвязной постановке температурное поле T определяется независимо. Постановка и метод решения тепловой задачи приводятся в разд. 3.

Пластическая деформация $\varepsilon^{\text{п}}_{ij}$ определяется с учетом механизма движения и размножения дислокаций по системам скольжения в поле сдвиговых напряжений следующим образом. Примем, что монокристалл имеет M систем скольжения согласно кристаллографическому строению, каждая из которых определяется плоскостью скольжения n ($n=1, 2, \ldots, n_0$) и направлением скольжения m в данной плоскости ($m=1, 2, \ldots, m_0$). Каждую из M систем обозначим парой чисел (n, m), причем $n_0 m_0 = M$. Для определения скорости пластической деформации $\dot{\varepsilon}^{\text{п}}$ в (n, m)-й системе скольжения используем соотношение Орована [1]

$$(\dot{\varepsilon}^{\text{п}})^{n,m} = bN_{\text{д}}^{n,m}V^{n,m}. \tag{10}$$

Здесь $N_{\text{д}}^{n,m}$ — плотность дислокаций на 1 см^2; $V^{n,m}$ — средняя скорость движения дислокаций в данной системе скольжения; b — величина вектора Бюргерса [4].

Средняя скорость движения дислокаций определяется с помощью полуэмпирической зависимости [5]

$$V^{n,m} = V_0\left(\frac{\tau^{n,m}_{\text{эф}}}{\tau_0}\right)^q \exp\left(-\frac{U}{kT}\right), \tag{11}$$

где V_0 — скорость скольжения дислокаций при внешней нагрузке τ_0; U — энергия активации; k — константа Больцмана. Величина $\tau^{n,m}_{\text{эф}}$ определяется с учетом упрочнения кристалла

$$\tau^{n,m}_{\text{эф}} = \begin{cases} |\tau^{n,m}| - G(\varepsilon^{\text{п}})^{n,m}, & \tau^{n,m}_{\text{эф}} \geqslant \tau_{\text{кр}}, \\ 0, & \tau^{n,m}_{\text{эф}} < \tau_{\text{кр}}. \end{cases} \tag{12}$$

Значения V_0, τ_0, $\tau_{\text{кр}}$ определяются экспериментально. Сдвиговое

напряжение $\tau^{n,m}$, действующее в данной системе скольжения, можно определить по тензору напряжений σ_{ij} при помощи общей формулы преобразования тензоров

$$\tau^{n,m} = \alpha_{1i}^{n,m} \alpha_{3j}^{n} \sigma_{ij}, \tag{13}$$

где $\alpha_{1i} = \cos(x_1', x_i)$; $\alpha_{3i} = \cos(x_3', x_i)$; x_i — исходная система координат; x_1', x_3' — новая система координат, связанная с n-й плоскостью скольжения таким образом, что ось x_3' направлена по нормали к n-й плоскости, а x_1' — в направлении скольжения в данной плоскости. Для определения плотности дислокаций используем соотношение Гилмана [2]

$$\dot{N}_{д}^{n,m} = \beta N_{д}^{n,m} V^{n,m}, \qquad N_{д}^{n,m} = N_0, \quad t = 0; \tag{14}$$

здесь β — коэффициент, определяющий интенсивность размножения дислокаций; N_0 — начальная плотность дислокаций.

По найденной из соотношений (10)—(14) пластической деформации $(\varepsilon^{п})^{n,m}$ в (n, m)-й системе скольжения можно восстановить весь тензор пластической деформации $(\varepsilon_{ij}^{п})^{n,m}$ в исходной системе координат. В уравнениях (7)—(9) используется тензор суммарной пластической деформации $\varepsilon_{ij}^{п}$ по всем системам скольжения

$$\varepsilon_{ij}^{п} = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{n_0} \sum_{m=1}^{m_0} (\varepsilon^{п})^{n,m} (\alpha_{1i}^{n,m} \alpha_{3j}^{n} + \alpha_{1j}^{n,m} \alpha_{3i}^{n}). \tag{15}$$

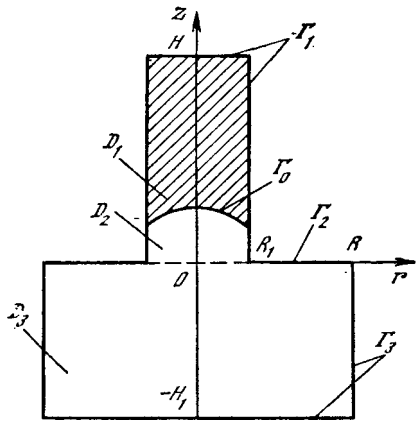
Аналогично определяется суммарная плотность дислокаций $N_д$ по всем системам скольжения

$$N_д = \sum_{n=1}^{n_0} N_д^n = \sum_{n=1}^{n_0} \sum_{m=1}^{m_0} N_д^{n,m}. \tag{16}$$

Таким образом, полностью сформулирована задача определения поля напряжений и плотности дислокаций при заданном температурном поле $T(x)$. Уравнения (7) с условиями (9) и соотношениями (15), (16) составляют нелинейную задачу для определения напряжений, деформаций и плотности дислокаций.

2. Упругопластическая задача в осесимметрическом случае. Двумерное приближение

Рассмотрим задачу упругопластического деформирования для цилиндрического кристалла с кубической решеткой, выращиваемого из расплава в направлении [111] по методу Чохральского в случае осесимметричного температурного поля (рис. 1). В силу анизотропии пластической деформации упругопластическая задача и в этом случае является трехмерной. Задача сводится к двумерной осесимметричной осреднением по φ компонент тензора пластической деформации.



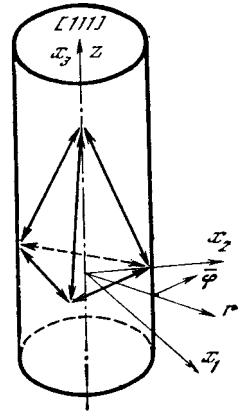


Рис. 1. Схема выращивания кристалла из расплава

D_1 — кристалл; D_2 — жидкий столбик; D_3 — расплав; Γ_0 — граница раздела фаз, Γ_1 — поверхность кристалла; Γ_2 — свободная поверхность расплава; Γ_3 — стенки тигля

Рис. 2. Ориентация плоскостей скольжения кристалла при выращивании из расплава в направлении [111] (x_1, x_2, x_3 — декартова, а r, φ, z — цилиндрическая системы координат)

Определим тензор пластической деформации в нашем случае. Для кубических кристаллов (арсенид галлия, германий) относительная ориентация четырех плоскостей скольжения ($n=1, 2, 3, 4$) совпадает с гранями правильного тетраэдра, а три возможных направления скольжения ($m=1, 2, 3$) в каждой плоскости — с ребрами треугольных граней (рис. 2). Таким образом, в кристалле имеется 12 систем скольжения. Для расчета сдвиговых напряжений $\tau^{n,m}$ предварительно преобразуем тензор σ_{kl} в исходной цилиндрической системе координат (оси r, φ, z обозначим индексами 1, 2, 3 соответственно) в тензор σ_{ij} в декартовой системе

$$\sigma^1_{i,j} = \alpha_{ik}\alpha_{jl}\sigma_{kl},$$

причем матрица переходных коэффициентов имеет вид (см. рис. 2):

$$\begin{Vmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{Vmatrix} = \begin{Vmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Vmatrix}.$$

Сдвиговые напряжения определяются согласно (13) через σ^1_{ij}:

$$\tau^{n,m} = \alpha^{n,m}_{1i}\alpha^n_{3j}\sigma^1_{ij},$$

а значения коэффициентов $\alpha^{n,m}_{1i}$, α^n_{3i} легко вычислить, исходя из рис. 2 (см. таблицу).

Вычислив пластическую деформацию $(\varepsilon^n)^{n,m}$ в соответствующей системе скольжения (см. разд. 1), определим компоненты тензора

Значения коэффициентов $\alpha_{1i}^{n,m}$ и α_{3i}^{n} ($i = 1, 2, 3$)

n	α_{3i}^{n}			$\alpha_{1i}^{n,1}$		
	1	2	3	1	2	3
1	0	0	-1	0	1	0
2	0	$-\frac{2\sqrt{2}}{3}$	$\frac{1}{3}$	1	0	0
3	$-\sqrt{\frac{2}{3}}$	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	0
4	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	$\frac{\sqrt{2}}{3}$	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	0

n	$\alpha_{1i}^{n,2}$			$\alpha_{1i}^{n,3}$		
	1	2	3	1	2	3
1	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0
2	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2\sqrt{3}}$	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2\sqrt{3}}$	$-\sqrt{\frac{2}{3}}$
3	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2\sqrt{3}}$	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	0	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	$-\sqrt{\frac{2}{3}}$
4	0	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2\sqrt{3}}$	$-\sqrt{\frac{2}{3}}$

пластической деформации $(\varepsilon_{ij}^{\text{п}})_1^{n,m}$ в декартовой системе координат по формулам обратного преобразования:

$$(\varepsilon_{ij}^{\text{п}})_1^{n,m} = \frac{1}{2}(\varepsilon^{\text{п}})^{n,m}(\alpha_{1i}^{n,m}\alpha_{3j}^{n} + \alpha_{1j}^{n,m}\alpha_{3i}^{n}).$$

Остается перейти в исходную цилиндрическую систему координат:

$$(\varepsilon_{kl}^{\text{п}})^{n,m} = \alpha_{ik}\alpha_{jl}(\varepsilon_{ij}^{\text{п}})_1^{n,m}. \tag{17}$$

Заметим, что компоненты тензора пластической деформации зависят от угла φ. Осреднив предварительно тензор пластической деформации в выражениях (17), запишем тензор суммарной пластической деформации по всем системам скольжения

$$\varepsilon_{kl}^{\text{п}} = \frac{1}{2\pi}\sum_{n=1}^{4}\sum_{m=1}^{3}\int_0^{2\pi}(\varepsilon_{kl}^{\text{п}})^{n,m}d\varphi. \tag{18}$$

Если использовать осредненный тензор (18), то упругопластиче-

ская задача становится двумерной осесимметрической. Уравнения равновесия в напряжениях в цилиндрической системе координат для осесимметрического случая, как известно [3], записываются так.

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\sigma_{11})+\frac{\partial\sigma_{13}}{\partial z}-\frac{\sigma_{22}}{r}=0,\qquad \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\sigma_{13})+\frac{\partial\sigma_{33}}{\partial z}=0,$$

а уравнения состояния (5) принимают вид

$$\begin{aligned}
\sigma_{11}&=Ga\left[\varepsilon_{11}+k(\varepsilon_{22}+\varepsilon_{33})-cT-\frac{2}{a}\varepsilon_{11}^{\text{п}}\right],\\
\sigma_{22}&=Ga\left[\varepsilon_{22}+k(\varepsilon_{11}+\varepsilon_{33})-cT-\frac{2}{a}\varepsilon_{22}^{\text{п}}\right],\\
\sigma_{33}&=Ga\left[\varepsilon_{33}+k(\varepsilon_{11}+\varepsilon_{22})-cT-\frac{2}{a}\varepsilon_{33}^{\text{п}}\right],\qquad \sigma_{13}=2G\,[\varepsilon_{13}-\varepsilon_{13}^{\text{п}}].
\end{aligned}\tag{19}$$

Учитывая связь деформаций и перемещений

$$\varepsilon_{11}=\frac{\partial u}{\partial r},\qquad \varepsilon_{22}=\frac{u}{r},\qquad \varepsilon_{33}=\frac{\partial w}{\partial z},\qquad \varepsilon_{13}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial z}+\frac{\partial w}{\partial r}\right),$$

получим систему уравнений упругопластического равновесия в осесимметричном случае:

$$\begin{aligned}
&a\frac{\partial}{\partial r}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(ru)+\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}+b\frac{\partial^2 w}{\partial r\partial z}=d\frac{\partial T}{\partial r}+\\
&\qquad+2\left[\frac{\partial\varepsilon_{11}^{\text{п}}}{\partial r}+\frac{\varepsilon_{11}^{\text{п}}-\varepsilon_{22}^{\text{п}}}{r}+\frac{\partial\varepsilon_{13}^{\text{п}}}{\partial z}\right],
\end{aligned}\tag{20}$$

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial w}{\partial r}\right)+a\frac{\partial^2 w}{\partial z^2}+b\frac{\partial}{\partial z}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(ru)=\\
&\qquad=d\frac{\partial T}{\partial z}+2\left[\frac{\partial\varepsilon_{13}^{\text{п}}}{\partial r}+\frac{\partial\varepsilon_{33}^{\text{п}}}{\partial z}+\frac{\varepsilon_{13}^{\text{п}}}{r}\right],
\end{aligned}\tag{21}$$

где $a=(1-\mu)/1-2\mu$, $b=1/(1-2\mu)$, $d=2(1+\mu)\alpha/(1-2\mu)$, $k=\mu/(1-\mu)$, $c=(1+\mu)\alpha/(1-\mu)$. Граничные условия согласно (8) принимают вид: на поверхности кристалла ($r=R$)

$$\sigma_{11}=0,\qquad \sigma_{13}=0;\tag{22}$$

на торцах ($z=0, L$)

$$\sigma_{33}=0,\qquad \sigma_{13}=0;\tag{23}$$

на оси ($r=0$) в силу условий симметрии

$$U=0,\qquad \partial w/\partial r=0.\tag{24}$$

Следует отметить, что задача рассматривается в квазистационарном случае, когда температурное поле установилось. В этом случае в формулах для расчета пластической деформации $(\varepsilon^{\text{п}})^{n,m}$ и плотности дислокаций $N_{\text{д}}^{n,m}$ следует предварительно перейти к

координатам $z=x+v_0t$ (x — координата, связанная с движущимся кристаллом; t — время; v_0 — скорость движения кристалла). В квазистационарном случае формулы (10), (14) принимают вид

$$(\dot{\varepsilon}^{\text{п}})^{n,m}=v_0\frac{\partial}{\partial z}(\varepsilon^{\text{п}})^{n,m},\quad \dot{N}_{\text{д}}^{n,m}=v_0\frac{\partial}{\partial z}N_{\text{д}}^{n,m}.$$

Тогда $(\varepsilon^{\text{п}})^{n,m}$ и $N_{\text{д}}^{n,m}$ рассчитываются по формулам

$$(\varepsilon^{\text{п}})^{n,m}=\frac{1}{v_0}\int\limits_0^z(\dot{\varepsilon}^{\text{п}})^{n,m}ds,\quad N_{\text{д}}^{n,m}=\frac{1}{v_0}\int\limits_0^z\dot{N}_{\text{п}}^{n,m}ds.$$

В следующем разделе приводится алгоритм численного решения поставленной задачи.

