

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

УДК 517.958:536.24

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СВОБОДНОЙ КОНВЕКЦИИ ДЛЯ ПРОЦЕССА НАПРАВЛЕННОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ CdZnTe

Л.Б. Берлинер, ведущий научный сотрудник, Л.А. Гвелесиани, аспирант
кафедры Материалы микро-, опто- и наноэлектроники МИТХТ им. М.В. Ломоносова
e-mail: berliner.leonid@gmail.com, lgveliesiani@yandex.ru

Предложен метод расчета теплообмена с учетом конвекции для процесса направленной кристаллизации в ростовой ампуле. Метод основан на численном расчете двухфазной задачи с неизвестной границей раздела фаз. Расчет проводили в два этапа: на первом этапе решали тепловую задачу, в которой область ампулы кристалл/расплав рассматривается как однофазная область с переменными теплофизическими параметрами, на втором этапе – как двухфазную задачу, в которой в твердой фазе рассматривали тепловую задачу, а в жидкой фазе – тепловую задачу совместно с задачей расчета свободной конвекции. Расчеты проводили в интегральной среде разработки COMSOL Multiphysics 3.5.

Computation method of the radiative heattransfer and free convection in the growth ampoule was suggested. It is based on numeric computation of two phase problem with unknown shape of interface. Computation was realized in two steps: on the first step heat transfer problem was solved, in which crystal/melt region was considered as one phase region with variable thermo physical properties, on the second step two phase problem was solved, in which thermal problem was solved in solid phase and thermal problem together with free convection problem in melt phase. Computations were carried out in the integrated development environment COMSOL Multiphysics 3.5.

Ключевые слова: твердые растворы CdZnTe, вертикальная направленная кристаллизация, радиационный теплообмен, свободная конвекция.

Key words: solid solutions CdZnTe, vertical crystal growth, radiative heat transfer, free convection.

Процесс вертикальной направленной кристаллизации (ВНК) CdZnTe описывали многие авторы. Так, в предыдущих статьях [1, 2] нами рассмотрена тепловая задача выращивания монокристаллов CdZnTe применительно к условиям опытной установки в ОАО «ГИРЕДМЕТ» без учета свободной конвекции расплава. В пионерской работе Derby et al. [3] выполнено моделирование температурных полей и конвективных потоков в расплаве для процесса ВНК CdZnTe, однако радиационный теплообмен рассчитан по упрощенной формуле. В более поздних работах [4, 5] радиационный теплообмен рассчитывали более строго, но изменение положения ампулы в печи моделировали перемещением температурного профиля нагревателя относительно ампулы. При таком подходе не учитывали, что длина штока, перемещающего ампулу, и положение ампулы относительно торцов рабочего пространства печи меняются.

Целью данной работы является разработка алгоритма совместного решения уравнений радиационного теплообмена и уравнений движения расплава в переменном поле температур. Задача моделирования процесса ВНК CdZnTe рассматривается здесь с учетом свободной конвекции расплава при радиационном теплообмене и в условиях изменяющейся в ходе процесса геометрии установки: учитывается изменение расстояния ампулы от торцов печи и изменение длины штока в рабочем пространстве печи.

Математическая модель

Согласно [1, 2], математическая модель процесса ВНК описывается системой уравнений теплопереноса в кристалле, расплаве, ампуле,

штоке и уравнением гидродинамики Навье-Стокса для расчета свободной конвекции расплава. При этом скорость перемещения межфазной границы кристалл/расплав и ее форма априори неизвестны, и приходится решать сложную задачу Стефана с подвижной границей.

Задачей математической модели является расчет тепловых потоков и положения и формы фронта кристаллизации (ФК) в зависимости от распределения температур на нагревателе (рис. 1), от положения ампулы относительно нагревателя, от геометрических и конструктивных особенностей печи.

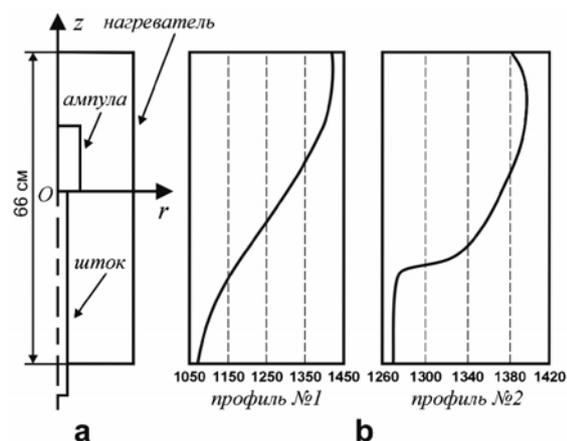


Рис. 1. Процесс ВНК для CdZnTe: а) – схема процесса; б) – температурные профили на нагревателе без подпорной зоны (профиль 1) и с подпорной зоной (профиль 2).

Уравнения математической модели можно выразить двумя способами в зависимости от выбора неподвижной системы координат, связанной либо с нагревателем печи, либо с

ампулой. Если ампула движется относительно неподвижного муфеля, в уравнения входит скорость вытягивания ампулы вдоль оси z : $-v_{pull}e_z$. Если же ампула неподвижна, а относительно нее перемещается нагреватель, то скорость вытягивания ампулы не входит в уравнения математической модели и учитывается лишь при задании граничных условий на нагревателе печи. Принятый в последнем случае способ задания неподвижной системы координат кажется нам более удобным и принят в настоящей работе.

