
Конвективные взаимодействия и устойчивость течений в гидродинамической модели метода Чохральского

О.А. Бессонов, В.И. Полежаев

Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН

Рассматриваются особенности течений для различных чисел Прандтля в модели метода выращивания кристаллов вытягиванием из расплава. Представлена обобщенная диаграмма критических чисел Грасгофа, показывающая зоны возникновения колебания полей течения и температуры в осесимметричной и трехмерной постановках. Обсуждаются особенности структуры и динамики течения в широком диапазоне чисел Прандтля. Рассматривается структура термиков при высоких числах Прандтля, проводится сравнение с результатами эксперимента.

Введение

Колебания температуры расплава в тигле, являющиеся главной причиной полосчатой неоднородности кристаллов, выращиваемых методом вытягивания из расплава, известным как метод Чохральского, вызываются конвективными неустойчивостями, в которых основную роль играет тепловая гравитационная конвекция. Также имеются различные осложняющие факторы, обусловленные влиянием тепловых граничных условий и движениями негравитационного типа (вращение кристалла и (или) тигля, действие сил поверхностного натяжения и др.). Разнородные граничные условия на боковой границе, дне тигля, фронте кристалла и поверхности расплава существенно влияют на развитие конвективных неустойчивостей и смену опасных мод возникновения колебаний. При этом значительно различаются случаи малых, средних и больших чисел Прандтля (Pr). Поэтому даже упрощенная (идеализированная) модель течения в тигле установки для роста кристаллов не укладывается в какую-либо каноническую постановку теории конвективной устойчивости [1].

Вопросы конвективной устойчивости и теплообмена в модели метода Чохральского начали обсуждаться в технологической литературе в конце 70-х годов [2]. При этом применялись результаты простейших модельных постановок, достигших довольно высокого уровня, но все еще далеких от упрощенной технологической модели. Ситуация мало изменилась и позже, к моменту публикации обзора [3], однако, как следует из технологической литературы [4], проблема до сих пор актуальна.

Работы по изучению конвективных процессов в методе Чохральского проводились в Лаборатории математического и физического моделирования в гидродинамике под руководством проф. В.И. Полежаева (1936–2013 гг.)

начиная с 80-х годов. Первоначально использовались упрощенные осесимметричные модели, а также программы линейного анализа устойчивости пространственного течения. С середины 90-х годов началось использование разработанных в коллективе программ прямого численного моделирования пространственных течений в модели метода Чохральского. По мере развития средств вычислительной техники динамические параметры моделируемых конфигураций приблизились к реальным, вплоть до параметров переходных и турбулентных течений в осесимметричном и трехмерном приближениях [5–7]. Обзор результатов начального этапа исследования пространственных течений приведен в [8].

Однако дальнейшее продвижение в этом направлении происходило сравнительно медленно, так как в технологических приложениях тепловая гравитационная конвекция обычно рассматривается совместно с вращением кристалла и (или) тигля [9, 10], что приводит к трудностям в установлении общих закономерностей, аналогичных полученным на простейших моделях. Поэтому в качестве следующего шага представлялось естественным детальное изучение в трехмерной постановке тепловой гравитационной конвекции, как ведущего механизма колебаний, и установление ее закономерностей в отдельности.

Статья [11], в которой проведен расчет колебательных режимов на диаграмме Gr-Pr с нахождением зон максимума критического числа Грасгофа Gr_c и позиций смены опасных мод колебаний, была первой в таком направлении. Ее результаты показали важность понимания взаимодействия элементарных механизмов в замкнутом объеме при комбинированном подводе тепла. Данное направление исследований получило дальнейшее развитие в [12–16]. Однако для технологических приложений представляет интерес более детальное и специализированное рассмотрение особенностей конвективных взаимодействий и неустойчивостей в такой модели.

С учетом этого было проведено масштабное параметрическое исследование устойчивости течений в модели метода Чохральского в широком диапазоне чисел Прандтля [17, 18]. Для этих целей была выбрана конфигурация, использовавшаяся в предыдущих работах авторов. Был проведен анализ критических чисел Грасгофа при различных числах Прандтля для осесимметричного и трехмерного приближений при разных тепловых граничных условиях на поверхности расплава, построены обобщенные карты режимов течений, изучена структура и динамика течений.

В настоящей статье приводятся сводные результаты параметрического исследования для осесимметричного и пространственного режимов моделирования и рассматриваются особенности колебательных течений слабой надкритичности для различных чисел Прандтля в двух вариантах граничных условий, а также производится сравнение с результатами эксперимента. Представляемые результаты получены с помощью эффективного вычислительного кода на параллельных системах с использованием до 16 потоков. Результаты расчетов демонстрируют устойчивость численного метода в очень жестких режимах, когда значения числа Грасгофа достигают $6,6 \cdot 10^8$ в осесимметричном случае и $6 \cdot 10^7$ в пространственном.

1. Математическая модель и численный метод

Установка гидродинамической модели метода Чохральского представляет собой цилиндрический тигель радиуса R_c , заполненный расплавом до высоты H (рис. 1). В центре к поверхности расплава примыкает диск радиуса R_x , имитирующий торец выращиваемого кристалла. Открытая поверхность расплава предполагается плоской, на ней может учитываться зависимость поверхностного натяжения от температуры, а также теплообмен с окружающей средой.

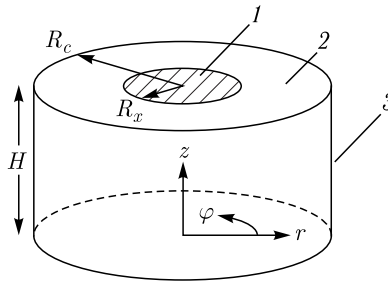


Рис. 1. Гидродинамическая модель метода Чохральского и система координат: 1 — кристалл, 2 — поверхность расплава, 3 — тигель

Численное моделирование основано на решении пространственных нестационарных уравнений Навье–Стокса в приближении Буссинеска для несжимаемой вязкой жидкости в переменных скорость V , давление p , температура θ :

$$\frac{\partial V}{\partial t} + \nabla \cdot (VV) = -\nabla p + \nabla^2 V - \text{Gr} \mathbf{g} \theta, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot V = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \nabla \cdot (V\theta) = \frac{1}{\text{Pr}} \nabla^2 \theta. \quad (3)$$

Здесь $\text{Gr} = g\beta L^3 \Delta T / \nu^2$ — число Грасгофа, $\text{Pr} = \nu / \alpha$ — число Прандтля, L и ΔT — масштабы длины и температуры, β — коэффициент температурного расширения, ν — кинематическая вязкость, α — температуропроводность, $\mathbf{g}$ — вектор силы тяжести. Масштаб скорости определяется как $V_0 = \nu / L$, масштаб времени — $t_0 = L^2 / \nu$. Используется цилиндрическая система координат $0 \leq \varphi \leq 2\pi$, $0 \leq z \leq H$, $0 \leq r \leq R_c$.

В соответствии с постановкой задачи (см. [8] и цитируемую литературу) геометрические параметры расчета определены следующим образом: $R_c = 1$, $H = 1$, $R_x = 0,4$. Тигель и кристалл полагаются неподвижными. На поверхности расплава выполняются условия скольжения: $\partial V_r / \partial z = 0$, $\partial V_\varphi / \partial z = 0$, $V_z = 0$.

Используются следующие граничные условия для температуры: нагрев на боковой цилиндрической границе $\theta = 1$, охлаждение на границе расплава и кристалла $\theta = 0$, тепловая изоляция на дне тигля $\partial \theta / \partial z = 0$. На поверхно-

сти расплава применяются два варианта условий: а) с линейным профилем температуры $\theta = (r - R_x)/(R_c - R_x)$, б) с тепловой изоляцией $\partial\theta/\partial z = 0$.