3. Алгоритм численного решения задачи

Система уравнений упругопластического равновесия (20), (21) с граничными условиями (22)—(24) является нелинейной задачей для определения перемещений, напряжений, упругопластических деформаций и плотности дислокаций по системам скольжения при заданном температурном поле $T(r, z)$ в кристалле. Эта задача решается численно на основе метода последовательных упругих решений [6]. При этом решение исходной нелинейной задачи сводится к решению последовательности линейных задач, каждая из которых может рассматриваться как задача теории термоупругости. Опишем коротко схему численного решения.

В исходной области $D=[0\leqslant r\leqslant R, 0\leqslant z\leqslant L]$, занятой кристаллом, вводится разностная сетка

$$D^h=[r_i=ih_1,\ i=0, 1, \ldots, N;\qquad z_j=jh_2,\ j=0, 1, \ldots, M]$$

с шагами по пространству $h_1=R/N$, $h_2=L/M$. Для задачи термоупругости строится консервативная разностная схема на основе интегроинтерполяционного метода Самарского [7]. Построение разностной схемы подробно изложено в работе [8]. Вводя индекс n для обозначения решения задачи в n-м последовательном приближении, запишем разностную аппроксимацию уравнений (20), (21), граничных условий (22)—(24) и соотношений (19) для напряжений

$$a\left(\frac{1}{r}(ru^n)_{\bar{r}}\right)_r+u^n_{\bar{z}z}+b\omega^n_{\underset{rz}{00}}=dT_{\underset{r}{0}}+$$
$$+2\left[\frac{1}{r}(r\varepsilon^{\text{п},n-1}_{11})_r+(\varepsilon^{\text{п},n-1}_{13})_z-\frac{1}{r}\varepsilon^{\text{п},n-1}_{22}\right],\tag{25}$$

$$\frac{1}{r}(r\omega^n_{\bar{r}})_r+a\omega^n_{\bar{z}z}+b\left(\frac{1}{r}(ru^n)_{\bar{r}}\right)_{\underset{z}{0}}=dT_{\underset{z}{0}}+2\left[\frac{1}{r}(r\varepsilon^{\text{п},n-1}_{13})_r+(\varepsilon^{\text{п},n-1}_{33})_z\right].\tag{26}$$

Здесь u^n, w^n — сеточные функции в узлах (i, j) (индексы i, j опущены).

Условия (22), (23) аппроксимируются следующим образом:

$$(\sigma_{11}^n)_{N-1/2,j}=0, \qquad (\sigma_{13}^n)_{N-1/2,j}=0;$$
$$(\sigma_{33}^n)_{i,M-1/2}=0, \qquad (\sigma_{13}^n)_{i,M-1/2}=0,$$
$$(\sigma_{33}^n)_{i,0-1/2}=0, \qquad (\sigma_{13}^n)_{i,0-1/2}=0,$$

причем аппроксимация напряжений σ_{lk}^n имеет вид

$$\begin{aligned}
(\sigma_{11}^n)_{i+1/2,j} &= Ga\left\{u_{r,i}^n+\frac{k}{2}\left[\frac{u_{i+1}^n}{r_{i+1}}+\frac{u_i^n}{r_i}+(w_{i+1}^n+w_i^n)_{\bar{z}}\right]-\right.\\
&\left.-\frac{c}{2}[T_{i+1}+T_i]-\frac{2}{a}(\varepsilon_{11}^{\text{п}})_{i+1/2}^{n-1}\right\}_j,\\
(\sigma_{22}^n)_{i+1/2,j} &= Ga\left\{\frac{1}{2}\left[\frac{u_{i+1}^n}{r_{i+1}}+\frac{u_i^n}{r_i}\right]+\frac{k}{2}\left[2u_{r,i}^n+(w_{i+1}^n+w_i^n)_{\bar{z}}\right]-\right.\\
&\left.-\frac{c}{2}[T_{i+1}+T_i]-\frac{2}{a}(\varepsilon_{22}^{\text{п}})_{i+1/2}^{n-1}\right\}_j,\\
(\sigma_{33}^n)_{i,j+1/2} &= Ga\left\{w_{z,j}^n+\frac{k}{2}\left[\frac{u_{j+1}^n+u_j^n}{r}+(u_{j+1}^n+u_j^n)_{\bar{r}}\right]-\right.\\
&\left.-\frac{c}{2}[T_{j+1}+T_j]-\frac{2}{a}(\varepsilon_{33}^{\text{п}})_{j+1/2}^{n-1}\right\}_i,\\
(\sigma_{13}^n)_{i,j+1/2} &= G\left[u_{z,j}^n+\frac{1}{2}(w_{j+1}^n+w_j^n)_{\bar{r}}-2(\varepsilon_{13}^{\text{п}})_{j+1/2}^{n-1}\right]_i
\end{aligned} \tag{27}$$

для точек $i=0, 1, \ldots, N-1$; $j=0, 1, \ldots, M-1$ области D^h.

Для решения разностных уравнений (25), (26) используется метод переменных направлений. Запишем итерационную схему расщепления в матричном виде (k — номер итерации)

$$\begin{aligned}
\mathbf{V}^{n,k+1/2}-\mathbf{V}^{n,k} &= \frac{\tau}{2}(A_2\mathbf{V}^{n,k+1/2}+A_1\mathbf{V}^{n,k}-F^{n-1}),\\
\mathbf{V}^{n,k+1}-\mathbf{V}^{n,k+1/2} &= \frac{\tau}{2}(A_2\mathbf{V}^{n,k+1/2}+A_1\mathbf{V}^{n,k+1}-F^{n-1}).
\end{aligned} \tag{28}$$

Здесь введены следующие обозначения согласно уравнениям (25), (26):

$$\mathbf{V}^n=\begin{Vmatrix} u^n \\ w^n \end{Vmatrix}, \qquad F^n=\begin{Vmatrix} dT_{\bar{r}}+2\left[\frac{1}{r}(r\varepsilon_{11}^{\text{п},n})_r+(\varepsilon_{13}^{\text{п},n})_z-\frac{1}{r}\varepsilon_{22}^{\text{п},n}\right] \\ dT_{\bar{z}}+2\left[\frac{1}{r}(r\varepsilon_{13}^{\text{п},n})_r+(\varepsilon_{33}^{\text{п},n})_z\right] \end{Vmatrix},$$

$$\mathbf{A}_1\mathbf{V}^n=\begin{Vmatrix} a\left(\frac{1}{r}(ru^n)_{\bar{r}}\right)_r & b\omega_{00\,rz}^n \\ 0 & a\omega_{zz}^n \end{Vmatrix}, \qquad \mathbf{A}_2\mathbf{V}^n=\begin{Vmatrix} u_{zz}^n & 0 \\ b\left(\frac{1}{r}(ru^n)_{\bar{r}}\right)_{\bar{z}} & \frac{1}{r}(rw_{\bar{r}})_r \end{Vmatrix}.$$

Схема (28) имеет полную аппроксимацию. В работе [8] показана самосопряженность и положительная определенность разностных операторов $-\mathbf{A}_1$, $-\mathbf{A}_2$ при $\mu<0{,}25$, из чего следует устойчивость схемы (28).

Расчеты ведутся в следующей последовательности: полагая в начальном приближении компоненты тензора пластической деформации равными нулю $(\varepsilon_{kl}^{\text{п}})^0 \equiv 0$, находим F^0, далее определяем первое приближение $\mathbf{V}^1$ по схеме (28), а также σ^1_{kl} по формулам (27). По найденным значениям напряжений вычисляется тензор пластической деформации $(\varepsilon_{kl}{}^{\text{п}})^1$ согласно (18). Второе приближение задачи находится аналогично.

4. Постановка и решение задачи теплообмена

Задача определения температурного поля решается в следующей постановке.

Уравнения теплового баланса в расплаве и кристалле с учетом выделения скрытой теплоты кристаллизации записываются в обобщенной постановке [9] в неподвижной системе координат (r, z) (см. рис. 1):

$$C\frac{\partial T}{\partial t}=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\lambda r\frac{\partial T}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial z}\right)-Cv_0\frac{\partial T}{\partial z}+\gamma\left(\frac{\partial \eta}{\partial t}+v_0\frac{\partial \eta}{\partial z}\right),$$

$$0<r<R,\ 0<z<H; \tag{29}$$

$$C\frac{\partial T}{\partial t}=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\lambda r\frac{\partial T}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial z}\right),\ 0<r<R,\ -H<z<0. \tag{30}$$

Здесь C — объемная теплоемкость; $\lambda(T)$ — коэффициент теплопроводности; γ — объемная скрытая теплота фазового перехода; v_0 — скорость движения кристалла. Доля твердой фазы вычисляется по формуле

$$\eta(T)=\begin{cases}0, & T>T_{\text{пл}},\\ 1, & T<T_{\text{пл}},\end{cases} \tag{31}$$

где $T_{\text{пл}}$ — температура плавления. Задача решается при следующих граничных условиях. На боковой поверхности и торце кристалла (граница Γ_1), а также на свободной поверхности расплава (граница Γ_2) приняты условия излучения по закону Стефана—Больцмана:

$$\lambda\partial T/\partial n=\varepsilon\sigma(T^4-T_1^4),\qquad (r, z)\in\Gamma_1, \Gamma_2. \tag{32}$$

На стенках тигля (Γ_3) задается температура

$$T=T_0,\qquad (r, z)\in\Gamma_2. \tag{33}$$

Здесь T_1 — температура внешней среды, которая считается известной. Предусмотрен вариант, когда задача решается только в области D_1, D_2. В этом случае под кристаллом на линии уровня рас-

плава задается температура перегрева

$$T=T_{\text{пер}}, \quad z=0, \quad 0<r<R_1. \tag{34}$$

В указанной постановке не учитывается конвективный перенос тепла в расплаве, так как это почти не влияет на температурное поле в кристалле.

Нелинейные члены в уравнении (29) аппроксимируются следующим образом [9]:

$$\partial\eta/\partial t=\beta\Delta T\Theta(\bar{\eta})\Theta(1-\bar{\eta}), \tag{35}$$

$$\Theta(x)=\begin{cases}0, & x\leqslant 0,\\ 1, & x>0,\end{cases}$$

$$\bar{\eta}=\beta\int_0^t \Delta T d\tau, \quad \Delta T=T_{\text{пл}}-T. \tag{36}$$

При $\beta\to\infty$ решение приближенной задачи стремится к решению исходной задачи (29)—(34) (см. [9]). Задача (29)—(36) аппроксимируется консервативной разностной схемой и решается итерационным методом переменных направлений аналогично решению упругопластической задачи (см. разд. 3). Отметим, что положение и форма границы раздела фаз (Γ_0) находятся из решения поставленной задачи. При решении упругопластической задачи граница раздела фаз считается плоской.

5. Анализ результатов расчетов

Для решения поставленной выше комплексной задачи разработан пакет программ, состоящий из отдельных модулей: модуля решения задачи теплообмена и задачи упругости, модуля расчета тензора пластической деформации и расчета плотности дислокаций. Для решения задачи термоупругости при сетке 20×50 узлов требовалось 100—150 итераций. Сходимость метода последовательных упругих решений проверялась численным экспериментом. При малых пластических деформациях (порядка 0,02%) наблюдалась хорошая сходимость. Для сходимости требовалось 5—6 приближений, при этом максимальное отличие 5-й и 6-й итераций в напряжениях не превосходило 2% от среднего значения, а плотность дислокаций отличалась не более чем на 3%. Расчеты тепловой и упругопластической задач проводились на совмещенных сетках, так как интерполяция температурного поля в данном случае приводит к значительной нежелательной погрешности при дальнейшем численном дифференцировании температурного поля.

Приведем результаты расчетов по изложенной выше методике для кристаллов арсенида галлия, выращиваемых из расплава в направлении [111] методом Чохральского. Для таких кристаллов плоскости скольжения составляют правильный тетраэдр, как показано на рис. 2.

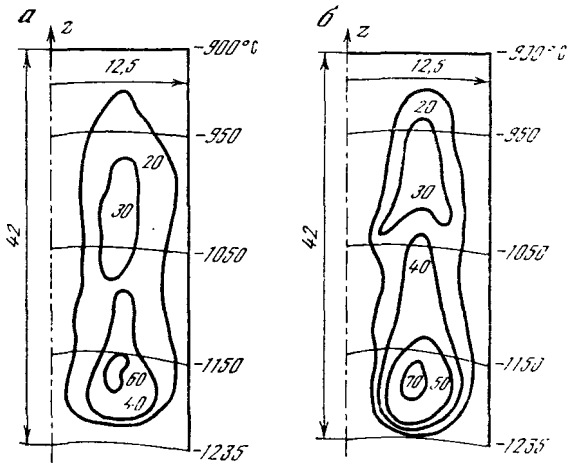


Рис. 3. Распределение температур и сдвиговых напряжений $\tau^1 \cdot 10^2$, Н/мм² по длине кристалла (угол $\varphi=0$) при решении упругопластической (*а*) и упругой (*б*) задач

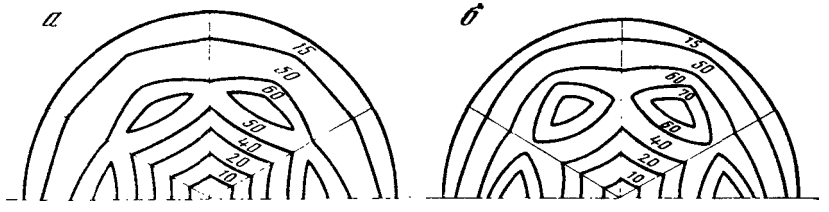


Рис. 4. Зависимость напряжений τ^1 от угла φ по сечению ($z={}^2/_3R$) кристалла при решении упругопластической (*а*) и упругой (*б*) задач

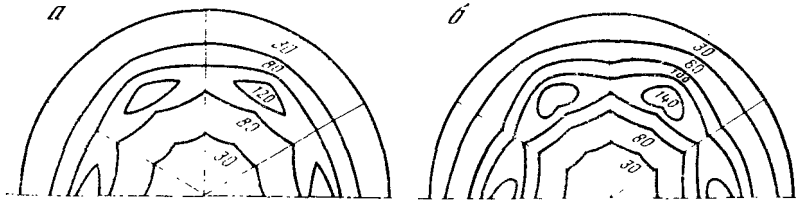


Рис. 5. Распределение суммарной плотности дислокаций по углу φ в сечении ($z={}^2/_3R$) кристалла при решении упругопластической (*а*) и упругой (*б*) задач

Целью расчетов является определение напряжений в кристалле, степени их релаксации, анализ дислокационной структуры кристалла по плоскостям скольжения.