Математическая модель включает уравнение теплопроводности:

$$(\rho_i C_{Pi}) \cdot \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (-k_i \nabla T) = -\rho_i C_{Pi} \mathbf{u} \cdot \nabla T; \quad (1)$$

уравнение гидродинамики в приближении Буссинеска:

$$\rho_m \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho_m (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} =$$

$$= \nabla \cdot \left[-p \mathbf{I} + \eta (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) \right] + \rho_m \beta_T \Delta T \mathbf{g},$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0; \quad (3)$$

уравнение изотермы кристаллизации для определения положения ФК:

$$T(r, z, t) = T_m. \quad (4)$$

Граничные условия для уравнения теплопроводности: на оси симметрии: $\frac{\partial T}{\partial r} = 0$; на гра-

ницах внутренних областей: $k_i \nabla T = k_j \nabla T$; на ФК равенство тепловых потоков с учетом теплоты кристаллизации: $(-k_m \nabla T + k_s \nabla T) \cdot \mathbf{n} =$

$$= \rho_m \Delta H v_{pull} \frac{v_{cryst}^*}{(\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_z)};$$

на внешних границах ампулы и штока условие радиационного теплообмена: $-\mathbf{n} \cdot (-k_i \nabla T) = \varepsilon_j (G - \sigma T^4)$, $(1 - \varepsilon_j)G =$

$$= J_0 - \varepsilon_j \sigma T^4;$$

на теплоизлучающих границах муфеля обращенных к ампуле условие радиационного теплообмена дополняется температурным полем, заданным в виде функции от координаты z и времени t : $T_{muffel} = T(z + z_i)$, $z_i = z_{max} - v_{pull} \cdot t$.

Граничные условия для уравнения гидродинамики: на оси симметрии: $\mathbf{u} \cdot \mathbf{e}_r = 0$,

$$\frac{\partial(\mathbf{u} \cdot \mathbf{e}_z)}{\partial r} = 0;$$

на верхней границе расплава: $\mathbf{n} \cdot \mathbf{u} = 0$; $\mathbf{e}_r \cdot \left(-p \mathbf{I} + \eta (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) \right) \mathbf{e}_z = 0$, на нижней и боковой границах расплава: $\mathbf{u} = 0$.

В уравнения и граничные условия входят: T – температура, К; T_m – температура плавления CdZnTe, К; T_{muffel} – распределение температур на поверхности нагревателя печи, К; t – время, с; \mathbf{u} – вектор скорости расплава, м/с; k_i – коэффициент теплопроводности, Вт/(м·К); C_{Pi}

– теплоемкость, Дж/(К·кг); ρ_i – плотность, кг/м³; $(\nabla \mathbf{u})^T$ – матрица производных компонентов скорости, транспонированная по отношению к матрице $\nabla \mathbf{u}$; p – давление, Па; \mathbf{g} – вектор ускорения свободного падения, м/с²; \mathbf{I} – единичная матрица; β_T – коэффициент объемного теплового расширения расплава, 1/К; η – вязкость, Па·с; ε_j – степень черноты; J_0 – суммарный исходящий поток излучения, включающий собственное излучение $\varepsilon_j \sigma T^4$ и отраженное излучение $(1 - \varepsilon_j)G$, Вт/м²; $\sigma = 5.6693 \cdot 10^{-12}$ Вт/(м²·К⁴) – постоянная Стефана-Больцмана; z_{max} – длина штока в рабочей зоне печи в момент времени $t = 0$, м; v_{pull} – скорость вытягивания ампулы, м/с; $v_{cryst}^*(r, z)$ – проекция на ось z безразмерной скорости кристаллизации; \mathbf{n} – нормаль к поверхности; \mathbf{e}_z , \mathbf{e}_r – единичные векторы вдоль направлений Oz , Or . Нижние индексы i, j могут принимать значения: $m, s, a, support, furnace$ или $muffel$, что соответствует областям расплава, кристалла, ампулы, штока, нагревателя или торцов муфеля.

Граничное условие для уравнения гидродинамики на верхней границе расплава получено в предположении, что ампула заполнена непольностью и между верхней стенкой ампулы и расплавом имеется небольшой зазор пренебрежимо малой толщины. В результате имеет место свободная поверхность расплава, что означает нулевую скорость в направлении вектора нормали к поверхности расплава и нулевые вязкие напряжения вдоль свободной поверхности расплава.

Алгоритм расчета

Расчет процесса ВНК представляет сложную двухфазную задачу с неизвестной границей раздела фаз, меняющейся в ходе выращивания кристалла. Для решения этой задачи предлагается двухуровневая итерационная схема расчета с использованием программных пакетов Comsol Multiphysics и Matlab [6, 7]. Расчет проводили в квазистационарном приближении при скорости вытягивания ампулы $v_{pull} = 1$ мм/час.