Для решения уравнений (1)–(3) используется метод конечных объемов. Применяются разнесенные сетки со сгущениями около дна тигля и у поверхности расплава. Дискретизация конвективных членов производится по схеме с квадратичными интерполяциями против потока. Для температуры при высоких значениях числа Прандтля используется оригинальная монотонная адаптивная схема с ограничителем потока, обеспечивающая отсутствие нефизических осцилляций в сочетании со вторым порядком точности.

Уравнения (1)–(3) решаются отдельно, с использованием метода проекций и частично неявной схемы интегрирования по времени, с неявной трактовкой некоторых диффузионных членов и связыванием уравнений (1) и (3) через половину временного шага. Для явных членов эта схема соответствует методу Рунге–Кутты второго порядка, а для неявных — методу Кранка–Николсона.

Для решения уравнения Пуассона для давления применен вновь разработанный экономичный прямой метод, относящийся к классу методов разделения переменных, с использованием быстрого преобразования Фурье в азимутальном направлении и разложением по базису собственных функций оператора Лапласа в осевом направлении [19]. Применение такого метода вместо традиционного метода Фурье позволяет обеспечить неравномерность расчетной сетки для моделирования процессов в тонких погранслоях у поверхности растущего кристалла и около дна тигля. Новый метод решения уравнения Пуассона также обладает хорошим потенциалом распараллеливания. Расчетная программа распараллелена для многопроцессорных и многоядерных вычислительных систем с общей памятью в модели OpenMP [19].

Численный метод разрабатывался в соответствии с концепцией прецизионного вычислительного кода, подразумевающей сбалансированность всех элементов расчетной схемы с точки зрения точности, адекватности и вычислительных затрат. При этом не предполагались использование схем дискретизации и интегрирования по времени с точностью выше второго порядка, совместное решение систем уравнений и прочие дорогостоящие усложнения, поскольку при полномасштабном совместном применении они многократно увеличивают вычислительные затраты без адекватного улучшения качества расчета, а при применении по отдельности не достигают ожидаемого эффекта из-за несогласованности с остальными частями алгоритма.

Метод является прямым и не содержит дорогостоящих итерационных этапов. Благодаря высокой эффективности он может использоваться для детального моделирования ламинарных, переходных и турбулентных пространственных течений на подробных сетках. Результаты сравнения с экспериментом показывают, что используемый метод обеспечивает высокую точность и реалистичность моделирования сложных динамических пространственных течений. Развернутое изложение численного метода представлено в [20].

2. Критические числа и сводная карта конвективных неустойчивостей

Тепловая гравитационная конвекция расплава в тигле вызывается действием двух потенциально возможных механизмов: нарушением механического равновесия в связи с подводом тепла к боковой поверхности тигля, и потерей устойчивости равновесия в связи с отводом тепла от торца кристалла, охлаждаемого сверху. Первый механизм вызывает глобальное, или подъемно-опускное течение, захватывающее весь объем жидкости, а второй — локальное течение, имеющее характер струй либо ячеек (термиков), опускающихся от поверхности расплава вниз. В этом случае при малых уровнях расплава доминирующим становится ячейковый режим конвекции Рэлея–Бенара [14]. Возникающие при определенных условиях колебания полей течения и температуры отличаются особенностями, соответствующими этим фундаментальным механизмам. Эти виды течения для тепловой гравитационной конвекции изучены на модельных задачах, таких как вертикальный слой при боковом нагреве и горизонтальный слой при подогреве снизу [1]. Однако конвекция в тигле характеризуется наличием обоих механизмов и их взаимодействием, которое приводит, в зависимости от физических свойств расплава, к доминированию того или другого вида течения либо к некоторому динамическому равновесию.

Взаимодействие элементарных механизмов тепловой гравитационной конвекции расплава в тигле, определяющее пространственную структуру, условия появления конвективных неустойчивостей, колебаний полей течения и температуры, до недавнего времени в технологической литературе по модели метода Чохральского с этих позиций не рассматривалось. Между тем конвективные взаимодействия важны для понимания роли тепловой гравитационной конвекции ввиду широкого диапазона применяемых рабочих веществ. В то время как расплавы полупроводников характеризуются числами Прандтля в диапазоне 0,01–0,1, для материалов оптоэлектроники характерны значения $Pr \gg 1$. Такой диапазон параметров определяет специфику в управлении процессами переноса, что необходимо в связи с высокими требованиями к поддержанию однородности поля температуры. Критические числа Грасгофа в зависимости от чисел Прандтля расплава являются основой для такого выбора.

Первые значения критических чисел Грасгофа (Gr_c) для тестовой конфигурации при $Pr = 0,05$ были получены для осесимметричного режима методом прямого численного решения и для пространственного режима на основе решения линеаризованных уравнений для трехмерных возмущений [5], что положило начало исследованию колебаний при конвективных взаимодействиях в модели Чохральского в количественном виде. Позднее было проведено параметрическое исследование для диапазона числа Прандтля от 0,01 до 6,5 в осесимметричной модели с использованием такой же геометрической конфигурации в варианте с теплоизолированной поверхностью расплава [12, 14]. С учетом дополнительных значений, полученных для пространственного режима с линейным профилем температуры на поверхности расплава, был построен первый вариант карты режимов

и сделан вывод о наличии на ней точки смены опасных мод возникновения колебаний, когда течение при возрастании числа Грасгофа теряет устойчивость раньше потери осевой симметрии. Были выделены также зоны стабилизации, где Gr_c принимает максимальное значение.

В настоящей работе проведен расчет Gr_c по широкому диапазону значений числа Прандтля в двух вариантах температурных граничных условий на поверхности расплава как для осесимметричного, так и для пространственного режимов моделирования.

Для основных вычислений использовались сетки размером 120×120 (z, r) и $64 \times 87 \times 80$ (φ, z, r) соответственно для осесимметричных и пространственных расчетов со сгущениями в пропорции 1:4 около дна тигля и у поверхности расплава. Такие сетки являются достаточно подробными для разрешения тонких пограничных слоев и мелких пространственных структур. Для режимов с высоким значением числа Грасгофа ($Gr > 10^7$) проводились дополнительные уточняющие вычисления с использованием более подробных сеток размером 230×240 , 230×480 (z, r) и $64 \times 120 \times 120$ (φ, z, r). Проверка значений числа Gr проводилась с шагом геометрической прогрессии, равным 1,1, что позволило обеспечить точность определения критических чисел на уровне 5%. В качестве критического принималось последнее значение числа Gr , при котором течение оставалось стационарным (для двумерной модели) или осесимметричным (для трехмерной). Всего было получено и обработано более 100 режимов течения, по два режима на каждое критическое число — предкритический и сверхкритический. С учетом последовательных приближений при поиске критических чисел, а также уточняющих вычислений было проведено около 400 сеансов счета. Продолжительность одного сеанса варьировалась от нескольких минут до нескольких часов в осесимметричной модели, и от десятков минут до десятков часов в пространственной модели при использовании от 4 до 16 потоков на параллельных вычислительных системах.

Таблица 1 и рис. 2 дают полную сводку полученных численно зависимостей $Gr_c(Pr)$ в диапазоне $0,01 < Pr < 30$, а рис. 3 дополнительно иллюстрирует результаты для варианта с теплоизолированной поверхностью наиболее характерными картинами течений. Кривые на рис. 2 и 3 разделяют зоны с различными режимами течения. Для точек с координатами (Pr, Gr), расположенных на диаграмме выше соответствующей кривой, течение имеет колебательный характер, а для точек, расположенных ниже, колебания отсутствуют. На карте режимов также выделены зоны стабилизации и позиции смены опасных мод.