Расчеты проводились при следующих значениях входных данных:

$G=0{,}34\cdot10^5$ Н/мм^2, $\mu={}^1/_3$, $T_{пл}=1238°$ С,

$v_0=0{,}5$ мм/мин, $V_0=10^5$ мм/с, $\tau_0=10$ Н/мм^2,

$b=4\cdot10^{-7}$ мм, $\alpha=0{,}64\cdot10^{-5}(°C)^{-1}$, $N_0=1$ мм$^{-2}$, $\beta=4$,

$\tau_{кр}=0{,}12\exp(6\cdot10^3/T)$.

На рис. 3 приведены изолинии среднего скалывающего напряжения в плоскости (111) по длине кристалла при значении угла $\varphi=0$

$$\tau^1=\frac{1}{3}\sum_{m=1}^{3}|\tau^{1,m}|.$$

Для определения степени релаксации напряжений за счет пластической деформации приводятся результаты расчетов упругопластической задачи (см. рис. 3, *а*) и задачи в упругом приближении (см. рис. 3, *б*). Наблюдается некоторое снижение максимальной величины напряжений τ^1 порядка 15—20%.

Для анализа распределения напряжений τ^1 и суммарной плотности дислокаций $N_д^1$ в плоскости скольжения (111) приводятся изолинии этих величин в характерном радиальном сечении кристалла при $z={}^2/_3R$ от фронта кристаллизации (рис. 4, 5). Как видно из этих рисунков, распределение напряжений и плотности дислокаций имеет симметрию относительно координатного угла φ, характерную для кристаллов арсенида галлия. Период по углу φ составляет $\pi/3$, что соответствует экспериментальным наблюдениям. Максимальные напряжения составляют 0,6—0,7 Н/мм^2, а максимальная плотность дислокаций — 120—150 мм$^{-2}$.

Результаты расчетов показывают необходимость учета релаксации напряжений, а также зависимости от координатного угла φ при расчетах плотности дислокаций в кристаллах.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Orowan E.* Problems of plastic gliding.— Proc. Phys. Soc., 1940, vol. 52, N 1, p. 8—22.
2. *Гилман Д.* Динамика дислокаций и поведение материалов при ударном воздействии.— В кн.: Механика. М.: Мир, 1970, № 2, с. 96—124.
3. *Боли Б., Уэйнер Дж.* Теория температурных напряжений. М.: Мир, 1964. 517 с.
4. *Келли А., Гровс Г.* Кристаллография и дефекты в кристаллах. М.: Мир, 1974. 496 с.
5. *Вахрамеев С. С., Шифрин С. С.* Расчет термических напряжений и плотности дислокаций в кристаллах, выращиваемых из расплава.— В кн.: Прикладные задачи теоретической и математической физики. Рига: Латв. ун-т им. П. Стучки, 1978, с. 87—96.

6. *Ильюшин А. А.* Пластичность. М.: Гостехтеориздат, 1948. 379 с.
7. *Самарский А. А.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1977. 656 с.
8. *Вахрамеев С. С.* Расчет термических напряжений, связанных с процессом выращивания монокристаллов из расплава.— В кн.: Численные методы механики сплошной среды. Новосибирск: ИТПМ СО АН СССР, 1977, т. 8, № 5, с. 23—35.
9. *Авдонин Н. А.* Математическое описание процессов кристаллизации. Рига: Зинатне, 1980. 178 с.

УДК 532.516.5+536.24

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ СОВМЕСТНОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРНОГО ПОЛЯ В СИСТЕМЕ РАСПЛАВ— КРИСТАЛЛ И ПОТОКОВ В РАСПЛАВЕ В ПРОЦЕССЕ ЧОХРАЛЬСКОГО

Г. Ф. Иванова, Е. Д. Люмкис, Б. Я. Мартузан, Э. Н. Мартузане, В. А. Смирнов

Для получения высококачественных монокристаллов, необходимых в различных отраслях современной науки и техники, применяются различные технологические процессы. Все они характеризуются большой сложностью и обилием параметров, точное определение которых для обеспечения оптимальности процесса встречается с большими экспериментальными трудностями. В полной мере это относится и к процессу выращивания монокристаллов методом Чохральского, рассматриваемым в настоящей статье.

Большие экспериментальные трудности исследования реальных промышленных процессов обусловили развитие методов экспериментального и математического моделирования для получения важной для практики информации о характеристиках физических процессов, имеющих место при выращивании монокристаллов методом Чохральского.

Проведению экспериментальных исследований на физических моделях процесса Чохральского посвящены работы В. С. Бердникова с соавторами [1, 2], в которых изучаются течения жидкости, вызываемые вращением кристалла, а также естественная конвекция в тигле. В последнее время серию подобных работ провели Т. Николов, К. Илиев и П. Пешев [3], в которых также на модельных жидкостях начато изучение течений, вызываемых вращением кристалла, тепловой конвекцией, а также их взаимодействием.

Математическое моделирование процесса Чохральского связано с разработкой численных методов решения сложных математических задач, в частности с созданием разностных схем для краевых задач системы уравнений Навье—Стокса, сохраняющих свойства решения исходной дифференциальной задачи, эффективных численных методов решения систем разностных уравнений и др. Сущест-

венные проблемы создает также и программная реализация разработанной математической модели, создание эффективных и удобных для пользователя пакетов программ. С другой стороны, нельзя считать окончательно решенным и вопрос о физическом содержании математической модели процесса Чохральского.

1. Анализ физических основ процесса Чохральского

Среди физических процессов, которые имеют важное значение при выращивании монокристаллов из расплава, можно выделить следующие: теплоперенос, гидродинамику расплава, перенос примеси, капиллярные явления, кинетику роста, упругопластические процессы, а также электромагнитные явления.

Все эти процессы, хотя и в разной степени, влияют на качество выращенного монокристалла, определяемое его кристаллографическим совершенством и однородностью состава.

Совершенно очевидно, что основным, определяющим все остальные физическим процессом при выращивании монокристаллов из расплава является теплоперенос. Создание температурного градиента в технологической зоне неразрывно связано с самой сущностью процесса, а наличие такого градиента вызывает все остальные физические явления. Трудности при математическом описании процесса теплопереноса вызываются многообразием способов теплопередачи, существующих в реальном процессе. Достаточно точно должен быть описан нагрев расплава в тигле, осуществляемый, как правило, резистивным или высокочастотным способом. В процессе выращивания монокристаллов перераспределение тепла осуществляется конвекцией в расплаве, молекулярной теплопроводностью, переизлучением между зеркалом расплава, растущим кристаллом и окружающими устройствами. Необходимо также учесть и выделение скрытой теплоты плавления на границе раздела фаз.

С другой стороны, важно выяснить влияние теплопереноса и неоднородного температурного распределения на другие физические процессы, перечисленные выше.

На гидродинамику расплава теплоперенос оказывает прямое и весьма существенное влияние, вызывая и поддерживая тепловую конвекцию. Прямое влияние теплопереноса на перераспределение примеси пренебрежимо мало, поскольку можно пренебречь явлением термодиффузии по сравнению с другими процессами перераспределения примеси. Зависимость коэффициента диффузии примеси в расплаве от температуры также вряд ли может оказать существенное влияние на процесс из-за сравнительно небольшого перепада температуры в расплаве.

Теплоперенос влияет на капиллярные явления вследствие зависимости коэффициента поверхностного натяжения от температуры. Наиболее существенным следствием этой зависимости является возникновение термокапиллярной конвекции, которая в ряде случаев может оказаться весьма важным фактором.

Механическое состояние растущего монокристалла очень сильно зависит от распределения температуры, которое вызывает температурные напряжения, влияющие на процессы развития дислокационной структуры.

Следует заметить, что процесс теплопереноса влияет и сам на себя в том смысле, что имеется зависимость коэффициента теплопроводности и других теплофизических параметров от температуры, учет которой может оказаться существенным в кристалле. Кроме того, в процессе теплопередачи имеются и другие нелинейности, например в теплообмене излучением.

Основные причины, влияющие на движение расплава, следующие: тепловая конвекция, термокапиллярная конвекция, принудительное движение расплава, вызванное вращением кристалла или тигля, а также электромагнитное воздействие на расплав. Поток расплава оказывает существенное влияние на распределение температуры в системе. На распределение примеси в расплаве конвективный перенос оказывает определяющее влияние из-за малости коэффициента диффузии.

Что касается обратного влияния неоднородности состава расплава на его течение, то в случае легирующей примеси в расплавах элементарных полупроводников оно мало из-за низкой концентрации примеси, однако может оказаться существенным для расплавов сложных соединений. Кроме того, градиент концентрации примеси может сильно повлиять на капиллярные свойства поверхности, вызывая концентрационно-капиллярную конвекцию, но точных экспериментальных результатов для практически важных случаев в настоящее время не имеется.

Сильно связаны между собой и влияют друг на друга процессы кинетики роста и диффузионного перераспределения примеси. От концентрации примеси зависит скорость роста кристаллов, величина переохлаждения на фазовой границе. Кинетика роста, в свою очередь, из-за явления сегрегации существенно влияет на концентрацию примеси вблизи фронта кристаллизации.

Для ряда случаев реализации метода Чохральского важное значение могут приобрести электромагнитные явления. Например, в случае нагрева токами высокой частоты, когда, кроме прямого подогрева, вызывается и перемешивание расплава, или в другом случае, когда налагается постоянное внешнее магнитное поле с целью уменьшения потока расплава.

Уже из приведенного выше неполного рассмотрения взаимосвязей различных физических явлений, имеющих место в процессе Чохральского, можно сделать вывод, что нет оснований считать полной модель, изучающую только одно явление или часть этих явлений.

Однако в настоящее время полную задачу трудно не только решить, но даже сформулировать, поэтому при разработке математических моделей внимание исследователей сосредоточивается в основном на изучении отдельных процессов.

Работы по математическому моделированию процесса Чохральского были начаты Т. Аризуми, Н. Кобаяши [4] и В. Ланглуа [5], которые провели первые опыты расчетов течения расплава в тигле. Кроме работ по исследованию динамики и теплообмена расплава, обзор которых сделал В. И. Полежаев [6], проводились также работы по математическому моделированию теплообмена в растущем кристалле (см., например, работу [7]). Серьезное внимание обращалось на термоупругое поведение растущего монокристалла [8] и распределение легирующей примеси в расплаве (см. обзор [6]), поскольку кристаллическое совершенство монокристалла, обусловленное термоупругими напряжениями, и однородность состава являются основными показателями качества выращенного кристалла. Эти две задачи в первом приближении можно решать, считая известным распределение температуры в кристалле и компонент скорости в расплаве. Однако определение температуры отдельно в кристалле и в тигле, как это обычно делается, влечет за собой довольно грубые допущения, устранение которых и является целью настоящей работы, рассматривающей теплообмен во всей системе кристалл—расплав.

2. Теплообмен в процессе Чохральского

Схематически изучаемая система изображена на рис. 1 и состоит из тигля, который в принятом приближении считается имеющим цилиндрическую боковую поверхность и плоское дно. Кристалл также считается цилиндрическим, кроме того, его верхняя поверхность принимается плоской. Кроме кристалла и тигля, в расчетной схеме содержатся также окружающие кристалл поверхности. Вся система обладает цилиндрической симметрией.

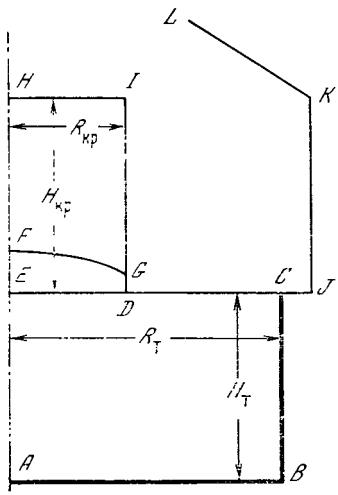


Рис. 1. Расчетная область

При исследовании теплопереноса в расплаве учитывается теплопередача теплопроводностью и конвективным переносом. Следует отметить, что область $ABCE$, где рассматривается конвективный теплоперенос и рассчитывается поток расплава, имеет плоскую верхнюю поверхность. Другими словами, в жидком столбике конвекцией пренебрегают.

Теплопередача в кристалле осуществляется механизмом теплопроводности и конвекцией, обусловленной передвижением кристалла при вытягивании. Также учитывается выделение скрытой теплоты плавления на границе раздела фаз GF.

Распределение температуры $T(z, r, t)$ в области $ABCDIH$, охватывающей расплав и кристалл, описывается урав-

нением теплопроводности

$$c\rho\left(\frac{\partial T}{\partial t}+u\frac{\partial T}{\partial z}+v\frac{\partial T}{\partial r}\right)=\frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda(T)\frac{\partial T}{\partial z}\right)+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\lambda(T)\,r\frac{\partial T}{\partial r}\right), \qquad (1)$$

где c — удельная теплоемкость; ρ — плотность; $\lambda(T)$ — коэффициент теплопроводности, v и u — радиальная и вертикальная компоненты скорости расплава. Функции v и u находятся из решения уравнений Навье—Стокса в области расплава $ABCE$; в области кристалла и жидкого столбика $EDIH$ функция v тождественно равна нулю, а $u\equiv v_0$, где v_0 — скорость вытягивания кристалла. Функция $\lambda(T)$ кусочно-постоянна и в твердой фазе равна константе $\lambda_{тв}$, а в жидкой — константе $\lambda_ж$.