Правомерность такого подхода подтверждается оценками длительности переходных процессов времени роста, проводимости и конвекции:

$$\tau_{growth} = \frac{R}{v_{pull}} = 8.1 \cdot 10^4 \text{ с},$$

$$\tau_{cond} = \frac{R^2 \cdot \rho_m \cdot C_{Pm}}{v_{pull} \cdot k_m} = 360 \text{ с}, \quad (5)$$

$$\tau_{conv} = \frac{R}{v_{max}} \approx 56 \text{ с},$$

где $R = 2.25$ см – внутренний радиус ампулы, $v_{\max} \approx 0.04$ см/с – максимальная скорость конвективных потоков в расплаве (см. результаты

расчетов), прочие тепло-физические параметры моделируемой системы приведены в табл. 1.

Таблица 1. Теплофизические свойства моделируемой системы [1].

Параметр	Значение	Описание
ρ_s	5680 кг/м ³	Плотность кристалла
ρ_m	5680 кг/м ³	Плотность расплава
k_s	1.5 Вт/(К·м)	Теплопроводность кристалла
k_m	3 Вт/(К·м)	Теплопроводность расплава
C_{ps}	159 Дж/(К·кг)	Теплоемкость кристалла
C_{pm}	187 Дж/(К·кг)	Теплоемкость расплава
T_m	1371 К	Температура кристаллизации
ΔH	209200 Дж/кг	Тепловой эффект кристаллизации
η	$0.25 \cdot 10^{-2}$ Па·с	Динамическая вязкость
D_s	$5 \cdot 10^{-11}$ м ² /с	Коэффициент диффузии Zn в кристалле
D_m	$1 \cdot 10^{-8}$ м ² /с	Коэффициент диффузии Zn в расплаве
k_{Zn}	1.35	Равновесный коэффициент сегрегации Zn

На первом этапе решается однофазная тепловая задача, в которой область ампулы кристалл/расплав рассматривается как однофазная область с переменными теплофизическими свойствами, зависящими от температуры [2]. В результате расчета получаем положение границы раздела фаз.

На втором этапе решается двухфазная задача, в которой в твердой фазе рассматривается тепловая задача, а в жидкой фазе – тепловая задача совместно с задачей расчета свободной конвекции.

Расчет проводили по итерационной схеме. За основу брали межфазную границу, полученную на первом этапе. Далее по изотерме кристаллизации рассчитывали положение новой межфазной границы. Окончанием итерационного процесса являлось совпадение межфазных границ двух последних итераций. Обычно требовалось 3 – 4 итерации.

Построение геометрии моделируемых областей производили с помощью системы Comsol Multiphysics и её компонента – Comsol Script. Создавали m-файл сценария, в котором задавали геометрические параметры установки (табл. 2). Построение геометрии осуществляли при помощи функций, задающих прямоугольные объекты, и операций композиции и декомпозиции этих объектов. Далее m-файл сценария выполняли в Comsol Script и геометрию импортировали в Comsol Multiphysics.

Важным моментом реализации итерационной схемы стало построение межфазной границы, определяющей области кристалла и расплава. Для этого координаты фронта кристаллизации r и z экспортировали в текстовый

файл, используя возможности постпроцессорной обработки результатов расчета. Затем с помощью средств системы Matlab эти координаты упорядочивали и сохраняли в виде массива в mat-файле. В Comsol Script выполняли m-файл сценария построения геометрии, в котором осуществлялись загрузка mat-файла с координатами ФК и построение геометрии внутренней области ампулы. Эту геометрию импортировали в Comsol Multiphysics, и объединяли с геометрией ампулы и муфеля печи, построенной первоначально без учета межфазной границы.

Таблица 2. Геометрические параметры установки.

Параметр	Значение	Описание
R_a	2.5, 4.5 см	Радиус ампулы
H_a	8 см	Высота ампулы
d_a	0.25 см	Толщина стенки ампулы
R_h	5.25 см	Радиус муфеля
H_h	66 см	Высота муфеля
R_{sh}	1 см	Радиус штока
d_{sh}	0.25 см	Толщина стенки штока

Важным моментом получения корректных результатов является построение конечно-элементной сетки метода конечных элементов, применяемого в Comsol Multiphysics. Сетка должна сгущаться к границам областей (рис. 2) и содержать достаточно большое количество элементов: в наших расчетах их было порядка 60 тыс.

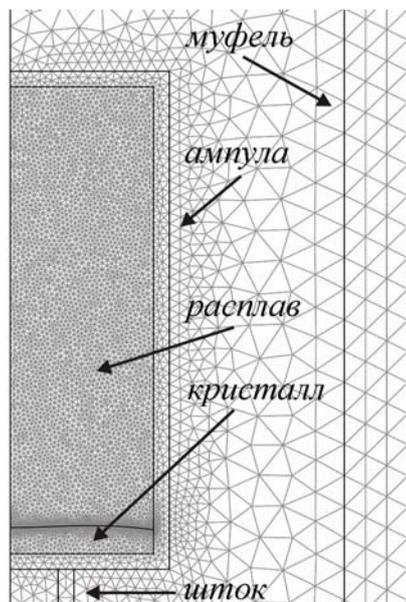


Рис. 2. Конечно-элементная сетка (~60 тыс. элементов).