Основные режимы показаны буквами: *A* — течение всегда стационарное; *B* — стационарное только в осесимметричном режиме, а в пространственном нестационарное и неосесимметричное; *C* — всегда нестационарное, и при этом неосесимметричное в пространственном режиме; *D* — нестационарное, но в пространственном режиме моделирования сохраняет осевую симметрию и совпадает с течением в осесимметричной модели. По сведениям авторов, представленные результаты — в своем роде единственные в существующей литературе в экспериментальном и теоретическом плане. В известных лабораторных экспериментах по тепловой гравитационной кон-

Таблица 1

Pr	Линейный профиль на поверхности расплава		Теплоизолированная поверхность расплава	
	Gr _c (2D)	Gr _c (3D)	Gr _c (2D)	Gr _c (3D)
0,01	$3,8 \cdot 10^6$	$6,8 \cdot 10^5$	$7 \cdot 10^6$	$1,15 \cdot 10^6$
0,03	$5 \cdot 10^6$	$1 \cdot 10^6$	$6,2 \cdot 10^6$	$9,5 \cdot 10^5$
0,05	$2,4 \cdot 10^6$	$9 \cdot 10^5$	$1,6 \cdot 10^7$	$1,1 \cdot 10^6$
0,07	—	—	$2,1 \cdot 10^7$	$2 \cdot 10^6$
0,1	$4 \cdot 10^6$	$2 \cdot 10^6$	$4 \cdot 10^7$	$4 \cdot 10^6$
0,125	—	—	$9 \cdot 10^7$	$9,5 \cdot 10^6$
0,14	—	—	—	$2,8 \cdot 10^7$
0,145	—	—	—	$4,8 \cdot 10^7$
0,15	—	—	$2,4 \cdot 10^8$	$5,3 \cdot 10^7$
0,17	—	—	—	$4,8 \cdot 10^7$
0,2	$5,2 \cdot 10^6$	—	$6 \cdot 10^8$	$4,2 \cdot 10^7$
0,25	—	—	—	$3,6 \cdot 10^7$
0,3	$1,3 \cdot 10^7$	$3,6 \cdot 10^6$	$2 \cdot 10^8$	$2,8 \cdot 10^7$
0,4	—	—	—	$4 \cdot 10^7$
0,5	—	—	$6,8 \cdot 10^7$	$5 \cdot 10^7$
0,65	$1,8 \cdot 10^7$	$2,5 \cdot 10^6$	—	—
0,7	—	—	—	$3,6 \cdot 10^7$
1	$3,3 \cdot 10^7$	$3,6 \cdot 10^6$	$1,9 \cdot 10^7$	$2,2 \cdot 10^7$
2	$1,9 \cdot 10^7$	$1,8 \cdot 10^6$	—	—
3	$1,1 \cdot 10^7$	$1 \cdot 10^6$	$2,7 \cdot 10^6$	$3,2 \cdot 10^6$
6,5	$1,8 \cdot 10^6$	$7,6 \cdot 10^5$	$4,5 \cdot 10^5$	$9 \cdot 10^5$
15	$3 \cdot 10^5$	$3,6 \cdot 10^5$	—	—
30	$7 \cdot 10^4$	$1,1 \cdot 10^5$	—	—

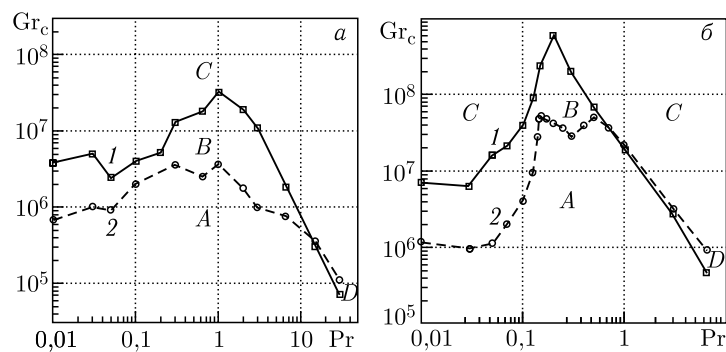


Рис. 2. Зависимость критического числа Грасгофа Gr_c от Pr для осесимметричного (1) и пространственного (2) режимов моделирования в двух вариантах граничных условий на поверхности расплава: *а* — с линейным профилем температуры, *б* — с теплоизолированной поверхностью

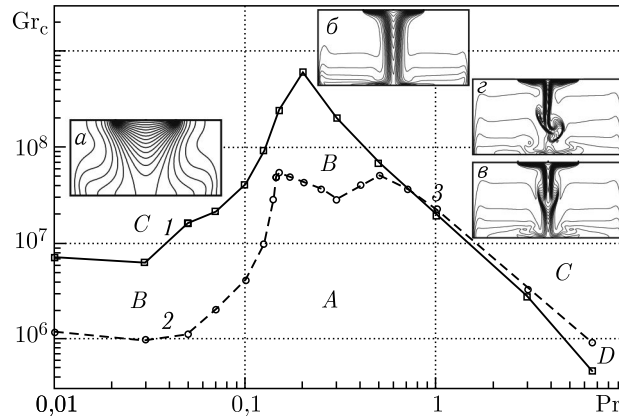


Рис. 3. Сводная карта режимов неустойчивостей тепловой гравитационной конвекции в координатах Pr – Gr_c в варианте с теплоизолированной поверхностью расплава: 1 — осесимметричный режим моделирования, 2 — пространственный режим, 3 — точка смены опасных мод колебаний. Характеристики течения: А — стационарное в обоих режимах моделирования, В — нестационарное и неосесимметричное в пространственном режиме, С — всегда нестационарное, D — нестационарное с сохранением осевой симметрии. Характерные картины течения: а — низкие Pr , преобладание глобального механизма конвекции; б — средние Pr , зона стабилизации; в — высокие Pr , неустойчивость типа Рэлея–Бенара с осесимметричными термиками; г — высокие Pr , неосесимметричные термики

векции в тигле (см., например, [21–24]) данных о критических значениях чисел Грасгофа нет.

Отметим, что максимумы критического числа Грасгофа во всех режимах примерно на два порядка выше значений Gr_c при больших Pr . Физический смысл такой стабилизации следует из особенностей конвективного взаимодействия: так как при малых Pr доминирует конвекция, возникающая из-за бокового подвода тепла к тиглю, а при больших — конвективная неустойчивость, вызванная отделением струи (термика) от поверхности кристалла, то максимальное значение Gr_c должно находиться в промежуточном диапазоне чисел Pr . Взаимодействие механизмов конвекции в этом диапазоне параметров приводит к динамическому равновесию, что стабилизирует тепловую гравитационную конвекцию в целом. При этом максимальное значение Gr_c для линейного профиля температуры на поверхности расплава более чем на порядок ниже, чем для теплоизолированной поверхности как для осесимметричного, так и для пространственного режимов моделирования. Это объясняется тем, что горизонтальный градиент температуры на поверхности расплава действует как дополнительная движущая сила глобального течения, сносящего термики, образующиеся из-за конвективной неустойчивости, к оси симметрии тигля и далее вниз.

На рис. 2 можно видеть, что точки смены опасных мод колебаний соответствуют значениям $Pr \geq 15$ для линейного профиля температуры на поверхности расплава (а), и $Pr \geq 1$ для теплоизолированной поверхности (б). По мере возрастания числа Прандтля увеличивается диапазон чисел

Грасгофа, в котором двумерная мода колебаний является более опасной, чем трехмерная. Позиция смены мод соответствует смене доминирующего механизма конвекции с глобального на локальный, приводящий к образованию термиков. Периодическое отделение термиков от кристалла формирует колебательный режим течения, однако в определенном диапазоне чисел Грасгофа осевая симметрия сохраняется.