На границе раздела фаз ставится условие Стефана

$$-L\rho v_0=(\lambda_{тв}\,\mathrm{grad}\,T|_{T_{пл}-0}-\lambda_ж\,\mathrm{grad}\,T|_{T_{пл}-0},\ \mathrm{grad}\,\Phi); \qquad (2)$$

здесь L — удельная скрытая теплота плавления; $\Phi(z,\ r,\ t)=0$ — уравнение границы; $T_{пл}$ — температура плавления.

На верхнем торце кристалла ставилось условие теплообмена по закону Стефана—Больцмана:

$$-\lambda_{тв}\partial T/\partial z=\varepsilon_1\sigma\,(T^4-T_0^4), \qquad (3)$$

где ε_1 — степень черноты кристалла; σ — постоянная Стефана—Больцмана; T_0 — средняя температура окружающей среды. Это краевое условие задаем при фиксированной координате $z=H_{кр}$, считая, что из-за малой скорости продвижения кристалла v_0 стационарное решение, полученное в расчетах, будет близко к распределению температуры для момента, когда кристалл имеет заданную высоту $H_{кр}$.

При задании краевого условия на внешней поверхности тигля ABC учитывается тепловое сопротивление стенки тигля, непосредственно контактирующей с графитовой оболочкой тигля, температура которой известна из эксперимента. В этом случае краевое условие на стенке тигля имеет вид

$$\lambda_ж\frac{\partial T}{\partial n}=\frac{\lambda^*}{H_0}(T_{гр}-T). \qquad (4)$$

Здесь λ^* — коэффициент теплопроводности тигля; H_0 — толщина стенки тигля; $T_{гр}$ — температура графитовой оболочки, меняющаяся от точки к точке. Если тепловым сопротивлением тигля пренебречь, краевое условие на внешней поверхности тигля имеет вид $T=T_{гр}$. Расчеты проводились как с одним, так и с другим краевым условием для оценки влияния теплового сопротивления стенки тигля.

Между боковой поверхностью DI, свободной поверхностью расплава DC и окружающими кристалл поверхностями CJ, JK, KL, образующими внутреннюю поверхность полости Σ, происходит теплообмен излучением. В расчетах поверхность Σ считается диффузно-серой, хотя экспериментальных данных об оптических свой-

ствах, например, поверхности расплава не имеется. Температура окружающих поверхностей CJ, JK, KL определяется из эксперимента и считается заданной. При расчете теплообмена излучением была использована методика, изложенная в [7].

После введения текущей координаты s на поверхности Σ может быть сформулировано интегральное уравнение, выражающее баланс потока излучения:

$$q(s) = \varepsilon(s)\sigma T^4(s) + (1 - \varepsilon(s)) \int_{\Sigma} q(x)\, dF_{ds-dx}, \tag{5}$$

где $q(s)$ — плотность эффективного выходящего потока излучения; $\varepsilon(s)$ — коэффициент черноты; dF_{ds-dx} — угловой коэффициент между элементарными площадками ds и dx поверхности Σ.

Плотность суммарного теплового потока $Q(s)$ связана с $q(s)$ соотношением

$$Q(s) = \frac{\varepsilon(s)}{1 - \varepsilon(s)} [\sigma T^4(s) - q(s)]. \tag{6}$$

Это уравнение и является краевым условием на поверхности кристалла и расплава.

Для численного исследования распределения температуры в областях кристалла и расплава использовался разностный метод.

В области $DEHI$ при расчете распределения тепла необходимо учесть условие Стефана. В данной работе для этого использовалась методика, изложенная в [9]. По этой методике первоначальная задача Стефана (1), (2) сводится к системе уравнений для температуры T и относительной доли твердой фазы η в элементарном объеме, поскольку считается, что имеется узкая двухфазная зона между расплавом и кристаллом.

Эта система уравнений имеет вид

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z}\right) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial r}\right) - c\rho v_0 \frac{\partial T}{\partial z} + L\rho\left(\frac{\partial \eta}{\partial t} + v_0 \frac{\partial \eta}{\partial z}\right),$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + v_0 \frac{\partial \eta}{\partial z} = V \Delta T \theta(I)\, \theta(1 - I), \tag{7}$$

где функции c, ρ, λ могут зависеть от T и η; $I = b \int_0^t \Delta T d\tau$; θ — функция Хэвисайда; ΔT — переохлаждение, равное разности температуры плавления и текущей температуры; b — параметр, при стремлении которого к бесконечности решение задачи (7) совпадает с решением задачи (1), (2).

При численном решении задачи (7) в области $DEHI$ для первого уравнения использовалась стандартная разностная аппроксимация. Для второго уравнения выписывалась неявная разностная схема. В практических расчетах разностная задача теплопроводности решалась сразу во всей области кристалл—расплав $ABCDIH$

методом переменных направлений. Схемы, применяемые в области расплава, описаны в разд. 4.

Для расчета теплообмена в полости применялся метод сальдо [10]. Поверхность Σ разбивалась на K осесимметричных колец. Разбиение на поверхности кристалла совпадало с узлами разностной сетки. Считая плотность q_k потока излучения на k-м кольце постоянной, условие (5) можно записать в виде

$$q_k = \varepsilon_k \sigma T_k^4 + (1 - \varepsilon_k) \sum_{j=1}^{K} q_j F_{kj}, \quad k = 1, 2, \ldots, K. \tag{8}$$

Формулы для угловых коэффициентов F_{kj} колец, имеющих форму усеченного конуса произвольного наклона, приведены в [7].

В случае, если температура T_k известна, уравнения (8) образуют систему линейных уравнений K-го порядка для определения q_k. Кроме того, ε_k любого кольца считается не зависящим от температуры, за исключением того случая, когда меняется фазовое состояние кольца. Поскольку передвижение фронта раздела фаз является довольно медленным процессом, то коэффициенты системы (8) слабо зависят от времени. Поэтому решение этой системы находилось умножением вектора правой части на обратную матрицу, которая рассчитывалась заново только в случае изменения фазового состояния какого-нибудь кольца. Значения температуры T_k, составляющие правые части системы (8), для кристалла и поверхности расплава считаются известными с предыдущего шага по времени, а на остальных поверхностях заданы из эксперимента и не меняются в процессе счета.

После определения q_k из формулы (6) находятся Q_k. Это дает возможность рассчитать температуру для следующего момента времени в кристалле и расплаве с краевым условием $-\lambda \partial T/\partial n = Q$ на поверхности.

3. Динамика расплава

Поле скоростей в расплаве описывается уравнениями Навье—Стокса для вязкой несжимаемой жидкости. Пусть введены характерные масштабы длины r_0, времени t_0, перепада температур ΔT_0. Безразмерные координаты z/r_0, r/r_0, t/t_0 и безразмерные компоненты вектора скорости $u/(r_0/t_0)$, $v/(r_0/t_0)$, $w/(r_0/t_0)$ в уравнениях гидродинамики будут обозначены теми же буквами, что и размерные величины. Введено также относительное отклонение температуры $\Theta = (T - T_{\text{пл}})/\Delta T_0$. Функция тока ψ и вихрь скорости ζ связаны с безразмерными компонентами скорости соотношениями

$$u = \frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r}, \qquad v = -\frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial z}, \qquad \zeta = \frac{\partial v}{\partial z} - \frac{\partial u}{\partial r}. \tag{9}$$

При численной реализации удобнее вместо w использовать момент вращения $W = rw$, поскольку для W справедлив принцип максимума и соответствующий разностный оператор должен быть мо-

нотонным. Аналогично вместо ζ удобнее использовать величину $\xi=\zeta/r$ и требовать монотонности разностного оператора, действующего на ξ. Система дифференциальных уравнений для введенных переменных имеет вид

$$\frac{\partial\xi}{\partial t}+u\frac{\partial\xi}{\partial z}+v\frac{\partial\xi}{\partial r}=\frac{1}{\mathrm{Re}}\left[\frac{\partial^2\xi}{\partial z^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\xi)\right)\right]+$$
$$+\frac{1}{r^4}\frac{\partial(W^2)}{\partial z}-\frac{\mathrm{Gr}}{\mathrm{Re}^2}\frac{1}{r}\frac{\partial\Theta}{\partial r}, \tag{10}$$

$$\frac{\partial W}{\partial t}+u\frac{\partial W}{\partial z}+v\frac{\partial W}{\partial r}=\frac{1}{\mathrm{Re}}\left[\frac{\partial^2 W}{\partial z^2}+r\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial W}{\partial r}\right)\right], \tag{11}$$

$$\frac{\partial\Theta}{\partial t}+u\frac{\partial\Theta}{\partial z}+v\frac{\partial\Theta}{\partial r}=\frac{1}{\mathrm{Re}\,\mathrm{Pr}}\left[\frac{\partial^2\Theta}{\partial z^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial\Theta}{\partial r}\right)\right], \tag{12}$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}+r\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)=-r^2\xi,\quad 0<z<\overline{H}_{\text{т}},\quad 0<r<\overline{R}_{\text{т}}, \tag{13}$$

где $\overline{H}_{\text{т}}=H_{\text{т}}/r_0$, $\overline{R}_{\text{т}}=R_{\text{т}}/r_0$ — безразмерные высота и радиус тигля. В систему уравнений (10)—(13) входят следующие безразмерные параметры, характеризующие задачу: число Рейнольдса $\mathrm{Re}=r_0^2/(t_0\nu)$, число Грасгофа $\mathrm{Gr}=(\beta g\Delta T r_0^3)/\nu^2$, число Прандтля $\mathrm{Pr}=\nu/a$. Здесь ν — кинематическая вязкость, β — коэффициент термического расширения, g — ускорение свободного падения, $a=\lambda_{\text{ж}}/(c_{\text{ж}}\rho_{\text{ж}})$ — температуропроводность расплава. Геометрическими параметрами, характеризующими гидродинамическую задачу, являются отношения $A=H_{\text{т}}/R_{\text{т}}$, $B=R_{\text{кр}}/R_{\text{т}}$.

В строгой постановке краевые условия должны учитывать нестационарность процесса Чохральского. Действительно, в процессе вытягивания кристалл удлиняется, а уровень расплава опускается. Если кристалл вытягивается со скоростью v_0, то из условий массового баланса легко найти скорость опускания расплава v_l:

$$v_l=-v_0\overline{R}_{\text{кр}}^2/(\overline{R}_{\text{т}}^2-\overline{R}_{\text{кр}}^2),$$

т. е. уровень расплава убывает по закону $H_{\text{т}}(t)=H_{\text{т}}(0)+v_l t$. На стенках тигля $\psi=0$ в силу условий непроницаемости. Тогда на поверхности EDC функция ψ равна

$$\psi=\begin{cases}\bar{v}_0 r^2/2, & 0\leqslant r\leqslant\overline{R}_{\text{кр}},\\ \dfrac{v_0\overline{R}_{\text{кр}}^2}{2}\,\dfrac{\overline{R}_{\text{т}}^2-r^2}{\overline{R}_{\text{т}}^2-\overline{R}_{\text{кр}}^2}, & \overline{R}_{\text{кр}}\leqslant r\leqslant\overline{R}_{\text{т}},\end{cases} \tag{14}$$

где $\bar{v}_0=v_0/(r_0/t_0)$.

На стенках тигля и поверхности кристалла

$$\partial\psi/\partial n=0 \tag{15}$$

— условие прилипания, на горизонтальной свободной поверхности

$$\xi=-\frac{M}{\mathrm{Re}}\frac{1}{r}\frac{\partial\Theta}{\partial r}. \tag{16}$$

Соотношение (16) учитывает термокапиллярный эффект: $M = \mathrm{Mn}/\mathrm{Pr}$, $\mathrm{Mn} = \left|\frac{\partial\gamma}{\partial T}\right| \frac{\Delta T_0 r_0}{\rho\nu a}$ — число Марангони, γ — коэффициент поверхностного натяжения.

Краевые условия для W следующие: на поверхности тигля ABC $W = 2\pi\bar{f}_т r^2$, $\bar{f}_т = f_т t_0$ ($f_т$ — частота вращения тигля), на поверхности кристалла $W = 2\pi\bar{f}_{кр} r^2$, $\bar{f}_{кр} = f_{кр} t_0$ ($f_{кр}$ — частота вращения кристалла), на свободной поверхности расплава $\frac{\partial}{\partial n}\left(\frac{W}{r^2}\right) = 0$, где производная берется по нормали к поверхности. На оси симметрии справедливы условия

$$\psi = 0, \ \frac{\partial\xi}{\partial r} = 0, \ \frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{W}{r^2}\right) = 0.$$

Краевые условия для температуры были сформулированы в разд. 2.

Начальные условия задачи в расчетах задавались достаточно произвольно, чаще всего поля скоростей полагались нулевыми, а температурное поле определялось из решения стационарной тепловой задачи.

В разд. 2 указывалось, что в реализованной к настоящему времени модели конвективный перенос рассматривается только в области квадратного сечения $ABCE$, т. е. при решении гидродинамической задачи пренебрегается искривлением формы свободной поверхности и малым ($\sim 0{,}5$ см) подъемом жидкого столбика над уровнем расплава. Другое важное допущение основано на следующем: скорость вытягивания v_0 оказывается величиной, не большей $3 \cdot 10^{-3}$ см/с, а характерная скорость гидродинамического течения v^*, как показывают расчеты [11, 12], ~ 1 см/с. Считая v_0 малым по сравнению с v^*, получим, что $H_т(t) = \mathrm{const} = H_т(0)$, а вместо (14) — условие

$$\psi = 0, \quad z = H_т, \quad 0 < r < \bar{R}. \tag{17}$$

Задачу с $H_т = \mathrm{const}$ и условием (17) можно рассматривать как квазистационарную. Если характерное время опорожнения тигля много меньше времени установления в расплаве квазистационарного режима течения $t_{ст}$, т. е. $H_т/v_l \ll t_{ст}$, что обычно выполняется на практике, то первоначальную нестационарную задачу можно заменить серией квазистационарных задач с параметром $H_т$.