Расчеты проводили при двух температурных профилях нагревателя (рис. 1) без подпорной зоны с максимальным перепадом температур в расплавленной зоне 40 К и с подпорной зоной 1260 К с максимальным перепадом температур 20 К. Расчеты проводили со штоком и без штока для ампул радиусом 2.5 см и 4.5 см при скорости перемещения штока 1 мм/ч. Использовали персональный компьютер с четырехъядерным процессором частотой 2.66 ГГц и объемом оперативной памяти 8 Гб.

Результаты вычислительного эксперимента

Исследовано влияние технологических параметров процесса ВНК на форму межфазной границы кристалл/расплав, на структуру конвективных потоков, поле температур и его градиентов в расплаве. При этом рассмотрены ампулы с различными радиусами: 2.5 см и 4.5 см, а также различные профили температур на нагревателе: температурный профиль с большим перепадом температур в ампуле 40 К (профиль 1, рис. 1) и температурный профиль с перепадом 20 К (профиль 2, рис. 1). Оценена величина максимальных скоростей в расплаве и максимальных градиентов на фронте кристаллизации. Выполнен сравнение результатов расчета по трем моделям: полной двухфазной модели с использованием уравнения Навье-Стокса в жидкой фазе, упрощенной однофазной модели с использованием уравнения Навье-Стокса в жидкой и твердой фазах с переменной вязкостью и упрощенной тепловой модели с переменными теплофизическими параметрами.

Пример расчета формы ФК для ампулы со штоком и температурным профилем нагре-

вателя, соответствующим профилю 1 (рис. 1), приведен на рис. 3. Из рис. 3 видно, что полная двухфазная модель и однофазная модель с переменной вязкостью дают близкие результаты, однако при расчете с переменной вязкостью возникают проблемы сходимости и точности расчетов, а именно: для получения приемлемой сходимости необходимо в каждом расчете строить грубую сетку с малым количеством элементов. Кроме этого, для каждого расчета необходимо подбирать соотношение вязкости жидкой и твердой фаз. Кривая 3 на рис. 3 получена при соотношении вязкостей 10^6 и значении параметра максимального размера элемента сетки 0.4, в то время, как в расчетах по двухфазной модели величина этого параметра была порядка 0.03 – 0.05, а вдоль ФК – 0.001.

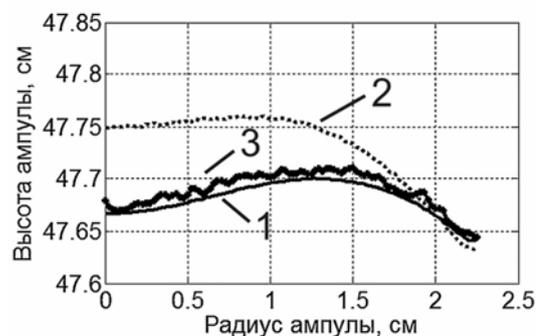


Рис. 3. Формы ФК в начальной стадии процесса ($z_t = 47$ см) по трем моделям:

- 1 – двухфазная модель, 2 – однофазная тепловая модель с переменным коэффициентом теплопроводности, 3 – однофазная модель с переменным коэффициентом вязкости.

Структура конвективных потоков при двух температурных профилях нагревателя и трех позициях ампулы радиуса 2.5 см: в начале, середине и в конце процесса показана на рис. 4.

В начальной стадии процесса (рис. 4а, 4д) ярко выражены два конвективных вихря, полностью заполняющих расплав до оси симметрии ампулы: нижний протяженный вихрь, вращающийся против часовой стрелки по направлению к ФК, и вихрь, прилегающий к верхней стенке ампулы и вращающийся в противоположном направлении по часовой стрелке. Максимальная скорость расплава для температурного профиля с большим перепадом температур (профиль 1) равна 0.044 см/с, а для температурного профиля с меньшим перепадом температур (профиль 2) – ниже и равна 0.031 см/с. Это объясняется меньшим перепадом температур для профиля 2. Области с максимальной скоростью в этих случаях располагаются вблизи ФК и внутренней стенки ампулы.

В средней стадии процесса (рис. 4б, 4е)

часть расплава движется по часовой стрелке вокруг двух вихрей, расположенных в углах стенок ампулы и ФК. Другие части расплава движутся вокруг этих вихрей также по часовой стрелке. Максимальная скорость расплава для профиля 1 равна 0.048 см/с, а для профиля 2 – 0.042 см/с. Области с максимальной скоростью в этих случаях смещаются к свободной поверхности расплава у верхней стенки ампулы. Таким образом, если в начальной стадии

процесса расплав двигался против часовой стрелки к ФК, то в средней стадии процесса направление движения меняется и расплав движется от ФК. Такая смена направлений движения расплава связана, по-видимому, с тем, что верхний вихрь, наблюдаемый в начальной стадии процесса, по мере кристаллизации начинает преобладать и заполняет все рабочее пространство расплава, вытесняя при этом нижний вихрь.

