

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ В МНОГОЗОННЫХ ТЕРМИЧЕСКИХ УСТАНОВКАХ ДЛЯ ВЫРАЩИВАНИЯ КРИСТАЛЛОВ

Нгуен С. Х., Филиппов М.М., Бабушкин Ю.В.

Национальный исследовательский томский политехнический университет
nxh1216@gmail.com

Экспериментальные исследования показывают [1], что к наиболее эффективным нелинейно-оптическим материалам для преобразования излучения из инфракрасного диапазона в терагерцовый относятся монокристаллы соединения $ZnGeP_2$. В настоящее время освоена технология выращивания монокристаллов $ZnGeP_2$ требуемого качества по методу Бриджмена диаметром до 30 мм, и длиной до 200 мм в многозонных термических установках (МТУ). Однако, для создания терагерцовых преобразователей излучения необходимы образцы диаметром не менее 50 мм. Как правило, простое увеличение размеров рабочего объема МТУ и ростовых контейнеров (РК) не позволяет получить монокристалл большего размера с номинальным качеством, а приводит к падению качества и ухудшению физических характеристик образца. Это вызвано многими физико-техническими проблемами [2], связанными в первую очередь с проблемой обеспечения заданных температурных режимов с необходимой точностью. Ввиду сложности процессов теплообмена, происходящих при превращении расплава в кристалл, отсутствия технических средств измерения температурного поля вблизи фронта кристаллизации, прогнозирование поведения температурного поля без применения компьютерных моделей не представляется возможным.

Поэтому одной из актуальных задач, возникающих при разработке и совершенствовании МТУ, является создание математических моделей, позволяющих в реальном масштабе времени с приемлемой точностью прогнозировать течение процесса выращивания кристалла в варьируемых тепловых условиях.

Для выращивания кристаллов в центре МТУ (рис. 1) предусмотрена цилиндрическая полость, называемая рабочим пространством. В эту полость на подставке помещается РК с рабочим веществом, из которого и выращивается кристалл. Температурное поле установки формируется с помощью электрических нагревателей тепловых модулей таким образом, чтобы в верхней зоне рабочее вещество находилось в расплавленном состоянии, а в нижней зоне - в твердом состоянии. В средней зоне происходит превращение рабочего вещества из исходного состояния в расплав при перемещении РК вверх и образовании кристалла при перемещении РК вниз.

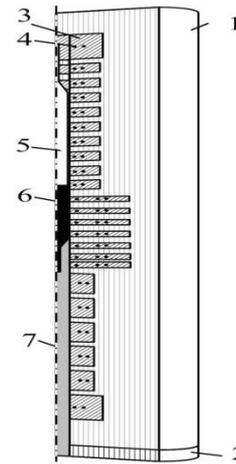


Рис. 1. Фрагмент мту с рабочим объемом, заполненным атрибутами, связанными с выращиванием кристаллов.

Обозначения: 1) теплоизолирующий материал; 2) подставка установки; 3) нагревательные модули; 4) нагреватель; 5) рк (ампула с тиглем, содержащим рабочее вещество); 6) рабочее вещество; 7) подставка рк

Уравнения переноса тепла в элементах МТУ. Пространственное распределение температуры в элементах МТУ описывается двумерным нестационарным уравнением энергии в цилиндрических координатах. Тепловыделение в нагревателях, обусловленное прохождением электрического тока, а также действие теплового излучения на теплообмен в рабочей области учитываются источниками тепла q_V^{jout} и q_V^{rad} в правой части уравнения энергии

$$\frac{\partial(c\rho)}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) + q_V^{rad} + q_V^{jout} * u,$$

$$t \in t_0, t_k, r \in r_0, r_M, z \in 0, L,$$

где T, c, ρ, λ – температура, теплоемкость, плотность и коэффициент теплопроводности среды; u – управляющее воздействие на нагреватели МТУ; t_0, t_k - время начала и окончания процесса выращивания кристалла; r_0, r_M - внутренний и внешний радиусы МТУ; L - высота МТУ.