4. Разностные схемы для уравнений гидродинамики

Характерные значения чисел Рейнольдса, определенные по вращению кристалла, для промышленных установок выращивания кристаллов кремния, германия и др. составляют величины порядка нескольких тысяч. Большими являются и значения чисел Грасгофа,

Марангони. Все это предъявляет жесткие требования к численному методу решения уравнений Навье—Стокса. Сопоставление результатов численного моделирования близкого варианта по разным разностным схемам [12—14] показало отличие в результатах, особенно в деталях течения. Поскольку в настоящее время нельзя утверждать, что одна схема заведомо лучше остальных, в пакет программ включены реализации трех разностных схем.

Разностные уравнения записываются на сетке $\bar{\Omega}$ узлов $X(z_i, r_j)$, $z_1=0$; $z_i=z_{i-1}+h_i$, $i=2, \ldots, N$; $z_N=\bar{H}_\tau$; $r_j=r_{j-1}+g_j$, $j=2, \ldots, M$; $r_M=\bar{R}$, $r_1=0$. Введены также шаги $\hbar_i=0{,}5(h_i+h_{i+1})$, $i=2, \ldots, N-1$; $\hbar_1=0{,}5h_2$, $\hbar_N=0{,}5h_N$; $\tilde{g}_j=0{,}5(g_j+g_{j+1})$, $j=2, \ldots, M-1$; $\tilde{g}_1=0{,}5g_2$, $\tilde{g}_N=0{,}5g_M$.

Для записи разностных производных используются стандартные безындексные обозначения [14]. Разностные функции обозначаются теми же буквами, что и соответствующие функции в дифференциальной задаче. Во всех нестационарных разностных уравнениях у разностных функций в правой части верхний индекс, обозначающий номер временного слоя, не указывается. Его значение может меняться в зависимости от использованного метода решения.

Вначале выписывается, следуя работам [12, 15], монотонная разностная аппроксимация уравнений (10), (11) с аппроксимацией конвективных членов по Самарскому [14]. Предварительно вводятся обозначения: $u^+=(u+|u|)/2$, $u^-=(u-|u|)/2$; $v^+=(v+|v|)/2$, $v^-=(v-|v|)/2$; $\varkappa^{(z)}=[\mathrm{Re}(1+0{,}5|u|\mathrm{Re}\hbar)]^{-1}$, $\varkappa^{(r)}=[\mathrm{Re}(1+0{,}5|v|\mathrm{Re}\,\tilde{g})]^{-1}$.

Разностные уравнения имеют вид

$$\xi_t=\varkappa^{(z)}\xi_{\bar{z}\hat{z}}-u^-\xi_z-u^+\xi_{\bar{z}}+\frac{\varkappa^{(r)}}{r}\left(\frac{1}{r}(r^2\xi)_{\bar{r}}\right)_{\hat{r}}-$$
$$-\frac{v^-}{rr_{j+1/2}}(r^2\xi)_r-\frac{v^+}{rr_{j-1/2}}(r^2\xi)_{\bar{r}}+\frac{2v}{r}\xi+$$
$$+\frac{1}{2r^4}[(W^2)_z+(W^2)_{\bar{z}}]-\frac{\mathrm{Gr}}{2\,\mathrm{Re}^2 r}(\Theta_{\bar{r}}+\Theta_r), \tag{18}$$

$$W_t=\varkappa^{(z)}W_{\bar{z}\hat{z}}-u^-W_z-u^+W_{\bar{z}}+\varkappa^{(r)}r\left(\frac{1}{r}W_{\bar{r}}\right)_{\hat{r}}-$$
$$-v^-\frac{r_j}{r_{j+1/2}}W_r-v^+\frac{r_j}{r_{j-1/2}}W_{\bar{r}}. \tag{19}$$

Скорости u, v в этой схеме находятся из функции тока центрально-разностной аппроксимацией соотношений (9). Нетрудно проверить, что разностные операторы, действующие на функции ξ, W, являются монотонными.

В двух других схемах, включенных в пакет программ, использовалась разностная аппроксимация уравнений (10), (11), предложенная в работах [16, 17]. После преобразований разностные

уравнения могут быть записаны в виде

$$\xi_t = \frac{1}{\mathrm{Re}\,\hbar_i}\left[\left(1-\alpha^{(\xi)}_{i+1,j}+\rho^{(\xi,z)}_{i+1,j}\right)\xi_z-\left(1+\tilde{\alpha}^{(\xi)}_{ij}+\rho^{(\xi,z)}_{i,j}\right)\xi_{\bar{z}}\right]+$$

$$+\frac{1}{\mathrm{Re}\,r_j\underline{g}_j}\left[\left(\frac{r^2_{j+1}}{r_{j+\frac{1}{2}}}-\beta^{(\xi)}_{i,j+1}+\rho^{(\xi,r)}_{i,j+1}\right)\xi_r-\right.$$

$$\left.-\left(\frac{r^2_{j-1}}{r_{j-\frac{1}{2}}}+\tilde{\beta}^{(\xi)}_{i,j}+\rho^{(\xi,r)}_{i,j}\right)\xi_{\bar{r}}\right]+p^{(1)}_{i,j}+p^{(2)}_{i,j}, \qquad (20)$$

$$W_t = \frac{1}{\mathrm{Re}\,\hbar_i}\left[\left(1-\alpha^{(W)}_{i+\frac{1}{2},j}+\rho^{(W,z)}_{i+\frac{1}{2},j}\right)W_z-\left(1+\tilde{\alpha}^{(W)}_{i-\frac{1}{2},j}+\right.\right.$$

$$\left.\left.+\rho^{(W,z)}_{i-\frac{1}{2},j}\right)W_{\bar{z}}\right]+\frac{1}{\mathrm{Re}\,r_j\tilde{\underline{g}}_j}\left[\left(\frac{r^2_j}{r_{j+\frac{1}{2}}}-\beta^{(W)}_{i,j+\frac{1}{2}}+\rho^{(W,z)}_{i,j+\frac{1}{2}}\right)W_r-\right.$$

$$\left.-\left(\frac{r^2_j}{r_{j-\frac{1}{2}}}+\tilde{\beta}^{(W)}_{i,j-\frac{1}{2}}+\rho^{(W,r)}_{i,j-\frac{1}{2}}\right)W_{\bar{r}}\right]. \qquad (21)$$

Здесь введены обозначения:

$$\alpha^{(\xi)}_{i,j}=\frac{\mathrm{Re}\,u_{i,j}h_i}{2},\qquad \tilde{\alpha}^{(\xi)}_{i,j}=\frac{\mathrm{Re}\,u_{i-1,j}h_i}{2},\qquad \beta^{(\xi)}_{i,j}=\frac{\mathrm{Re}\,r_jg_jv_{i,j}}{2},$$

$$\tilde{\beta}^{(\xi)}_{i,j}=\frac{\mathrm{Re}\,r_{j-1}g_jv_{i,j-1}}{2},\qquad p^{(1)}_{i,j}=-\frac{\mathrm{Gr}\,(\Theta_{i,j+1}-\Theta_{i,j-1})}{\mathrm{Re}^2\,r_j2\tilde{\underline{g}}_j},$$

$$p^{(2)}_{i,j}=\frac{1}{r_j\hbar_i}\left[0{,}5\left(f_{i+1,j+\frac{1}{2}}\frac{g_{j+1}}{2\tilde{\underline{g}}_j}+f_{i+1,j-\frac{1}{2}}\frac{g_j}{2\tilde{\underline{g}}_j}\right)-\right.$$

$$\left.-0{,}5\left(f_{i-1,j+\frac{1}{2}}\frac{g_{j+1}}{2\tilde{\underline{g}}_j}+f_{i-1,j-\frac{1}{2}}\frac{g_j}{2\tilde{\underline{g}}_j}\right)\right],$$

$$f_{i,j+\frac{1}{2}}=\frac{W_{i,j+1}W_{i,j}}{r_{j+1}r_j\bar{r}_{j+\frac{1}{2}}},\quad r_{j+\frac{1}{2}}=\frac{2r_j\bar{r}_{j+1}}{r_j+r_{j+1}},$$

$$\alpha^{(W)}_{i-1/2,j}=\frac{\mathrm{Re}\,u_{i-1/2,j}h_i}{2},\qquad \rho^{(W,z)}_{i-1/2,j}=\frac{[\alpha^{(W)}_{i-1/2,j}]^2}{1+|\alpha^{(W)}_{i-1/2,j}|},$$

$$\beta^{(W)}_{i,j-1/2}=\frac{\mathrm{Re}\,r_{j-1/2}v_{i,j-1/2}g_j}{2},\qquad \rho^{(W,r)}_{i,j-1/2}=\frac{[\beta^{(W)}_{i,j-1/2}]^2}{r^2_{j-1}/r_{j-1/2}+|\beta^{(W)}_{i,j-1/2}|}.$$

Скорости в (20), (21) определены соотношениями

$$u_{i,j}=\frac{1}{r_j}\frac{\psi_{i,j+1}-\psi_{i,j-1}}{2\tilde{g}_j},\qquad v_{i,j}=-\frac{1}{r_j}\frac{\psi_{i+1,j}-\psi_{i-1,j}}{2h_i},$$

$$u_{i+1/2,j}=\frac{1}{2}(u_{i+1,j}+u_{i,j}),\qquad v_{i,j+1/2}=\frac{1}{2r_{j+1/2}}(r_{j+1}v_{i,j+1}+r_jv_{i,j}).$$

Схемные вязкости в уравнении (20) брались либо нулевыми

$$\rho_{i,j}^{(\xi,z)}=\rho_{i,j}^{(\xi,r)}=0, \tag{22}$$

либо в виде

$$\rho_{i,j}^{(\xi,z)}=\frac{[R_{i,j}^{(z)}]^2}{1+R_{i,j}^{(z)}},\qquad R_{i,j}^{(z)}=\max(|\alpha_{i,j}^{(\xi)}|,\ |\tilde{\alpha}_{i,j}^{(\xi)}|),$$

$$\rho_{i,j}^{(\xi,r)}=\frac{[R_{i,j}^{(r)}]^2}{r_{j-1}^2/r_{j-1/2}+R_{i,j}^{(r)}},\quad R_{i,j}^{(r)}=\max(|\beta_{i,j}^{(\xi)}|,\ |\tilde{\beta}_{i,j}^{(\xi)}|). \tag{23}$$

Разностные уравнения (20), (21) получены в результате аппроксимации уравнений (10), (11), предварительно записанных в дивергентной форме. Схема (20), (21) получена путем тождественных преобразований дивергентной записи разностных уравнений в недивергентную с учетом разностного уравнения неразрывности.

Уравнение теплопроводности (12) также предварительно записывалось в дивергентной форме. После преобразований разностная аппроксимация (12) может быть записана в виде

$$\Theta_t=\frac{1}{\mathrm{Re\,Pr}\,h_i}[(1-\alpha_{i+1/2,j}^{(\Theta)}+\rho_{i+1/2,j}^{(\Theta,z)})\Theta_z-(1-\alpha_{i-1/2,j}^{(\Theta)}+\rho_{i-1/2,j}^{(\Theta,z)})\Theta_{\bar{z}}]+$$
$$+\frac{1}{\mathrm{Re\,Pr}\,\tilde{g}_jr_j}[(r_{j+1/2}-\beta_{i,j+1/2}^{(\Theta)}+\rho_{i,j+1/2}^{(\Theta,r)})\Theta_r-$$
$$-(r_{j-1/2}+\beta_{i,j-1/2}^{(\Theta)}+\rho_{i,j-1/2}^{(\Theta)})\Theta_{\bar{r}}], \tag{24}$$

$$\alpha_{i-1/2,j}^{(\Theta)}=0{,}5\,\mathrm{Re\,Pr}\,u_{i-1/2,j}h_i,\qquad \beta_{i,j-1/2}^{(\Theta)}=0{,}5\,\mathrm{Re\,Pr}\,v_{i,j-1/2}r_{j-1/2}g_j,$$

$$\rho_{i-1/2,j}^{(\Theta,z)}=\frac{[\alpha_{i-1/2,j}^{(\Theta)}]^2}{1+|\alpha_{i-1/2,j}^{(\Theta)}|},\qquad \rho_{i,j-1/2}^{(\Theta,r)}=\frac{[\beta_{i,j-1/2}^{(\Theta)}]^2}{r_{j-1/2}+|\beta_{i,j-1/2}^{(\Theta)}|}.$$

Уравнение для функции тока аппроксимировалось обычным образом на 5-точечном шаблоне:

$$\psi_{\bar{z}\hat{z}}+r\left(\frac{1}{r}\psi_{\bar{r}}\right)_{\hat{r}}=-r^2\xi. \tag{25}$$

Итак, здесь приведены три разностные схемы расчета уравнений Навье—Стокса. Разностные уравнения (18), (19), (24), (25) образуют монотонную схему (МС). Уравнения (20), (21), (24),

(25) с нулевыми схемными вязкостями (22) в уравнении (20) обеспечивают выполнение баланса кинетической энергии (консервативная энергетически нейтральная схема (КНС)). В схеме КНС монотонность гарантирована для всех разностных операторов, кроме оператора, действующего на ξ. Монотонизация оператора (20) проводится с помощью схемных вязкостей (23) (консервативная монотонная схема), но баланс кинетической энергии в этой схеме, вообще говоря, не выполнен.

Во всех схемах использовалась аппроксимация Тома [18] вихря на твердой границе.

В качестве метода решения нестационарных уравнений в настоящей работе использовался метод переменных направлений, уравнения решались поочередно. Нелинейные члены в тепловой задаче брались с предыдущего временного слоя. Уравнение (25) итерировалось на слое методом Писмена—Рэкфорда с оптимальным набором параметров, обычно требовалось 4—6 итераций.

В пакете программ предусмотрена возможность счета с разными шагами по времени в «тепловой и гидродинамической» частях задачи. В частности, при малых числах Прандтля изменение температуры во времени происходит медленнее изменения гидродинамических параметров, поэтому шаг по времени для тепловой задачи может быть более крупным, чем для гидродинамической. В любом случае больший шаг являлся кратным меньшему.