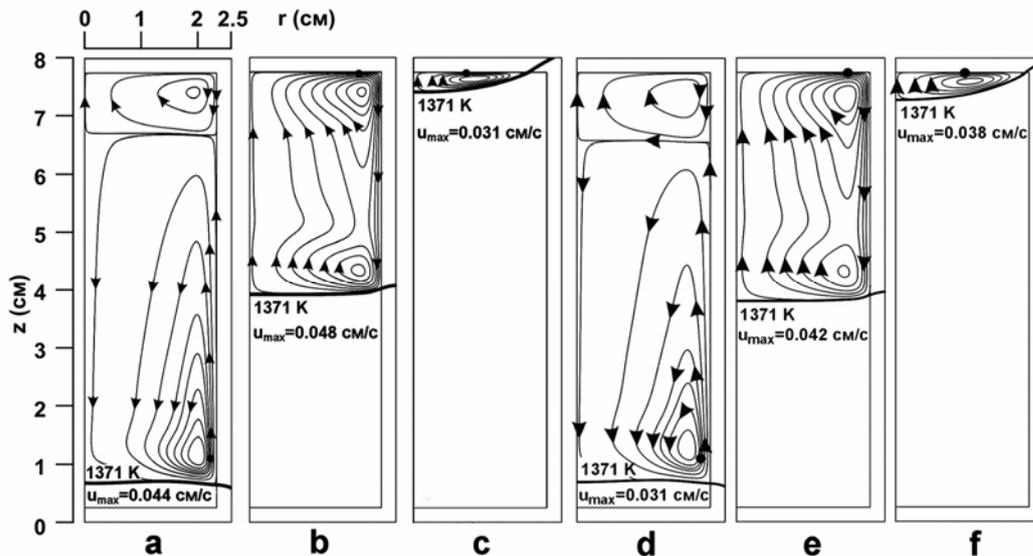


Рис. 4. Изолинии функции тока в расплаве для профиля 1 (a, b, c) и профиля 2 (d, e, f) при положениях ампулы: $z_t=47$ см (a), $z_t=42$ см (b), $z_t=36$ см (c), $z_t=38$ см (d), $z_t=33$ см (e), $z_t=27$ см (f).

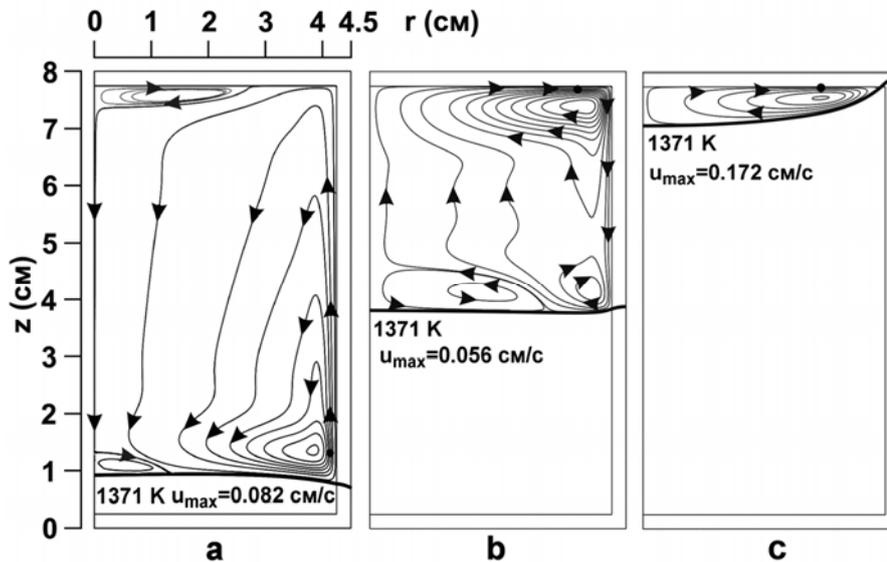


Рис. 5. Изолинии функции тока в расплаве для профиля 1 при положениях ампулы: $z_t=47$ см (a), $z_t=42$ см (b), $z_t=36$ см (c).

В конечной стадии процесса (рис. 4с, 4f) остается один вихрь, вращающийся по часовой стрелке, максимальные скорости расплава равны 0.031 см/с и 0.038 см/с для температурных профилей 1 и 2, соответственно.

Структура конвективных потоков для ампулы большего радиуса, т.е. 4.5 см, при темпера-

турном профиле нагревателя 1 представлена на рис. 5. На начальной стадии процесса, как видно из рис. 5а, структура конвективных потоков изменяется: появляется небольшой третий вихрь с вращением по часовой стрелке вблизи оси симметрии и ФК, при этом большой верхний вихрь, рассмотренный ранее в аналогичном

случае (рис. 4а), существенно уменьшается в размерах и сдвигается к оси симметрии ампулы. На средней стадии процесса (рис. 5b) верхний вихрь и появившийся дополнительный третий вихрь также расширяются на все пространство расплава. При этом верхний вихрь распадается на три вихря: большой вихрь, вращающийся вокруг двух малых вихрей, примыкающих к стенке ампулы в верхней и нижней частях расплава. Максимальные скорости расплава увеличиваются с ростом радиуса ампулы, проходя в ходе процесса кристаллизации через минимум: 0.082 см/с, 0.056 см/с и 0.172 см/с.