Помимо таких сравнительно простых сведений, получение которых стало возможным на последних этапах, существенное значение для управления процессами тепло- и массообмена при росте кристаллов имеют структуры конвективных неустойчивостей, различающиеся при низких и высоких Pr , что иллюстрируется картинками течений $a-g$ на рис. 3. Эти различия определяются характером конвективных взаимодействий в тигле, обусловленным боковым подводом тепла и его отводом в верхней части тигля. При низких и средних Pr преобладает механизм, формирующий глобальное течение (рис. 3, $a, б$) и связанный с ним тип конвективной неустойчивости, а при высоких начинает проявляться локальный релей-бенаровский механизм, при котором образуются ячейки (термики), которые сносятся слабым течением глобального типа [4]. Смена опасных мод обусловлена потерей симметрии этих термиков, как показано на рис. 3, $в, г$.

3. Особенности течения и теплообмена в осесимметричных режимах моделирования

Особый интерес для понимания конвективных взаимодействий представляет рассмотрение стационарных предкритических режимов течения в сопоставлении с колебательными сверхкритическими режимами.

На рис. 4, $a, б$ показаны характеристики течения в осесимметричной модели для предкритических режимов в варианте с линейным профилем температуры на поверхности расплава. Представлены три режима для наиболее характерных значений числа Прандтля — низкого, среднего и высокого. В каждом из показанных режимов течение обладает своими особенностями. При малых и средних Pr доминирует глобальный механизм, и особенности течения определяются значением соответствующего критического числа Грасгофа Gr_c . В частности, режим $Pr = 1$ (2), при котором значение Gr_c максимальное, соответствует зоне стабилизации и характеризуется наличием отчетливого вторичного вихря внизу справа у внешней границы тигля (2, a), в то время как течение в менее интенсивном режиме $Pr = 0,1$ (1) не имеет ярко выраженных особенностей. С другой стороны, при высоком $Pr = 6,5$ доминирует локальный механизм, который проявляется в виде струи, опускающейся вниз от холодной границы кристалла (3). Ударяясь о дно тигля, эта струя формирует вторичный вихрь в окрестности оси симметрии (3, $a, б$).

На рис. 4, $в-д$ показаны профиль температуры на теплоизолированном дне тигля и профили локального числа Нуссельта на верхней и боковой границах, а в табл. 2 (вариант a) представлены значения средних чисел Нуссельта $\langle Nu \rangle$. Наибольшие значения чисел Nu достигаются в режиме (2), соответствующем зоне стабилизации, что объясняется высокой скоростью

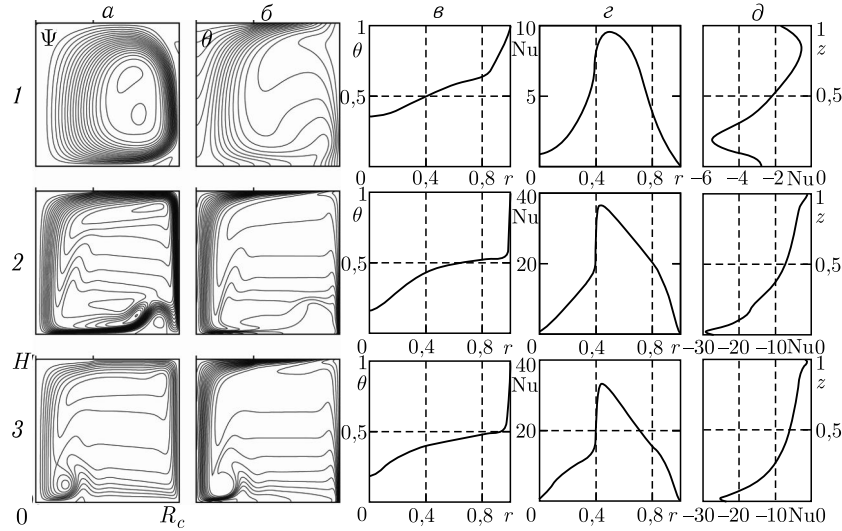


Рис. 4. Предкритические режимы течения в осесимметричной модели, вариант с линейным профилем температуры на поверхности расплава: 1 — $Pr = 0,1$, $Gr = 4 \cdot 10^6$, 2 — $Pr = 1$, $Gr = 3,3 \cdot 10^7$, 3 — $Pr = 6,5$, $Gr = 1,8 \cdot 10^6$; линии тока (а) и изотермы (б) в половине плоскости сечения, профили температуры θ на дне полости (в) и Nu на верхней (г) и на цилиндрической (д) границах

Таблица 2

Вариант	Pr	Gr	$\langle Nu \rangle$ (торец кристалла)	$\langle Nu \rangle$ (поверхность расплава)	$\langle Nu \rangle$ (боковая стенка тигля)
а	0,1	$4 \cdot 10^6$	3,6792	5,1848	-2,4720
а	1	$3,3 \cdot 10^7$	11,616	21,186	-9,8274
а	6,5	$1,8 \cdot 10^6$	10,497	17,807	-8,3187
б	0,05	$1,6 \cdot 10^7$	12,008	—	-0,9607
б	0,2	$6 \cdot 10^8$	41,667	—	-3,3334
б	6,5	$4,5 \cdot 10^5$	24,29	—	-1,943

Примечание: а — линейный профиль температуры на поверхности расплава; б — теплоизолированная поверхность

течения и, как следствие, интенсивным отводом (подводом) тепла у границ. Однако и в режиме (3) с более низким Gr_c значения Nu тоже высокие, что связано с малой толщиной температурных погранслоев при большом значении Pr и, как следствие, высоким уровнем диффузионного теплообмена. Заметим, что во всех случаях в стационарных режимах баланс полных тепловых потоков соблюдается с машинной точностью.

На рис. 5 показаны характеристики течения и теплообмена для трех аналогичных режимов в варианте с теплоизолированной поверхностью расплава. Здесь режим $Pr = 0,2$ (2), соответствующий зоне стабилизации, характеризуется рекордно высоким для стационарного течения значени-

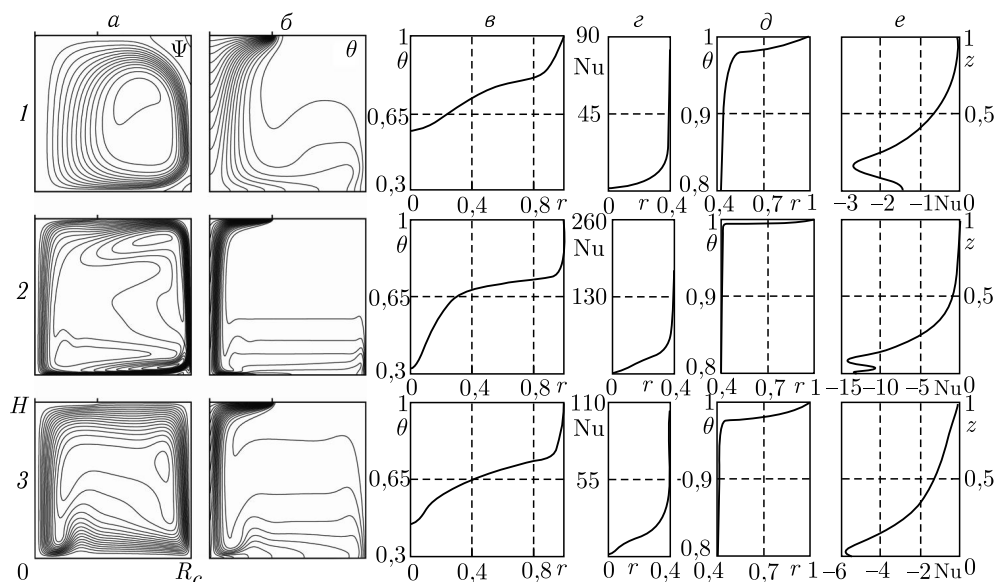


Рис. 5. Предкритические режимы течения в осесимметричной модели, вариант с теплоизолированной поверхностью расплава: 1 — $Pr = 0,05$, $Gr = 1,6 \cdot 10^7$, 2 — $Pr = 0,2$, $Gr = 6 \cdot 10^8$, 3 — $Pr = 6,5$, $Gr = 4,5 \cdot 10^5$; линии тока (а) и изотермы (б) в половине плоскости сечения, профили температуры θ на дне полости (в) и на поверхности расплава (д), профили Nu на торце кристалла (з) и на цилиндрической границе (е)

ем $Gr_c = 6 \cdot 10^8$, при котором скорость достигает величины $|V| \approx 30 \cdot 10^3$. При такой скорости основное движение жидкости происходит в тонких слоях вблизи границ. В свою очередь, при $Pr = 6,5$ (3) характер течения определяется локальным механизмом. При этом, несмотря на очень низкое значение $Gr_c = 4,5 \cdot 10^5$, интенсивность опускающейся струи достаточно для формирования вторичного вихря около дна тигля (3, а, б).