5. Результаты расчетов

В качестве иллюстрации в этом разделе приведены результаты расчетов процесса роста кристалла германия. Для рассматриваемого варианта были проведены специальные измерения распределения температуры в графитовом тигле и на экранах, что позволило задать достоверные краевые условия для тепловой задачи. Кроме того, проводились измерения температуры в расплаве вблизи свободной поверхности и в подкристальной области. Эти экспериментальные значения сопоставлялись с результатами расчетов.

Исходными значениями параметров задачи были: $H_т=4{,}5$ см, $H_{кр}=13{,}5$ см, $R_т=6{,}75$ см, $R_{кр}=2{,}1$ см, $f_т=-20$ мин$^{-1}$, $f_{кр}=20$ мин$^{-1}$. Экспериментальные значения температуры на тигле, входящие в условие (4), аппроксимировались параболами на дне и стенках тигля, перепад температур $\Delta T_0=35°$. В качестве r_0 выбран радиус тигля, $t_0=1/f_{кр}$, т. е. единица времени соответствует одному обороту кристалла.

Изолинии безразмерной функции тока для этого варианта представлены на рис. 2, расчет выполнен на схеме МС. В работе [16] представлены результаты расчетов близкого варианта, в котором температура на поверхности расплава задавалась. В целом результаты расчетов удовлетворительно совпадают между собой, но в отличие от [16] в рассматриваемом случае, кроме основного вихря в центре тигля, вблизи свободной поверхности имеется сравнительно большой вихрь с противоположным направлением циркуляции.

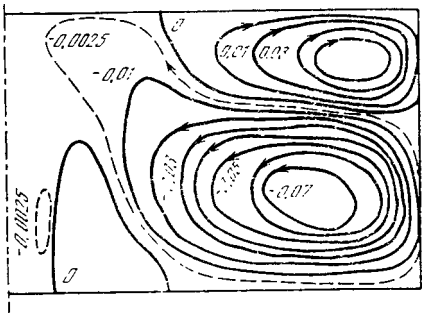


Рис. 2. Изолинии функции тока в расплаве

Рис. 3. Распределение температуры в подкристальной области и на свободной поверхности

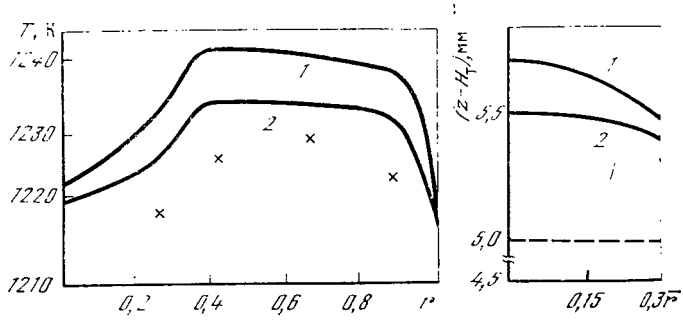


Рис. 4. Положение фронта кристаллизации при расчете без учета (*1*) и с учетом (*2*) теплового сопротивления тигля

Штриховая линия — примерное положение фронта кристаллизации по экспериментальным данным

Появление этого вихря обусловлено тепловой и термокапиллярной конвекцией, вызванной немонотонным распределением температуры на свободной поверхности расплава. Следует отметить, что при указанных значениях параметров для германия влияние тепловой конвекции преобладает.

Температурное распределение на свободной поверхности и в подкристальной области приведено на рис. 3, точками отмечены экспериментальные значения. Кривая *1*, полученная с использованием условий 1-го рода ($T=T_{гр}$) на поверхности тигля, лежит заметно выше экспериментальных точек. Ближе к эксперименту кривая *2*, полученная с использованием условия (4), которое учитывает тепловое сопротивление стенки тигля.

Найденное в расчетах положение фронта кристаллизации (рис. 4) ненамного превышает экспериментальные значения, и с учетом некоторой неопределенности в распределении температуры на поверхности тигля совпадение можно считать удовлетворительным. Фронт оказывается почти плоским, что также согласуется с экспериментом.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Бердников В. С., Забродин А. Г., Марков В. А.* Тепловая гравитационно-капиллярная конвекция в полости с различно нагретыми торцевыми стенками.— В кн.: Структура вынужденных и термогравитационных течений. Новосибирск: ИТФ СО АН СССР, 1983, с. 147—163.
2. *Бердников В. С., Борисов В. Л., Панченко В. И., Простомолотов А. И.* Моделирование гидродинамики расплава при выращивании кристаллов.— В кн.: Термофизические процессы при кристаллизации и затвердевании. Новосибирск: ИТФ СО АН СССР, 1984, с. 66—83.
3. *Nikolov T., Iliev K., Peshev P.* Simulation studies of the hydrodynamics in high-temperature solutions for crystal growth. VI. Temperature fluctuations at the crystal/liquid interface.— Mater. Res. Bull., 1983, vol. 18, N 9, p. 1073—1080.
4. *Kobayashi N., Arizumi T.* The numerical analysis of the solid-liquid interface shapes during the crystal growth by the Czochralski method.— Jap. J. Appl. Phys., 1970, vol. 9, N 4, p. 361—367.
5. *Langlois W. E.* Digital simulation of Czochralski bulk flow in a parameter range appropriate for a liquid semiconductors.— J. Cryst. Growth, 1977, vol. 42, p. 386—399.
6. *Полежаев В. И.* Гидродинамика, тепло- и массообмен при росте кристаллов.— В кн.: Механика жидкости и газа. М.: ВИНИТИ, 1984, с. 198—269. (Итоги науки и техники; Т. 18).
7. *Люмкис Е. Д., Мартузан Б. Я.* Расчет температуры в растущем кристалле с учетом теплообмена с окружающей средой в условиях процесса Чохральского.— В кн.: Прикладные задачи теоретической и математической физики. Рига: Латв. ун-т им. П. Стучки, 1978, с. 70—86.
8. *Авдонин Н. А., Вахрамеев С. С., Освенский В. Б.* Постановка и численное решение термоупругопластической задачи с учетом движения дислокаций в плоскостях скольжения кристаллов, выращиваемых из расплава.— Наст. сб.
9. *Авдонин Н. А.* Математическое описание процессов кристаллизации. Рига: Зинатне, 1980. 178 с.
10. *Зигель Р., Хауэлл Дж.* Теплообмен излучением. М.: Мир, 1975. 934 с.
11. *Люмкис Е. Д., Мартузан Б. Я., Мартузане Э. Н.* Численное исследование нестационарных гидродинамических и тепловых процессов в методе Чохральского.— Изв. АН СССР. Сер. физ., 1980, т. 44, № 2, с. 373—377.
12. *Люмкис Е. Д., Мартузан Б. Я., Мартузане Э. Н.* К численному расчету потоков вязкой жидкости с вращением, гравитационной и термокапиллярной конвекцией.— В кн.: Прикладные задачи теоретической и математической физики. Рига: Латв. ун-т им. П. Стучки, 1980, с. 20—33.
13. *Полежаев В. И., Простомолотов А. И.* Исследование процессов гидродинамики и тепло-массообмена при выращивании кристаллов методом Чохральского.— Изв. АН СССР. МЖГ, 1981, № 1, с. 55—65.
14. *Самарский А. А.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1977. 656 с.
15. *Люмкис Е. Д., Мартузан Б. Я., Мартузане Э. Н.* Взаимодействие потоков, вызванных термокапиллярной конвекцией и вращением при зонной плавке, и их влияние на распределение примеси.— В кн.: Технологические эксперименты в невесомости. Свердловск: УНЦ АН СССР, 1983, с. 163—178.
16. *Старшинова И. В., Фрязинов И. В.* Численное исследование гидродинамических и тепловых процессов получения монокристаллов по методу Чохральского: Препр. ИПМ АН СССР № 52. М., 1982. 21 с.
17. *Фрязинов И. В.* Консервативные разностные схемы для уравнений несжимаемой вязкой жидкости в криволинейных ортогональных координатах в переменных вихрь — функция тока — момент вращения: Препр. ИПМ АН СССР № 120. М., 1980. 25 с.
18. *Роуч П.* Вычислительная гидродинамика. М.: Мир, 1980. 616 с.

УДК 536.24 : 548.5

РАСЧЕТ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ПОЛЕЙ ПРИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ СЛИТКОВ ВЕРТИКАЛЬНЫМ МЕТОДОМ БРИДЖМЕНА

О. А. Кузнецов, Ю. А. Повещенко, О. В. Чернышенко

Введение

Выращивание монокристаллов методами вертикальной направленной кристаллизации и зонной плавки в контейнерах получает все большее распространение в современной технологии получения монокристаллов и особо чистых веществ.

Одним из основных требований к процессу получения материалов таким методом является обеспечение постоянной конфигурации фронта кристаллизации (плоского или выпуклого в расплав) в течение всего процесса выращивания слитка конечных размеров. Для удовлетворения этого требования прежде всего необходимо знать закономерности формирования температурных полей в системе нагреватель (муфель) — контейнер — слиток.

В работе рассматриваются вопросы математического моделирования температурных полей в системе муфель — контейнер — слиток при перемещении контейнера относительно муфеля, разработки производственно-ориентированного комплекса программ для численного расчета с целью оптимизации условий формирования заданного профиля температур.

Физическая модель

Внутри цилиндрического муфеля *1* (рис. 1) высотой H и внутренним радиусом R расположен коаксиальный с ним цилиндрический контейнер *2* высотой $h=h_2-h_1$. Внешний радиус контейнера — r, внутренний — $r-l$, где l — толщина боковых стенок контейнера. Контейнер заполнен некоторым веществом *3*. Известны удельная теплоемкость и коэффициент теплопроводности стенок контейнера и наполняющего контейнер вещества,

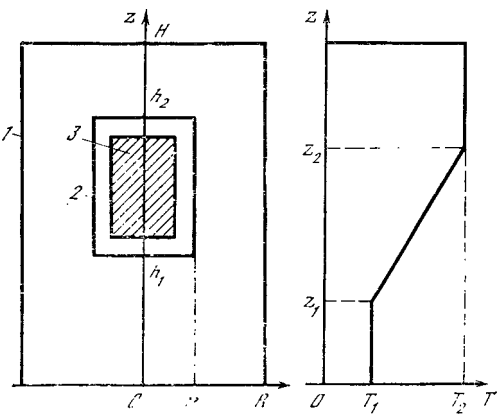


Рис. 1. Муфель (*1*) с находящимся внутри него контейнером (*2*), заполненным веществом (*3*)

Справа — распределение температуры на боковой стенке муфеля

Задача обладает цилиндрической симметрией. Задано распределение температуры на всех внутренних поверхностях муфеля *1*. На нижнем торце муфеля при $z=0$, $r \leqslant R$ задана постоянная температура $T_{1м}$ на верхнем торце при $z=H$, r — температура $T_{2м}$. На боковой поверхности задано кусочно-линейное распределение температуры:

$$T(z)=\begin{cases} T_1, & 0 \leqslant z \leqslant z_1, \\ T_1+(z-z_1)\dfrac{T_2-T_1}{z_2-z_1}, & z_1 \leqslant z \leqslant z_2, \\ T_2, & z_2 \leqslant z \leqslant H, \end{cases}$$

где z_1 и z_2 — некоторые параметры.

Поверхность контейнера нагревается вследствие теплового излучения внутренних стенок муфеля.

Математическая модель

Тепловое поле внутри контейнера $T(z, r, t)$ описывается следующими уравнениями:

а) для стационарной задачи

$$\operatorname{div}(\lambda(T)\operatorname{grad} T)=0, \tag{1}$$

б) для нестационарной задачи

$$C(T)\frac{\partial T}{\partial t}=\operatorname{div}(\lambda(T)\operatorname{grad} T) \tag{2}$$

с краевыми условиями

$$W_{гр}=W-\sigma T_{гр}^4,$$

где C — удельная теплоемкость; λ — коэффициент теплопроводности; σ — коэффициент излучения поверхности контейнера; W — поток излучения с внутренних поверхностей муфеля; $W_{гр}$ — поток излучения на поверхности контейнера.

Для нестационарной задачи необходимо учитывать фазовый переход, т. е. решать задачу Стефана, которая ставится следующим образом: уравнение (2) верно внутри каждой из фаз; на границе раздела фаз ставится условие

$$W_2-W_1=L\left(\frac{\partial R}{\partial t}, \frac{\operatorname{grad}\Phi}{|\operatorname{grad}\Phi|}\right), \tag{3}$$

где

$$W_{1,2}=-\left(k\operatorname{grad} u, \frac{\operatorname{grad}\Phi}{|\operatorname{grad}\Phi|}\right)_{1,2};$$

$R(t)$ — положение фазового фронта; L — скрытая теплота плавления.

Здесь фазовый фронт определяется условием $u=u^*$, причем u^* — температура фазового перехода, индекс 1 относится к фазе с $u<u^*$, а индекс 2 — к фазе с $u>u^*$.

Задача (2) с условием (3) на границе раздела фаз может быть записана в виде

$$(C + Q^*\delta(u - u^*))\frac{\partial u}{\partial t} + \operatorname{div} W = 0, \tag{4}$$

где $\delta(x)$ — дельта-функция Дирака.

Это уравнение можно получить, если учесть, что при температуре фазового перехода $u = u^*$ энергия E как функция температуры испытывает скачок на величину Q^*, которая называется теплотой фазового перехода, поэтому для энергии справедливо

$$E = \int_0^T C(T)\,dT + Q^*\Theta(T - T^*),$$

$$\Theta(T) = \begin{cases} 1, & T \geqslant 0, \\ 0, & T < 0. \end{cases}$$

Подставляя это выражение в уравнение энергии $\partial E/\partial t + \operatorname{div} W = Q$ и учитывая, что $\partial\Theta(T)/\partial T = \delta(T)$ есть дельта-функция Дирака, получим уравнение

$$(C(T) + Q^*\delta(T - T^*))\frac{\partial T}{\partial t} + \operatorname{div} W = Q,$$

справедливое и в области фазового перехода.

Выражения $C(T)$, $Q^*\delta(T-T^*)$ входят в уравнение одинаковым образом, причем $Q^*\delta(T-T^*)$ представляет собой сосредоточенную теплоемкость на поверхности $T = T^*$.