Из рассмотрения рис. 4 и 5 следует, что форма ФК существенно не меняется в связи с изменением структуры конвективных потоков. В обоих случаях ФК преимущественно имеет выпуклость в сторону расплава на начальной стадии процесса,

которая меняется на вогнутость на завершающих стадиях процесса. Структура конвективных потоков важна для понимания изменения радиальной и осевой сегрегации Zn в расплаве CdTe.

Изменение температурных полей в ампуле, кристалле и в расплаве показано на рис. 6 для двух температурных профилей нагревателя. Перегрев расплава максимален в начале кристаллизации и составляет 40 К для профиля 1 и 20 К – для профиля 2. Максимальные градиенты температур на ФК порядка 14 К/см для профиля 1 и порядка 5 К/см – для профиля 2. Особый интерес представляет рассмотрение распределения поля градиентов температур в расплаве вблизи ФК. Пример такого распределения приведен на рис. 7 для ампулы радиуса 2.5 см и профиля температур 1 для двух положений ампулы в начале и в середине процесса при кристаллизации ~50% расплава.

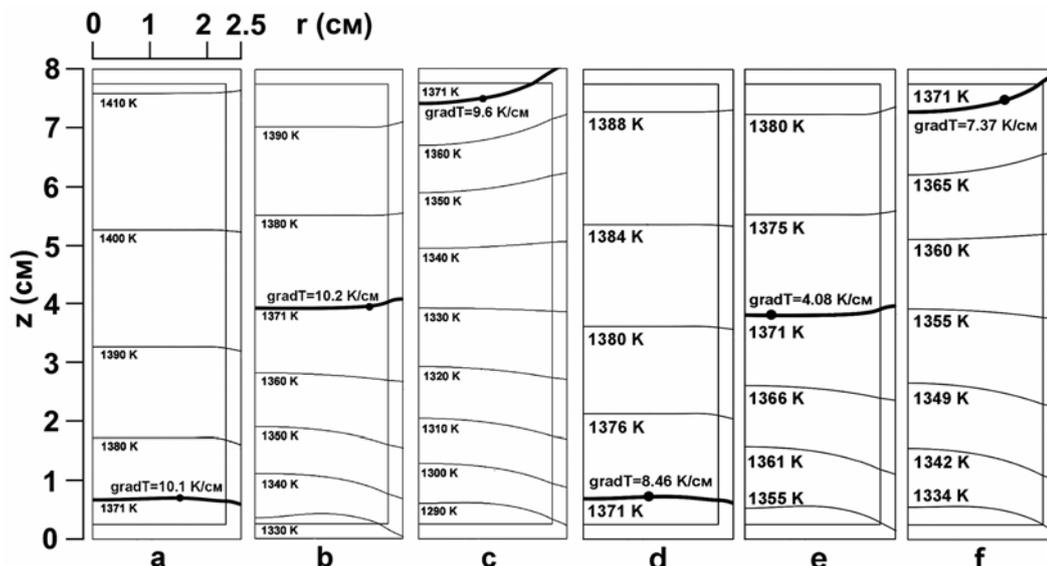


Рис. 6. Изолинии температуры для профиля 1 (a, b, c) и профиля 2 (d, e, f) при положениях ампулы: $z_t=47$ см (a), $z_t=42$ см (b), $z_t=36$ см (c), $z_t=38$ см (d), $z_t=33$ см (e), $z_t=27$ см (f).

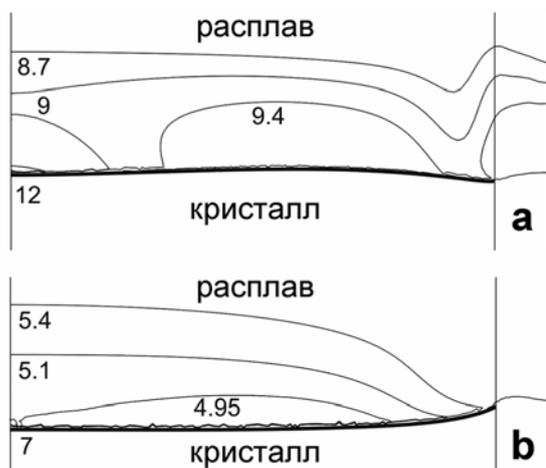


Рис. 7. Изолинии градиентов температуры (К/см) в расплаве вблизи ФК при положениях ампулы: $z_t=47$ см (a), $z_t=42$ см (b) для профиля 1.

Исследование влияния температурного профиля нагревателя, влияния штока, изменения радиуса ампулы на форму ФК на разных стадиях процесса показано на рис. 8 – 10. Для сравнения здесь приведены результаты расчетов по двум моделям: полной двухфазной модели и однофазной тепловой модели, не учитывающей конвекцию расплава. Как следует из рисунков, изотермы температуры плавления во всех случаях для ампулы радиуса 2.5 см исходят из одной точки на внутренней поверхности ампулы, т.е. учет конвекции не влияет на распределение температур на стенках ампулы (рис. 8, 9).