На рис. 5, в–е представлены профили температуры и локального Nu на различных границах, а в табл. 2 (вариант б) — значения средних чисел $\langle Nu \rangle$. Так же, как и в варианте а, наибольшее значение Nu достигается в зоне стабилизации (2), но и в режиме (3) с низким Gr_c значения Nu тоже достаточно высокие из-за малой толщины температурных погранслоев при большом Pr . Из особенностей теплообмена для режима (2) можно отметить сложный профиль локального числа Нуссельта в нижней части боковой стенки тигля (2, е), обусловленный маленьким вторичным вихрем, едва различимым внизу справа на рисунке линий тока (2, а). Также следует обратить внимание на особенность на ребре кристалла, где градиент температуры и локальное число Nu достигают очень высоких значений (з, д), что является спецификой варианта с теплоизолированной свободной поверхностью. Картины течения, показанные на рис. 4 и 5, и соответствующие значения Gr_c согласуются с полученными в [5, 8, 14].

Концентрация тепловых потоков на верхней границе в связи с существенным различием поверхностей подвода и отвода тепла (табл. 2) создает

значительные температурные неоднородности. Сведения о теплообмене на границе тигля ограничены (см., например, измерения и расчеты [22]). Приводимые на рис. 4 и 5 данные показывают сложную картину локального теплообмена на фронте кристалла, поверхности расплава, боковой поверхности и дне тигля, зависящую от режимов на диаграмме Gr–Pr и существенно различающуюся в случаях разных граничных условий. Такие данные, в полном объеме в литературе не встречавшиеся, проясняют картину конвективных взаимодействий и их влияние на колебания температуры расплава и теплообмен. Существенная неравномерность распределения температуры на поверхности расплава указывает на возможный вклад термокапиллярной конвекции, который должен различаться с изменением температурных градиентов на поверхности расплава (см. расчеты этого механизма конвекции в отдельности [25, 26]).

При превышении критического значения числа Грасгофа течение становится колебательным. Сверхкритические течения при малых Pr характеризуются плавной перестройкой двух- и трехвихревых структур и низкой амплитудой периодических колебаний. При средних Pr, соответствующих зоне стабилизации, колебания становятся непериодическими. Например, в варианте с теплоизолированной поверхностью расплава при $Pr = 0,2$, $Gr = 6,6 \cdot 10^8$ происходит зарождение и хаотическое перемещение интенсивных вихрей на дне и боковой стенке тигля. Похожее поведение наблюдается и в окрестностях зоны стабилизации в варианте с линейным профилем температуры при $Pr = 1$. Однако здесь для достижения существенно стационарного режима течения пришлось значительно увеличить число Gr с $3,3 \cdot 10^7$ до 10^8 , и при этом интенсивность зарождения и перемещения вихрей оказалась более слабой.

Наибольший интерес представляют картины колебательного течения при больших числах Прандтля. На рис. 6 показаны развертки по времени при $Pr = 6,5$ для двух вариантов граничных условий. Здесь преобладает локальный механизм течения, подобный неустойчивости Рэлея–Бенара, с периодическим отделением термиков от холодной границы кристалла. Течения такого типа ранее воспроизводились в [12, 14], наблюдались экспериментально в [21, 22] и более подробно анализировались в [16].

Неустойчивость типа Рэлея–Бенара в варианте с линейным профилем температуры (а) выражена более ярко. При этом колебания не совсем периодические, а термики имеют нерегулярную структуру, приблизительно повторяющуюся на каждом периоде колебаний. В пространственном представлении термик имеет форму тора, отстоящего от оси тигля. В конце периода термик сближается с осью, и в результате формируется узкая струя, растекающаяся по дну полости.

В варианте с теплоизолированной поверхностью расплава (б) преобладает опускное течение вдоль оси. Здесь термик выглядит как утолщение центральной струи, а колебания течения имеют чисто периодический характер. Данный режим характерен тем, что он находится в зоне смены опасных мод возникновения колебаний, когда течение при возрастании числа Грасгофа

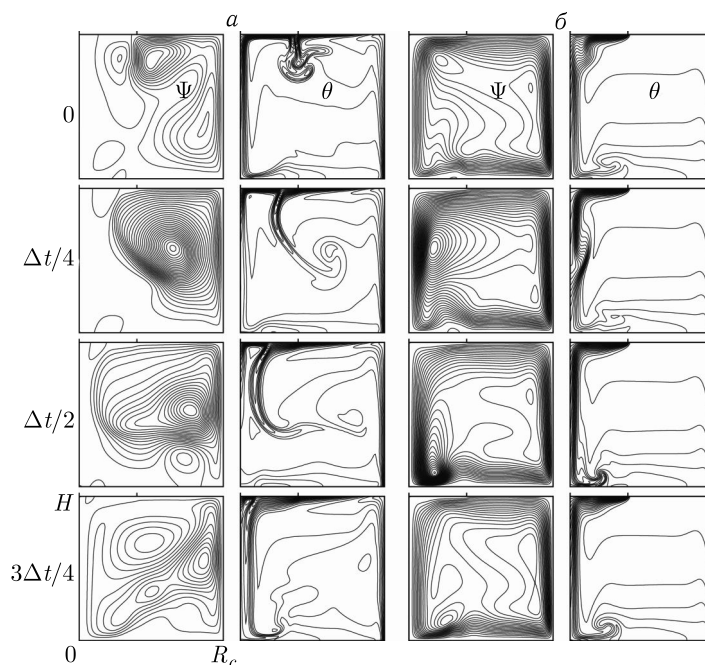


Рис. 6. Колебательные режимы течения в осесимметричной модели, варианты с линейным профилем температуры $Pr = 6,5$, $Gr = 2 \cdot 10^6$ (а) и с теплоизолированной поверхностью расплава $Pr = 6,5$, $Gr = 8 \cdot 10^5$ (б); линии тока Ψ и изотермы θ в половине плоскости сечения в последовательные моменты времени на одном периоде колебаний

теряет устойчивость раньше потери осевой симметрии. Соответственно, результаты расчета данного режима в осесимметричной и пространственной моделях совпадают.

4. Пространственные эффекты конвективных взаимодействий при низких и средних числах Прандтля

Перейдем к рассмотрению сверхкритических неосесимметричных режимов. Для обоих вариантов граничных условий выбраны по три характерных значения числа Прандтля: низкое, относящееся к левой части графиков (рис. 2), среднее, соответствующее максимуму Gr_c , и высокое, находящееся в зоне смены мод колебаний.