Для расчета теплового поля внутри контейнера *2* требуется знать потоки на внешней границе контейнера (ампулы), который нагревается излучающими внутренними поверхностями муфеля. Распределение температуры на всех внутренних поверхностях муфеля известно. Граничные условия для потока на боковой стенке контейнера (ампулы), а также на нижнем и верхнем торцах его находятся с помощью вычисления поверхностных интегралов (аналитически и численно), выражающих поток излучения с внутренних поверхностей муфеля.

Конечно-разностная модель

При численном моделировании рассматриваемая пространственная область заменяется дискретной областью ступенчатого вида. Для этого исходная область разбивается на ячейки двумя семействами прямых.

Пусть $\overline{\omega}_h$ — полный набор узлов, составляющий исследуемую область, ω_h — набор узлов, где записывается некоторый баланс, выражаемый дифференциальным уравнением, и γ_h — набор граничных узлов, где задана температура. Очевидно, что

$$\overline{\omega}_h = \omega_h \cup \gamma_h.$$

Применим для разностной аппроксимации исходного дифференциального уравнения интегроинтерполяционный метод [1, 2]. Тогда получим

$$C\frac{\hat{T}-T}{\tau}=-\frac{1}{V_{\omega_h}}\left[\sum_1^2(W_\beta^{(+\alpha)}-W_\alpha)S_\alpha\right]^\sigma+[Q(T)]^\sigma,$$

где $\hat{T}$ — температура на следующем временном слое; σ — параметр, позволяющий варьировать интерполяцию сеточных функций, $0\leqslant\sigma\leqslant1$:

$$u^\sigma=\sigma u(\hat{t})+(1-\sigma)u(t);$$

W_α, $W_\alpha^{(+\alpha)}$ — плотность теплового потока через левую и правую грани ячейки, перпендикулярные направлению α;

$$W_\alpha^{(+\alpha)}=-{}^\alpha\varkappa^{(+\alpha)}u_{q_\alpha},\qquad W_\alpha=-{}^\alpha\varkappa u_{\bar{q}_\alpha},$$

причем ${}^\alpha\varkappa$ берется в виде

$${}^\alpha\varkappa=0{,}5(\varkappa(u^{(-\alpha)})+\varkappa(u)).$$

Объем балансной ячейки и площадь грани, перпендикулярной направлению h_α, определяются так:

$$V_{\omega_h}=r_h\hbar_r\hbar_z,\qquad S_z=r_h\hbar_z,\ S_r=r_h\hbar_z,$$

где $\hbar_\alpha$ — размер ячейки в направлении α.

Рассмотрим оператор

$${}^\alpha Ay=(W_\alpha^{(+\alpha)}-W_\alpha)/{}^\alpha\hbar.$$

К системе разностных уравнений

$$f(\hat{T})\equiv C(\hat{T}-T)+\tau\left(\sum_{\alpha=1}^2{}^\alpha AT\right)^\sigma=0$$

применим линейно-квадратичный итерационный процесс [3] (${}^\alpha A^s$ — линейный оператор):

$$C(\overset{s}{T})\overset{s+1}{\delta}T+\sigma\tau\sum_{\alpha=1}^2{}^\alpha A^s\overset{s+1}{\delta}T=-f^s,$$

$${}^\alpha\overset{s}{W}=-{}^\alpha\overset{s}{\varkappa}T_{q_\alpha},\qquad {}^\alpha\overset{s}{W}{}^{(+\alpha)}=-{}^\alpha\overset{s}{\varkappa}{}^{(+\alpha)}T_{q_\alpha},$$

$$\overset{s}{f}=f(\overset{s}{T}),\qquad \overset{s+1}{\delta}T=\overset{s+1}{T}-\overset{s}{T},$$

а верхним правым индексом s помечаются величины на предыдущей итерации.

В постановку дифференциальной задачи (4) входит дельта-функция. Для перехода к разностной задаче заменим дельта-функцию приближенной дельтообразной или размазанной функцией

$\delta(x, \Delta)$, где Δ — половина интервала, на котором $\delta(x, \Delta)$ отлична от нуля:

$$\delta(x, \Delta)=0, \quad |x|>\Delta, \quad \int \delta(x, \Delta)\,dx=1.$$

Конкретный вид $\delta(x, \Delta)$ может выбираться по-разному [4].

В случае, когда теплофизические параметры терпят разрыв при переходе через фазовый фронт, сглаживание также проводится на интервале $(u^*-\Delta, u^*+\Delta)$.

Введем эффективную сглаженную удельную теплоемкость, удовлетворяющую следующим условиям:

$$\tilde{C}(u)=C_1(u), \quad u<u^*-\Delta, \quad \tilde{C}(u)=C_2(u), \quad u>u^*+\Delta,$$

$$\int\limits_{u^*-\Delta}^{u^*+\Delta} \tilde{C}(u)\,du=\lambda+\int\limits_{u^*-\Delta}^{u^*} C_1(u)\,du+\int\limits_{u^*}^{u^*+\Delta} C_2(u)\,du.$$

Тогда, если удельная теплоемкость не зависит от температуры внутри каждой из фаз:

$$C=C_1=\text{const}, \quad u<u^*,$$

$$C=C_2=\text{const}, \quad u>u^*,$$

эффективная сглаженная теплоемкость может быть записана в простом виде:

$$\tilde{C}(u)=\begin{cases} C_1, & u<u^*-\Delta, \\ \dfrac{C_1+C_2}{2}+\dfrac{\lambda}{2\Delta}, & |u-u^*|<\Delta, \\ C_2, & u>u^*+\Delta. \end{cases}$$

Метод решения

В предыдущем пункте описана часть предметной области пакета программ ТЕКОН [3].

ТЕКОН реализует алгоритм решения задачи

$$\partial\varphi(\varepsilon)/\partial t+\operatorname{div} W=Q, \quad \mathbf{r}\in G,$$

$$W_n|\varepsilon=\nu, \quad \mathbf{r}\in\partial G,$$

$$\varepsilon|_{t=t_0}=\varepsilon_0, \quad \mathbf{r}\in G$$

в произвольных (криволинейных) локально ортогональных координатах. Здесь решение ε ищется в цилиндре $Q_T=\bar{G}x(t_0\leqslant t\leqslant T)$, основанием которого является ступенчатая область G с границей ∂G.

Для получения разностной схемы используется интегроинтерполяционный метод [1, 2]. Полученная система алгебраических уравнений линеаризуется с помощью линейно-квадратичного итерационного метода [3] на каждом шаге. Для приближенного решения полученной системы линейных уравнений применяется двухслойная итерационная схема Ричардсона с чебышевским упорядо-

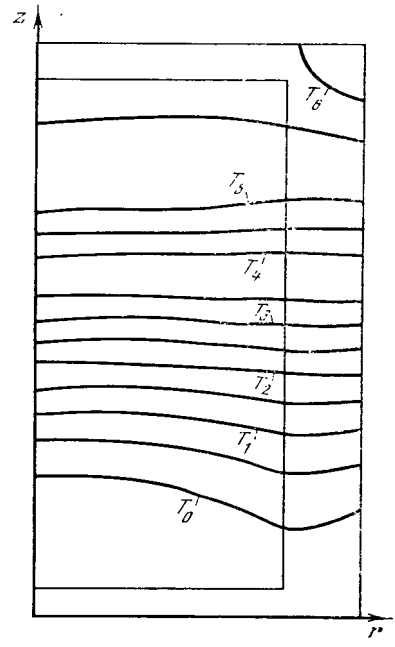


Рис. 2. Типичная картина изолиний $T=\text{const}$, получающаяся в результате расчетов

ченным набором параметров [1]. Оценка границ спектра линейной задачи осуществляется по теореме о кругах Гершгорина. В рассматриваемом классе задач естественным образом линеаризованные разностные операторы удовлетворяют набору следующих свойств: строгой положительной определенности, связанной с устойчивостью решения, самосопряженностью, связанной с выполнением разностных законов баланса в дивергентной форме, и принципу максимума, который позволяет реализовать монотонный разностный профиль решения там, где таким свойством обладают исходные дифференциальные уравнения.

Система ТЕКОН может оперировать объектами двух типов: описательными предложениями входного языка пакета, позволяющими описать физическую постановку задачи, и исполняемыми операторами, посредством которых осуществляется ее решение. В соответствии с этим программа делится на две части. Первая часть — это пункты задания, соответствующие описательным предложениям. В результате трансляции пунктов задания порождаются самостоятельные объектные модули, которые могут использоваться исполняемыми операторами. Вторая часть представляет собой совокупность программных единиц, написанных на ФОРТРАНе. Ссылка на исполняемый оператор может быть записана в любом месте этой части программы. Посредством вызова необходимых исполняемых операторов осуществляется собственно процесс решения задачи, обработка результатов счета и т. п.

На рис. 2 изображена типичная картина изолиний $T=\text{const}$ в условных единицах для самого нижнего положения слитка относительно муфеля. Представлены изотермы $T_i=T_{\min}+i(T_{\max}-T_{\min})/6$, $T_0=T_{\min}$, $T_6=T_{\max}$. Кроме того, проводились расчеты для других положений контейнера, а также для другого материала контейнера.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Самарский А. А.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1977. 656 с.
2. *Самарский А. А., Попов Ю. П.* Разностные схемы газовой динамики. М.: Наука, 1975. 351 с.
3. *Повещенко Ю. А., Попов Ю. П.* ТЕКОН. Пакет прикладных программ для решения тепловых задач: Препр. ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР № 65. М., 1978.
4. *Самарский А. А., Моисеенко Б. Д.* Экономичная схема сквозного счета для многомерной задачи Стефана.— Журн. вычисл. математики и мат. физики, 1965, т. 5, № 3, с. 816—827.

СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие 3

I. АЛГОРИТМЫ ЧИСЛЕННЫХ РЕШЕНИЙ

Гончаров А. Л., Фрязинов И. В.
Об одном численном методе решения уравнений Навье—Стокса на нерегулярных сетках 6

Мажорова О. С., Попов Ю. П., Похилко В. И.
Матричный алгоритм численного решения нестационарных задач концентрационной конвекции для многокомпонентных сред 19

Авдонин Н. А., Иванова Г. Ф.
Численное исследование влияния способов аппроксимации на качественное поведение решения задачи Стефана при больших скоростях кристаллизации 31

II. МЕТОД ЧОХРАЛЬСКОГО

Смирнов В. А., Старшинова И. В., Фрязинов И. В.
Математическое моделирование процессов выращивания монокристаллов по Чохральскому 40

Зейналов Д. А., Старшинова И. В., Титюник Л. Н., Филиппов М. А.
О взаимосвязи гидродинамической устойчивости расплава и радиальной примесной неоднородности в кристаллах 59

Полежаев В. И., Простомолотов А. И.
Численное исследование гидродинамики, тепло- и массообмена в модели роста кристаллов по Чохральскому 66

Винокуров В. А., Люмкис Е. Д., Мартузан Б. Я.
Расчет гидродинамических потоков в расплаве и распределение температуры для прозрачных материалов, выращиваемых способом Чохральского 76

III. МЕТОДЫ ЖИДКО- И ГАЗОФАЗОВОЙ ЭПИТАКСИИ

Дмитриева Л. А., Мажорова О. С., Попов Ю. П., Твирова Э. А., Шленский А. А.
О численном исследовании процесса конвективного массопереноса при получении структур полупроводниковых материалов методом жидкофазовой эпитаксии 84

Верезуб Н. А., Полежаев В. И.
Математическое моделирование конвекции и концентрационных полей при росте эпитаксиальных слоев 101

Герасимов Б. П., Лесуновский А. В., Митин В. В., Борисова Т. А., Ровенский Д. Я.
Численное моделирование тепло- и массообмена в газофазовом реакторе 112

IV. ВЫРАЩИВАНИЕ ОБЪЕМНЫХ МОНОКРИСТАЛЛОВ ИЗ РАСПЛАВА. РЕШЕНИЕ СОПРЯЖЕННЫХ ЗАДАЧ

Воронов И. Н., Герасимов Б. П., Погодин А. И., Чурбанов А. Г.
Исследование газодинамики в камере установок выращивания монокристаллов кремния по Чохральскому 133

Бакирова О. И.
Численное моделирование процессов зонной плавки на основе решения задачи о фазовом переходе в бинарной системе 142

Авдонин Н. А., Вахрамеев С. С., Освенский В. Б.
Постановка и численное решение термоупругопластической задачи с учетом движения дислокаций в плоскостях скольжения кристаллов, выращиваемых из расплава 158

Иванова Г. Ф., Люмкис Е. Д., Мартузан Б. Я., Мартузане Э. Н., Смирнов В. А.
Численное решение задачи совместного определения температурного поля в системе расплав—кристалл и потоков в расплаве в процессе Чохральского 171

Кузнецов О. А., Повещенко Ю. А., Чернышенко О. В.
Расчет температурных полей при кристаллизации слитков вертикальным методом Бриджмена 186

УДК 519.63

Гончаров А. Л., Фрязинов И. В. **Об одном численном методе решения уравнений Навье—Стокса на нерегулярных сетках.**— В кн.: Математическое моделирование. Получение монокристаллов и полупроводниковых структур.— М.: Наука, 1986.

Построена полунеявная разностная схема на нерегулярных сетках в декартовых координатах для двумерных нестационарных уравнений Навье—Стокса в приближении Буссинеска. Уравнения рассматриваются в переменных вихрь—функция тока—температура. Неявные уравнения обладают свойством диагонального преобладания. Для их решения используется итерационный метод локальной релаксации. Приводятся результаты численных экспериментов при больших числах Re и Gr.

Ил. 7. Библиогр. 10 назв.

УДК 519.6 : 517

Мажорова О. С., Попов Ю. П., Похилко В. И. **Матричный алгоритм численного решения нестационарных задач концентрационной конвекции для многокомпонентных сред.**— В кн.: Математическое моделирование. Получение монокристаллов и полупроводниковых структур.— М.: Наука, 1986.