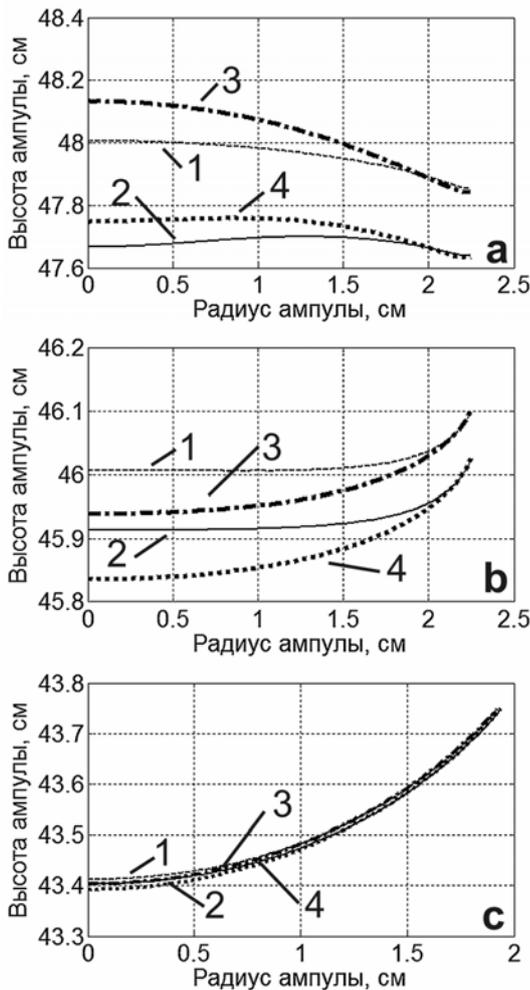


Рис. 8. Форма межфазной границы кристалл/расплав для профиля 1 при трех положениях ампулы: $z_t=47$ см (а), $z_t=42$ см (б), $z_t=36$ см (с) для различных вариантов расчета: 1 – без штока, 2 – со штоком; упрощенный расчет по однофазной тепловой модели без штока (3) и со штоком (4).

При увеличении радиуса ампулы скорости потоков в расплаве увеличиваются, и их влияние на распределение температур на стенках ампулы уже заметно (рис. 10). Независимо от радиуса ампулы, влияние штока сводится к смещению ФК вниз ко дну ампулы. При этом влияние штока на форму ФК наиболее выражено в начальной стадии процесса: ФК немного прогибается в сторону кристалла (рис. 8а, 9а). По мере кристаллизации влияние штока на положение и форму ФК уменьшается (рис. 8б, 8с, 9б, 9с). Отметим, что на рис. 8а, кривые 1 и 2 ниже кривых 3 и 4, а на рис 8б – наоборот выше. Это соответствует структуре конвективных потоков, показанных на рис. 4а, 4б: в первом случае потоки направлены из горячей зоны в холодную, а во втором – из холодной в горячую.

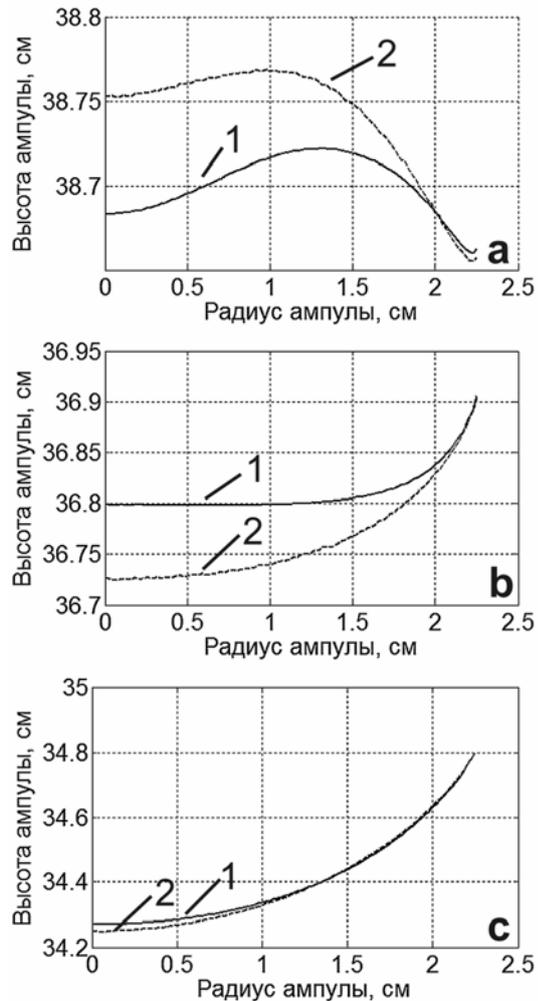


Рис. 9. Форма межфазной границы кристалл/расплав для профиля 2 при трех положениях ампулы: $z_t=38$ см (а), $z_t=33$ см (б), $z_t=27$ см (с): 1 – полный расчет, 2 – упрощенный расчет по однофазной тепловой модели.

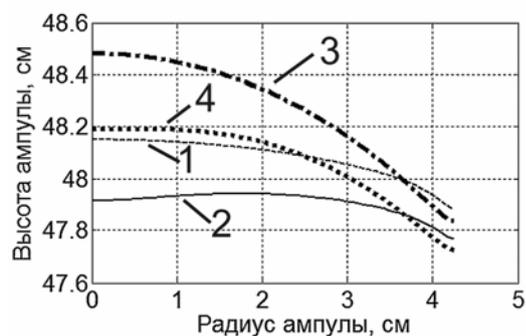


Рис. 10. Форма межфазной границы кристалл/расплав в начальной стадии процесса ($z_t=47$ см) для ампулы радиуса 4.5 см: расчет по двухфазной модели без штока (1) и со штоком (2); расчет по однофазной тепловой модели без штока (3) и со штоком (4).