На рис. 7 показаны мгновенные картины течения для низких и средних значений Pr , при которых доминирует глобальный механизм конвекции. Здесь для обоих вариантов граничных условий имеет место колебательный режим течения, характеризующийся наличием геометрической симметрии в плоскости (φ, r) . Наиболее отчетливо геометрическая симметрия проявляется на графике изолиний отклонения температуры вблизи дна тигля (рис. 7, г). Отклонения температуры от среднего значения вызваны вертикально ориентированными вихревыми структурами. Эти структуры

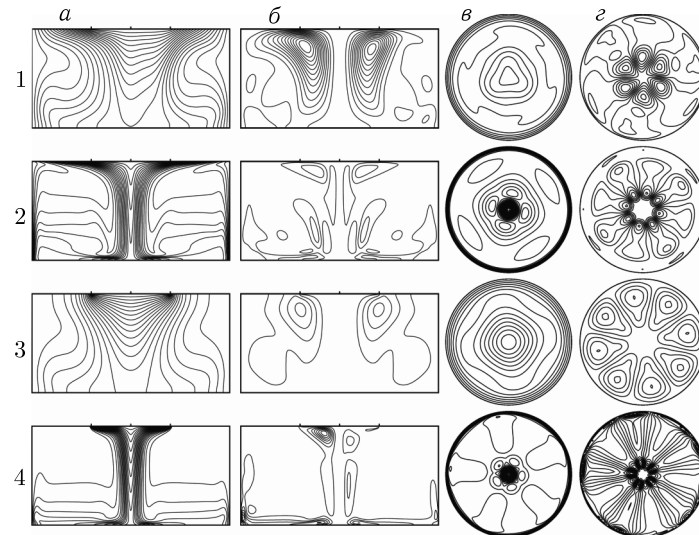


Рис. 7. Колебательный режим течения, варианты с линейным профилем температуры (1, 2) и с теплоизолированной поверхностью расплава (3, 4); изотермы θ и изолинии отклонения температуры от среднего значения $\delta\theta$ в вертикальном (а, б) и в горизонтальном сечениях вблизи дна полости (в, г): 1–4 — $(Pr, Gr) = (0,05, 9,5 \cdot 10^5), (1, 4,5 \cdot 10^6), (0,03, 1,1 \cdot 10^6), (0,15, 6 \cdot 10^7)$

организованы в виде вихревых пар, напоминающих по своему виду вихри Тейлора–Гертлера. Подобные структуры, по-видимому, являются типичными для пространственной колебательной неустойчивости, что подтверждается исследованиями динамики и пространственной структуры колебательной конвекции Марагони [25, 16].

Качественно картины течения при низких и средних значениях Pr совпадают, но при средних Pr вертикальная струя жидкости в середине полости имеет более выраженный характер. Особенно отчетливо это проявляется в режиме с теплоизолированной поверхностью расплава при $Pr = 0,15$, который соответствует зоне стабилизации и характеризуется очень высоким значением $Gr = 6 \cdot 10^7$ (рис. 7, 4).

На рис. 8 показана динамика течения в двух режимах с линейным профилем температуры на поверхности расплава. Картины течения представлены в виде изолиний отклонения температуры в трех горизонтальных сечениях в последовательные моменты времени на интервале, приблизительно равном одному периоду колебаний. Хорошо видна перестройка вертикально ориентированных вихревых структур. Этих вихри зарождаются в верхней части полости под поверхностью расплава (рис. 8, в, е) и далее развиваются в спадающей струе жидкости в середине полости. Общая картина течения и динамика вихревых структур аналогичны картинам пространственных течений различной природы со слабой надкритичностью [16, 25, 26].

В варианте с теплоизолированной поверхностью расплава с низким числом Прандтля ($Pr = 0,03$) динамика течения близка к показанной на рис. 8, а–в для аналогичного режима с линейным профилем температуры.

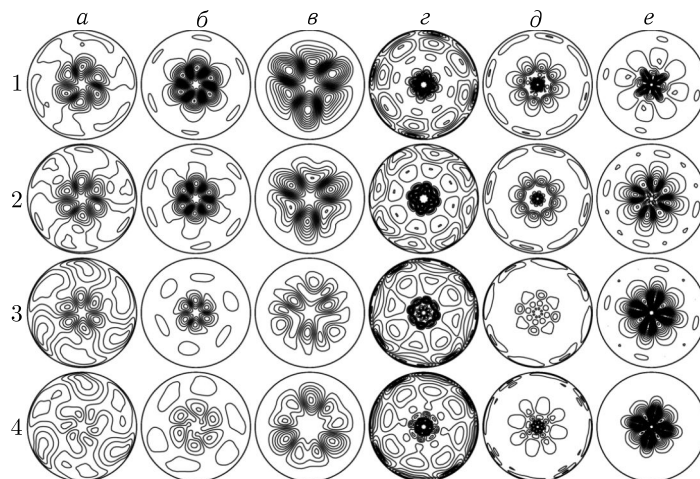


Рис. 8. Колебательный режим течения, варианты с линейным профилем температуры на поверхности расплава $Pr = 0,05$, $Gr = 9,5 \cdot 10^5$ (a – $в$) и $Pr = 1$, $Gr = 4,5 \cdot 10^6$ ($г$ – $е$); изолинии отклонения температуры от среднего значения $\delta\theta$ в горизонтальных сечениях $z = 0,2$ ($a, г$), $0,5$ ($б, д$) и $0,95$ ($в, е$) в последовательные моменты времени

Различия между этими режимами проявляется только в типе геометрической симметрии: в первом случае волновое число равно четырем, во втором — трем.

В свою очередь течение в варианте с теплоизолированной поверхностью при $Pr = 0,15$, соответствующем зоне стабилизации с большим значением Gr_c , характеризуется очень высокой интенсивностью и не строго периодическим характером колебаний. На каждом периоде течение воспроизводится в отличающемся виде, но в целом сохраняет подобие геометрической симметрии с волновым числом, равным пяти. Однако при этом симметрия изолиний в горизонтальных сечениях, как правило, нарушена (рис. 7, 4в и 4г).

Представленные течения, обладающие геометрической симметрией и имеющие периодический характер, характерны для режимов со слабой

Таблица 3

Вариант	Pr	Gr	κ	T
a	0,05	$9,5 \cdot 10^5$	3	$5,8 \cdot 10^{-3}$
a	1	$4,5 \cdot 10^6$	4	$3,3 \cdot 10^{-3}$
a	30	$2 \cdot 10^5$	—	$2,8 \cdot 10^{-2}$
$б$	0,03	$1,1 \cdot 10^6$	4	$3,1 \cdot 10^{-3}$
$б$	0,15	$6 \cdot 10^7$	5	$1,1 \cdot 10^{-3}$
$б$	6,5	$1 \cdot 10^6$	—	$4 \cdot 10^{-3}$

Примечание: a — линейный профиль температуры на поверхности расплава; $б$ — теплоизолированная поверхность

надкритичностью. При дальнейшем повышении Gr происходит нарушение периодичности и разрушение симметричной структуры. Аналогичное разрушение с переходом в нерегулярный режим течения наблюдается в сверхкритическом режиме конвекции Марангони (см. рис. 5, [26]).

В табл. 3 приведены основные характеристики рассмотренных сверхкритических режимов течения — тип геометрической симметрии (волновое число κ) и период колебаний T .

5. Особенности колебательных течений и динамика термиков при высоких числах Прандтля

Особый интерес представляет рассмотрение течений при высоких Pr , где преобладает локальный механизм нарушения динамического равновесия с периодическим отпаданием термиков от холодной границы кристалла, подобный неустойчивости типа Рэлея–Бенара. Такие режимы находятся в зоне смены мод возникновения колебаний, когда течение становится неустойчивым при меньшем значении Gr , чем происходит потеря осевой симметрии.