Изложен метод решения двумерных нестационарных уравнений концентрационной конвекции в переменных функции тока ψ, вихрь ω. Алгоритм предназначен для численного исследования процесса конвективного массопереноса, возникающего в расплаве при получении тройных полупроводниковых соединений методом жидкофазовой эпитаксии. Искомые функции (ψ, ω) определяются из уравнений Навье—Стокса с помощью специально разработанного алгоритма решения двумерных разностных уравнений, коэффициенты которых представляют собой матрицы второго порядка. Этот же алгоритм используется для совместного решения уравнений для концентраций, которые в данном случае связаны нелинейными граничными условиями. Проведено сравнение этого метода с некоторыми численными алгоритмами, основанными на раздельном решении уравнений для всех численных функций.

Ил. 3. Библиогр. 22 назв.

УДК 519.6 : 517.958

Авдонин Н. А., Иванова Г. Ф. **Численное исследование влияния способов аппроксимации на качественное поведение решения задачи Стефана при больших скоростях кристаллизации.**— В кн.: Математическое моделирование. Получение монокристаллов и полупроводниковых структур.— М.: Наука, 1986.

В работе проводится анализ различных способов аппроксимации нелинейных разрывных коэффициентов в задаче Стефана в обобщенной постановке. Рассмотрен способ аппроксимации путем введения параметра β и способ «размазывания» скрытой теплоты плавления в интервале температуры. Расчеты проведены на модельном примере кристаллизации цилиндрического образца при наличии фронта кристаллизации сложной формы. Для оценки погрешности численных методов проводится сравнение с аналитическим решением модельной задачи в одномерном приближении. Проанализированы точность и сходимость методов. Показано, что метод сглаживания коэффициентов в интервале температуры приводит к появлению двухфазной области.

Ил. 3. Табл. 3. Библиогр. 8 назв.

УДК 548.55 : 519.6

Смирнов В. А., Старшинова И. В., Фрязинов И. В. **Математическое моделирование процессов выращивания монокристаллов по Чохральскому.**— В кн.: Математическое моделирование. Получение монокристаллов и полупроводниковых структур.— М.: Наука, 1986.

Дана математическая модель процессов тепло- и массопереноса в расплаве при выращивании монокристаллов по Чохральскому и численный метод решения задачи. Приводятся и обсуждаются результаты расчетов различных технологических экспериментов по выращиванию монокристаллов германия, кремния и арсенида галлия с целью обеспечения устойчивого роста монокристаллов и улучшения радиального распределения в них галлия, кислорода, хрома и других легирующих примесей. Приведены также расчеты задач о течении расплава в магнитном поле и в тигле с подпиткой.

Ил. 13. Библиогр. 22 назв.

УДК 548.55 : 519.6

Зейналов Д. А., Старшинова И. В., Титюник Л. Н., Филиппов М. А. **О взаимосвязи гидродинамической устойчивости и радиальной примесной неоднородности в кристаллах.**— В кн.: Математическое моделирование. Получение монокристаллов и полупроводниковых структур.— М.: Наука, 1986.

Показано, что радиальная асимметрия теплового поля при выращивании монокристаллов по методу Чохральского является основной причиной радиальной неоднородности удельного электрического сопротивления (РНУЭС). Установлено, что не-

пользование высокотемпературной тепловой трубы в тепловых узлах установок выращивания позволяет получать монокристаллы германия с РНУЭС не более 2%. С использованием методов математического моделирования установлено, что колебания температуры расплава, обусловленные тепловой асимметрией, являются одной из основных причин неустойчивости монокристаллического роста, особенно на стадии затравления. Приведены рекомендации по стабилизации течения расплава при выращивании монокристаллов по методу Чохральского.

Ил. 7. Библиогр. 12 назв.

УДК 532.516+536.3

Полежаев В. И., Простомолотов А. И. **Численное исследование гидродинамики, тепло- и массообмена в модели роста кристаллов по Чохральскому.**— В кн.: Математическое моделирование. Получение монокристаллов и полупроводниковых структур.—М.: Наука, 1986.

Рассмотрены математические модели и численные методы для исследования процессов гидродинамики, тепло- и массообмена в расплаве при росте кристаллов по Чохральскому, а также вопросы точности и адекватности численных решений.

Изложены результаты параметрического исследования изотермических и неизотермических течений, вызванных отдельным и совместным действием вращения кристалла и тигля, тепловой и термокапиллярной конвекций. Анализируется влияние структуры течения в тигле на основные технологические характеристики в подкристальной области и рассматриваются вопросы управления движением расплава.

Ил. 8. Библиогр. 13 назв.

УДК 532.516.5+536.24

Виноградов В. А., Люмкис Е. Д., Мартузан Б. Я. **Расчет гидродинамических потоков в расплаве и распределение температуры для прозрачных материалов, выращиваемых способом Чохральского.**— В кн. Математическое моделирование. Получение монокристаллов и полупроводниковых структур.— М.: Наука, 1986.

Представлены результаты численного моделирования процесса выращивания парателлурита способом Чохральского. Проведена численная оценка влияния прозрачности кристалла на положение границы раздела фаз. Рассмотрено реверсивное вращение кристалла. Найденные численные решения имеют нестационарный характер.

Ил. 8. Библиогр. 6 назв.

УДК 536.421.4

Дмитриева Л. А., Мажорова О. С., Попов Ю. П., Твирова Э. А., Шленский А. А. **О численном исследовании процесса конвективного массопереноса при получении структур полупроводниковых материалов методом жидкофазовой эпитаксии.**— В кн.: Математическое моделирование. Получение монокристаллов и полупроводниковых структур. М.: Наука, 1986.

В диапазоне параметров, представляющих практический интерес, численно исследовано влияние процесса конвективного массопереноса в расплаве на характер роста ЭС. Для случаев получения эпитаксиальных слоев фосфида галлия в вертикальных системах и арсенида галлия в горизонтальных проведено сопоставление результатов расчетов с экспериментальными данными.

Ил. 17. Библиогр. 15 назв.

УДК 536.25

Верезуб Н. А., Полежаев В. И. **Математическое моделирование конвекции и концентрационных полей при росте эпитаксиальных слоев.**— В кн.: Математическое моделирование. Получение монокристаллов и полупроводниковых структур. – М.: Наука, 1986.

Представлены результаты критериального анализа процессов в растворах-расплавах систем при росте эпитаксиальных слоев в условиях невесомости и в земных условиях. Показано преимущественное влияние на процесс жидкостной эпитаксии конвекции, обусловленной градиентом концентрации, по сравнению с тепловой конвекцией. Приведены результаты параметрического исследования режимов движения в жидкой фазе и их влияния на структуру эпитаксиальных слоев.

Ил. 8. Табл. 2. Библиогр. 37 назв.

УДК 548.55 : 519.6

Герасимов Б. П., Лесуновский А. В., Митин В. В., Борисова Т. А., Ровенский Д. Я. **Численное моделирование тепло- и массообмена в газофазовом реакторе.**— В кн.: Математическое моделирование. Получение монокристаллов и полупроводниковых структур.— М.: Наука, 1986.

На основе численного решения системы уравнений Навье — Стокса в приближении Буссинеска совместно с уравнениями химической кинетики и переноса каждого компонента изучается влияние геометрии реактора и режимов вдува газовой смеси в него на структуру тепло- и массообмена при выращивании кремниевых однослойных

структур на вертикальном пьедестале. Рассмотрены поведение течения, особенности теплоотдачи и распределение скорости роста пленок вдоль полупериметра аксиального сечения поверхности пьедестала.

Ил. 8. Библиогр. 12 назв.

УДК 548.55

Воронов И. Н., Герасимов Б. П., Погодин А. И., Чурбанов А. Г. **Исследование газодинамики в камере установок выращивания монокристаллов кремния по Чохральскому.**— В кн.: Математическое моделирование. Получение монокристаллов и полупроводниковых структур.— М.: Наука, 1986.

В работе средствами вычислительного эксперимента исследуется структура смешанной конвекции в камере установки выращивания с целью обеспечения устойчивого роста бездислокационных монокристаллов кремния методом Чохральского. Приводятся и обсуждаются результаты расчетов для различных режимов вдува и различных геометрий рассматриваемой области.

Ил. 3. Библиогр. 6 назв.

УДК 548.55

Бакирова О. И. **Численное моделирование процессов зонной плавки на основе решения задачи о фазовом переходе в бинарной системе.**— В кн.: Математическое моделирование. Получение монокристаллов и полупроводниковых структур.— М.: Наука, 1986.

Применение широко известного технологического процесса зонной плавки позволяет получить твердые бинарные растворы заданного состава. В данной работе приведена математическая модель такого процесса, основанная на решении одномерной нестационарной задачи о кристаллизации и плавлении бинарной системы. Рассчитываются распределения температуры и концентрации (в жидкой и твердой зонах) в зависимости от исходных данных (тепловой режим печи и начальные условия для концентрации). Численный метод решения задачи основан на применении консервативных разностных схем на перестраивающихся по решению задачи сетках. Используются неявные разностные схемы и специальный итерационный процесс.

Ил. 6. Библиогр. 7 назв.

УДК 519.6 : 539.379.4

Авдонин Н. А., Вахрамеев С. С., Освенский В. Б. **Постановка и численное решение термоупругопластической задачи с учетом движения дислокаций в плоскостях скольжения кристаллов, выращиваемых из расплава.**— В кн.: Математическое моделирование. Получение монокристаллов и полупроводниковых структур.— М.: Наука, 1986.

Приводится замкнутая постановка упругопластической задачи для монокристаллов с учетом систем скольжения. Для определения плотности дислокаций используются известные соотношения Орована и Гилмана для скорости движения и размножения дислокаций. Разработан численный метод решения. Проводятся расчеты для случая осесимметрического температурного поля. В этом случае предварительно задача сводится к двумерной. Приведены результаты расчетов для конкретного монокристалла.

Ил. 5. Табл. 1. Библиогр. 9 назв.

УДК 532.516.5+536.24

Иванова Г. Ф., Люмкис Е. Д., Мартузан Б. Я., Мартузане Э. Н., Смирнов В. А. **Численное решение задачи совместного определения температурного поля в системе расплав—кристалл и потоков в расплаве в процессе Чохральского.**— В кн.: Математическое моделирование. Получение монокристаллов и полупроводниковых структур.— М.: Наука, 1986.

Исследуется математическая модель процесса выращивания монокристаллов методом Чохральского, учитывающая теплообмен между кристаллом и расплавом как теплопроводностью, так и переизлучением между поверхностью расплава и внешней поверхностью кристалла. Кроме того, учитывается теплообмен излучения с поверхностями, окружающими систему кристалл—расплав, и конвективный теплоперенос в расплаве, вызываемый тепловой и термокапиллярной конвекцией и вращением кристалла и тигля.

В работе обсуждается постановка такой совместной задачи, численные методы ее решения и приводятся результаты расчетов.

Ил. 4. Библиогр. 18 назв.

УДК 536.24 : 548.5

Кузнецов О. А., Повещенко Ю. А., Чернышенко О. В. **Расчет температурных полей при кристаллизации слитков вертикальным методом Бриджмена.**— В кн.: Математическое моделирование. Получение монокристаллов и полупроводниковых структур.— М.: Наука, 1986.

Рассмотрены вопросы моделирования тепловых процессов при кристаллизации слитков вертикальным методом Бриджмена. Предложены двумерная модель, учитывающая нелинейную теплопроводность, фазовый переход, тепловое излучение нагревателя (муфеля). Приведены результаты расчетов.

Ил. 2. Библиогр. 4 назв.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Получение монокристаллов
и полупроводниковых структур

Утверждено к печати
Институтом прикладной математики
им. М. В. Келдыша АН СССР

Редактор Т. С. Смирнова
Художник Ф. П. Буданов
Художественный редактор С. А. Литвак
Технический редактор А. М. Сатарова
Корректоры Р. З. Землянская, Л. В. Лукичева

ИБ № 32206

Сдано в набор 27.01.86
Подписано к печати 21.04.86
Г-01515. Формат 60×90 1/16
Бумага книжно-журнальная
Гарнитура литературная
Печать высокая
Усл. печ. л. 12,5. Усл. кр. отт. 12,5. Уч.-изд. л 13,6
Тираж 1950 экз. Тип. зак. 4757
Цена 2 р. 40 к.

Ордена Трудового Красного Знамени
издательство «Наука»
117864 ГСП-7, Москва В-485
Профсоюзная ул., 90.

2-я типография издательства «Наука»
121099, Москва, Г-99, Шубинский пер., 6.

Издательство «Наука»
готовятся к печати книги:

Магнитные и электронные структуры переходных металлов и сплавов. (Труды Ин-та общей физики. Т. 3). 15 л. 2 р. 30 к.

Сборник посвящен одной из наиболее актуальных проблем физики твердого тела и физики магнитных явлений: выяснению взаимосвязи разнообразных магнитных состояний, реализующихся в переходных металлах и их сплавах, с электронной зонной структурой этих веществ. Приведены результаты комплексных экспериментальных исследований магнитных, кинетических и других свойств ряда переходных и редкоземельных металлов, сплавов и соединений на их основе, выполненных в экстремальных условиях.

Книга рассчитана на специалистов в области физики твердого тела.

Лазерные методы исследований дефектов в полупроводниках и диэлектриках. (Труды Ин-та общей физики. Т. 4). 15 л. 2 р. 30 к.

В сборнике рассмотрены новые методы исследования и диагностики дефектов в полупроводниках и диэлектриках, основанные на экспериментальном и теоретическом изучении физических процессов взаимодействия лазерного излучения с кристаллами: метод нерезонансного рассеяния, лазерного пробоя, двухфотонных переходов, фотоионизации собственных и примесных дефектов, фотопроводимости. При помощи этих методов обнаружены новые типы дефектов в чистых кристаллах германия и кремния, исследованы субмикронные дефекты в сапфире и монокристаллическом кремнии.

Книга рассчитана на специалистов в области квантовой электроники и физики твердого тела.

Волоконная оптика. (Труды Ин-та общей физики. Т. 5). 14 л. 2 р. 10 к.

В сборнике рассмотрены вопросы, связанные с исследованием и применением волоконных световодов как передающей среды для систем связи и как датчиков физических величин. Описаны оптические и физико-механические свойства волоконных световодов, приведены результаты исследования в них нелинейных эффектов, включая солитонный режим распространения световых импульсов.