На рис. 11 показано изменение безразмерной скорости v_{cryst}^* вдоль ФК для начальной стадии процесса и температурного профиля нагревателя 1. Из рисунка видно, что учет теплоты

кристаллизации в предположении, что скорость кристаллизации совпадает со скоростью вытягивания $v_{cryst} = v_{pull}$, является грубым приближением. Решение задачи моделирования процесса ВНК с учетом теплового эффекта также осуществляется по итерационной схеме. На первой итерации решается задача без учета теплового эффекта и рассчитывается безразмерная скорость кристаллизации как отношение $\frac{\Delta z_{ФК}}{\Delta z_{шток}}$. На второй итерации в расчет включается тепловой эффект с этой скоростью кристаллизации (рис. 11, кривая 1). Результат третьей итерации совпадает с результатом второй итерации.

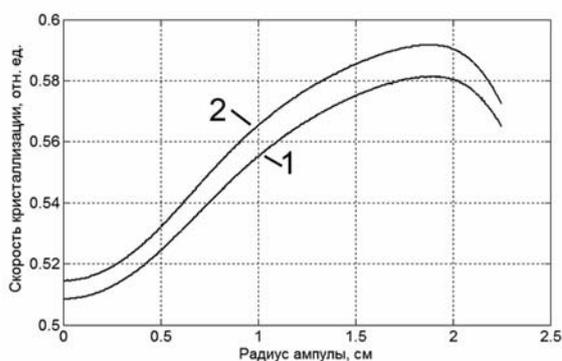


Рис. 11. Скорость кристаллизации вдоль ФК для профиля 1 в начальной стадии:
1 – скорость без учета теплового эффекта;
2 – скорость с учетом теплового эффекта.

Заключение

Проведен расчет процесса ВНК с доминирующим радиационным нагревом в условиях изменяющегося положения ампулы в установке

с учетом влияния торцов муфеля и меняющейся длины штока, перемещающего ампулу в рабочем пространстве установки. Полная двухфазная модель сопоставлена с упрощенными однофазными моделями. Проведены расчеты с учетом влияния штока и без него. Показано, что учет влияния штока позволяет получить более точную форму ФК в начальной стадии процесса. Установлено, что в приближенных расчетах температурных полей оправдано использование упрощенной однофазной тепловой модели с переменными теплофизическими коэффициентами.

Выявлено, что структура конвективных потоков меняется в ходе процесса кристаллизации. Результаты по исследованию структуры конвективных потоков согласуются с экспериментальными данными по изменению характера радиальной сегрегации Zn по длине слитка.

Исследованы изменения скорости кристаллизации вдоль фронта кристаллизации и вдоль оси кристалла. Найдено, что на начальной стадии кристаллизации скорость принимает минимальное значение 0.51 мм/ч на оси симметрии кристалла, проходит через максимум 0.59 мм/ч и уменьшается до 0.57 мм/ч, приближаясь к стенкам ампулы. При скоростях перемещения ампулы $v_{pull} < 1$ мм/ч влияние теплового эффекта на форму межфазной границы и структуру конвективных потоков незначительно, но при скоростях v_{pull} более 1 мм/ч необходимо учитывать скорость кристаллизации v_{cryst} , меняющуюся в радиальном и осевом направлениях. При этом расчет усложняется, т.к. требуются дополнительные итерации для определения в каждой точке ФК скорости кристаллизации v_{cryst} .

ЛИТЕРАТУРА:

1. Гвелесиани Л.А. Модель процесса вертикальной направленной кристаллизации монокристаллов $Cd_{1-x}Zn_xTe$ // Вестник МИТХТ. 2010. Т. 5. № 2. С. 18–22.
2. Берлинер Л.Б., Гвелесиани Л.А. Численный расчет радиационного теплообмена для процесса направленной кристаллизации $CdZnTe$ // Вестник МИТХТ. 2010. Т. 5. № 5. С. 13–18.
3. Kuppurao S., Brandon S., Derby J.J. Modeling the vertical Bridgman growth of cadmium zinc telluride. I. Quasi-steady analysis of heat transfer and convection // J. Crystal Growth. 1995. V. 155. P. 93–102.
4. Martinez-Tomas C., Munoz V., Triboulet R. Heat transfer simulation in a vertical Bridgman CdTe growth configuration // J. Crystal Growth. 1999. V. 197. P. 435–442.
5. Martinez-Tomas C., Munoz V. CdTe crystal growth process by the Bridgman method: Numerical simulation // J. Crystal Growth. 2001. V. 222. P. 435–451.
6. Бирюлин Г.В., Егоров В.И. Применение ЭВМ для решения задач теплопроводности в программе COMSOL Multiphysics: учебное пособие. – С.-Пб.: СПб ГУ ИТМО, 2006. 81 с.
7. Курбатова Е.А. MATLAB 7. Самоучитель. – М.: Диалектика, 2005. 256 с.