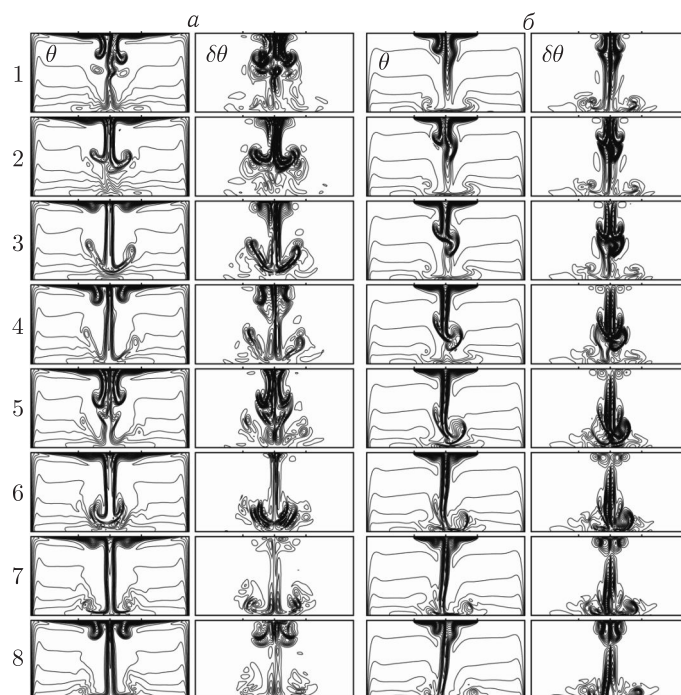


Рис. 9. Колебательный режим течения, варианты с линейным профилем температуры $Pr = 30$, $Gr = 2 \cdot 10^5$ (а) и с теплоизолированной поверхностью расплава $Pr = 6,5$, $Gr = 1 \cdot 10^6$ (б); изотермы θ и изолинии отклонения температуры от среднего значения $\delta\theta$ в вертикальном сечении в последовательные моменты времени на одном периоде колебаний

На рис. 9 показаны развертки по времени на одном периоде колебаний для двух вариантов граничных условий. В обоих вариантах неустойчивость типа Рэлея–Бенара имеет ярко выраженный характер, с формированием большого термика, периодически отпадающего от кристалла. В варианте с линейным профилем (рис. 9, *а*) на одном периоде колебаний последовательно образуются два термика — более крупный в первой фазе периода (1–4) и более мелкий во второй (5–8). В варианте с теплоизолированной поверхностью расплава период колебательного процесса состоит из одной фазы (рис. 9, *б*).

Подобная структура термиков также наблюдалась в [16], где на рис. 8, 9 показан характер динамического вихревого течения в термике и визуализированы пространственные траектории частиц жидкости.

Для представления на рис. 9 подобраны вертикальные сечения, хорошо иллюстрирующие заметное нарушение осевой симметрии термика, опускающегося в потоке жидкости. При превышении критического числа Gr_c термик, имеющий форму шляпки гриба, теряет устойчивость, один край термика проваливается, и происходит потеря симметрии. Данный эффект напоминает неустойчивое поведение парашюта при отсутствии стабилизирующего отверстия и недостатке нагрузки.

Картины изолиний отклонения температуры от среднего азимутального значения $\delta\theta$ на рис. 9 показывают, что нарушение осевой симметрии поля температуры наблюдается только в центральной части полости. При этом развитие неосесимметричных проявлений идет сверху вниз, по мере разрушения симметричной структуры термика. В плоскости (φ, r) картина неосесимметричных проявлений носит нерегулярный характер и для рассматриваемых режимов особого интереса не представляет, так как эти проявления убывают по мере приближения к поверхности расплава.

На рис. 10 картина течения при $Pr = 6,5$, $Gr = 10^6$ в варианте с теплоизолированной поверхностью сопоставляется с результатами эксперимента [21]. Этот пример характеризуется высокой динамикой нестационарного процесса, когда скорость движения головки термика достигает половины максимальной скорости движения жидкости в вертикальном направлении. Подобная динамика накладывает высокие требования к дискретизации конвективных членов уравнения переноса температуры (3) при больших числах Прандтля. Реализованная в данной работе схема с ограничителем позволяет избежать нефизических осцилляций при сохранении высокой точности дискретизации.

Параметры эксперимента несколько отличаются от расчетных: $Pr = 28$, $Gr = 4 \cdot 10^5$, $R_x = 0,35$, граничные условия для температуры достоверно не известны. Несмотря на это, картины течения в экспериментальном и расчетном режимах очень хорошо совпадают. При этом по результатам расчета точно воспроизводится динамика развития термика и его неосесимметричная структура. Кажущиеся различия в толщине стенок головки термика объясняются особенностями оптической визуализации в эксперименте и отображения в виде изотерм в расчете. По сведениям авторов, подобные результаты расчетов ранее в литературе не встречались и получены впервые.

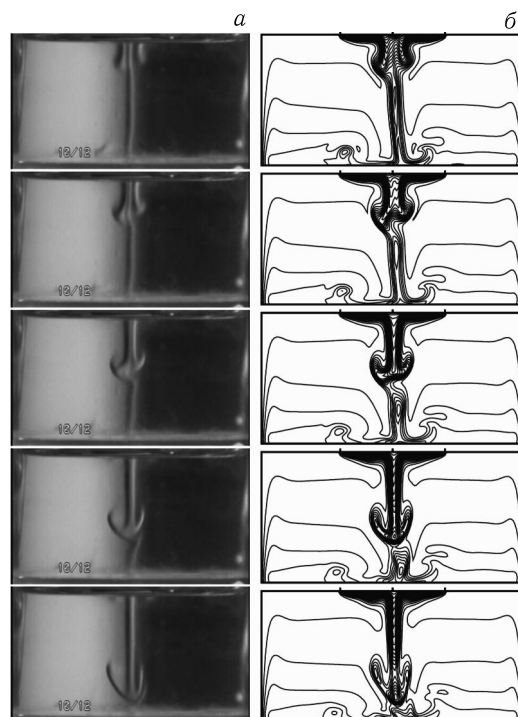


Рис. 10. Сравнение результатов эксперимента [21] (*а*) с расчетом в варианте с теплоизолированной поверхностью расплава при $Pr = 6,5$, $Gr = 10^6$ (*б*); показаны картины течения в последовательные моменты времени

Сравнение экспериментальных и расчетных результатов на рис. 10 показывает, что представленный численный метод позволяет моделировать сложные трехмерные динамические течения с высокой реалистичностью.

Таким образом, пространственные картины течений при слабой надкритичности для низких и высоких чисел Pr существенно различаются. При низких и средних значениях Pr наблюдается геометрическая симметрия, вызванная наличием вертикально ориентированных вихревых структур малой интенсивности. При этом искажение картины течения в вертикальных сечениях (r, z) незначительно (рис. 3, *а, б*). В свою очередь, при высоких Pr нарушение осевой симметрии проявляется в первую очередь в вертикальных сечениях, где наблюдается сильное искажение формы термиков (рис. 3, *г*). Картина в плоскости (φ, r) при этом также сильно искажена, но имеет нерегулярный вид и поэтому мало информативна.

Заключение

Проведено масштабное параметрическое исследование устойчивости течений в модели метода Чохральского в широком диапазоне чисел Прандтля. Построена карта режимов тепловой гравитационной конвекции в координатах $Gr-Pr$, наиболее полная на сегодняшний день, выявлены зоны стабилизации температурных колебаний расплава и позиции смены опасных мод.

Показано, что для рассмотренных условий смена трехмерной моды колебаний на осесимметричную происходит при $Pr \approx 15$ для линейного профиля температуры и $Pr \approx 1$ для теплоизолированной поверхности расплава.

Проведен анализ нестационарных пространственных эффектов тепловой гравитационной конвекции на основе построенной карты режимов, выявлены характерные признаки конвективных структур в сечениях (r, z) и (φ, r) . Установлено, что колебательные течения при низких и средних значениях Pr характеризуются наличием геометрической симметрии в плоскости (φ, r) , когда отклонения температуры от среднего значения вызваны вертикально ориентированными вихревыми структурами. Для нескольких надкритических режимов показана периодическая перестройка этих структур и приведена сводная таблица характеристик течения.

Рассмотрены особенности колебательного течения и динамика термиков при высоких Pr , когда преобладает локальный механизм нарушения динамического равновесия, подобный неустойчивости типа Рэлея–Бенара. Для вариантов с различными граничными условиями на поверхности расплава показаны механизмы потери осевой симметрии при повышении числа Грасгофа. Проведено сравнение с экспериментом, продемонстрировано хорошее качественное и количественное совпадение.

Полученные результаты позволяют продвинуться в понимании ряда практических вопросов, в том числе вопроса о возможности выращивания монокристаллов в космических условиях за счет устранения колебаний расплава.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (№ 15-01-06363, 15-01-02012). Расчеты выполнялись на компьютерах вычислительного центра «Mesocentre», Университет Экс-Марсель, Франция.

Литература

1. Гершуни Г.З., Жуховицкий Е.М. Механизмы неустойчивости плоскопараллельных конвективных течений // *Механика и научно-технический прогресс*. Т. 2. Механика жидкости и газа / Под ред. Л.И.Седова и др. М.: Наука, 1987. С. 211–225.
2. Carruthers J.R. Thermal convection instabilities relevant to crystal growth from liquids // *Preparation and Properties of Solid State Materials* / Eds.: W.R. Wilcox and R.A. Lefever. New York; Basel: Marcel Dekker, 1977. Vol. 3. P. 1–121.
3. Ristorcelli J.R., Lumley J.L. Instabilities, transition and turbulence in the Czochralski crystal melt // *J. Crystal Growth*. 1992. Vol. 116, No. 3–4. P. 447–460.
4. Scheel H.J. Theoretical and experimental solutions of the striation problem // *Crystal Growth Technology* / Eds.: H.J. Scheel and T. Fukuda. N.Y.: Wiley, 2004. P. 69–91.
5. Никитин Н.В., Полежаев В.И. Трехмерная конвективная неустойчивость и колебания температуры при выращивании кристаллов по методу Чохральского // *Изв. РАН. МЖГ*. 1999. № 3. С. 26–39.

6. Никитин Н.В., Полежаев В.И. Трехмерные эффекты переходных и турбулентных режимов тепловой гравитационной конвекции в методе Чохральского // Изв. РАН. МЖГ. 1999. № 6. С. 81–90.
7. Polezhaev V.I. Modeling of technologically important hydrodynamics and heat/mass transfer processes during crystal growth // Crystal Growth Technology / Eds.: H.J. Scheel and T. Fukuda. N.Y.: Wiley, 2004. P. 155–186.
8. Никитин Н.В., Никитин С.А., Полежаев В.И. Конвективные неустойчивости в гидродинамической модели роста кристаллов методом Чохральского // Успехи механики. 2003. Т. 2, № 4. С. 63–105.
9. Zeng Z., Chen J., Mizuseki H. et al. Three-dimensional oscillatory convection of LiCaAlF₆ melt in Czochralski crystal growth // J. Crystal Growth. 2003. Vol. 252, No. 4. P. 538–549.
10. Crnogorac N., Wilke H., Cliffe K.A., Gelfgat A.Yu., Kit E. Numerical modelling of instability and supercritical oscillatory states in a Czochralski model system of oxide melts // Cryst. Res. Technol. 2008. Vol. 43, No. 6. P. 606–615.
11. Полежаев В.И., Никитин Н.В., Никитин С.А., Мякишина М.Н. Конвективные неустойчивости в гидродинамической модели метода Чохральского. Препринт № 809. М.: ИПМех РАН. 2006. С. 40–44.
12. Полежаев В.И., Никитин С.А. Особенности теплообмена при свободно-конвективных взаимодействиях в замкнутых объемах. Технические и технологические приложения // Проблемы газодинамики и тепломассообмена в аэрокосмических технологиях. М.: Изд. дом МЭИ, 2009. Т. 2. С. 15–18.
13. Полежаев В.И., Никитин С.А., Мякишина М.Н. Теплообмен и температурное расслоение при свободно-конвективных взаимодействиях в замкнутых объемах // Тр. 5-й Рос. нац. конф. по теплообмену. М.: Изд. дом МЭИ, 2010. Т. 1. С. 55–62.
14. Polezhaev V.I., Nikitin S.A. Interaction of the basic mechanisms of buoyancy-driven convection: fundamentals, technical and material sciences applications // Int. J. Transport Phenomena. 2011. Vol. 12, No. 1–2. P. 113–131.
15. Polezhaev V.I., Myakshina M.N., Nikitin S.A. Heat transfer due to buoyancy-driven convective interaction in enclosures: fundamentals and applications // Int. J. Heat Mass Transfer. 2012. Vol. 55, No. 1–3. P. 156–165.
16. Бессонов О.А., Полежаев В.И. Нестационарные неосесимметричные течения в гидродинамической модели метода Чохральского при больших числах Прандтля // Изв. РАН, МЖГ. 2011. № 5. С. 16–32.
17. Бессонов О.А., Полежаев В.И. Неустойчивости тепловой гравитационной конвекции и теплообмен в модели метода Чохральского при различных числах Прандтля // Изв. РАН. МЖГ. 2013. № 1. С. 27–40.
18. Бессонов О.А., Полежаев В.И. Карта режимов и пространственные эффекты конвективных взаимодействий в гидродинамической модели метода Чохральского // Изв. РАН. МЖГ. 2014. № 2. С. 16–28.
19. Bessonov O. OpenMP parallelization of a CFD code for multicore computers: analysis and comparison // Parallel Computing Technologies: Proc. of the 11th Int. Conf — PaCT-2011. 2011. Vol. 6873. P. 13–22.
20. Бессонов О.А. Эффективный метод расчета течений несжимаемой жидкости в областях регулярной геометрии. Препринт № 1021. М.: ИПМех РАН. 2012. 59 с.
21. Teitel M., Schwabe D., Gelfgat A.Yu. Experimental and computational study of flow instabilities in a model of Czochralski growth // J. Crystal Growth. 2008. Vol. 310, No. 7–9. P. 1343–1348.

22. Бердников В.С., Винокуров В.А., Винокуров В.В., Гапонов В.А. Теплообмен в режимах тепловой гравитационно-капиллярной конвекции в варианте метода Чохральского с неподвижным тиглем // Тр. 4-й Рос. нац. конф. по теплообмену. М.: Изд. дом МЭИ, 2006. Т. 3. С. 63–66.
23. Jones A.D.W. The temperature field of a model Czochralski melt // J. Crystal Growth. 1984. Vol. 69, No. 1. P. 165–172.
24. Jones A.D.W. Spoke patterns // J. Crystal Growth. 1983. Vol. 63, No. 1. P. 70–76.
25. Бессонов О.А., Полежаев В.И.. Моделирование трехмерных надкритических термокапиллярных течений в методе Чохральского // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Естеств. науки. 2004. Спецвыпуск. Математика и механика сплошной среды. С. 60–67.
26. Бессонов О.А., Полежаев В.И. Термокапиллярная конвекция в гидродинамической модели метода Чохральского: неустойчивость пространственного течения и колебания температуры // Сб. трудов 6-й междунар. конф. «Рост монокристаллов и тепломассоперенос» (ICSC-2005), Обнинск, ГНЦ РФ ФЭИ, 2005. Т. 4. С. 766–775.