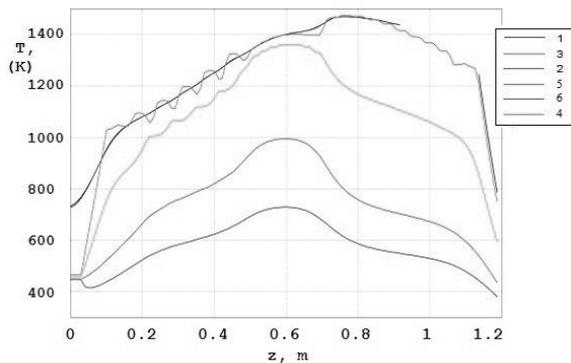
Уравнение движения и переноса тепла РК

Предполагается, что РК перемещается при росте кристалла из горячей зоны в холодную по формуле

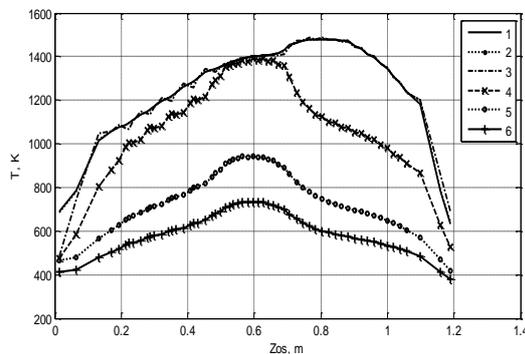
$$z_{pk}(t) = H_0 - v_{pk}(t - t_0),$$

где $z_{pk}(t)$ - нижняя граница РК; H_0, v_{pk}, t_0 - начальное положение, заданная скорость и начало перемещения РК. При выполнении условия $z_{pk}(t) \leq z_{cr}(t)$, где $z_{cr}(t)$ - положение фронта кристаллизации, рост кристалла заканчивается. Для учета теплоты кристаллизации на границе фазового перехода используется эффективная теплоемкость рабочего вещества.

Модели, максимально отражающие особенности выращивания кристаллов в МТУ, реализованы методом конечных элементов в пакете COMSOL [3], а упрощенные модели МТУ - в пакете Matlab.



а



б

Рис. 2. Распределение температуры по высоте. а- COMSOL, б- Matlab

Упрощенная математическая модель МТУ.

В соответствии с модульной структурой и осевой симметрией установки, при составлении расчетной схемы ее вертикальный разрез разделен на 290 ячеек ($N = 58$ по высоте и 5 по радиусу).

Уравнение, описывающее тепловые процессы в каждой ячейке МТУ и РК, имеет вид

$$(c\rho V)_{i,j} \frac{dT_{i,j}}{dt} = \sum_{s=1}^5 Q_s, \quad i=1, \dots, N; j=1, \dots, 5,$$

где V - объем ячейки; Q_{1-4} - составляющие теплового потока, поступающего в рассматриваемую ячейку, из соседних ячеек; Q_5 - тепловая мощность, выделяемая нагревателем, расположенным в соответствующей ячейке МТУ.

При проведении вычислительных экспериментов на модели, реализованной в пакете программ COMSOL, принято, что рассматриваемая область может быть вполне удовлетворительно аппроксимирована ~ 62000 элементов. Расчеты проводились для 50% уровней мощности нагревателей и положения РК $H_0=0.7$ м.

Результаты расчетов в виде распределений температур по высоте рабочего объема при $r=0.008$ (1), $r=0.023$ м (2) и МТУ при $r=0.066$ (3), $r=0.133$ (4), $r=0.198$ (5), $r=0.23$ (6) м приведены на рис. 2. Из рисунков видно, что температурные поля МТУ, полученные на различных моделях, вполне соответствуют друг другу. Однако, при этом время расчета стационарного состояния в COMSOL намного выше, чем в Matlab, что свидетельствует об эффективности и точности упрощенной модели.

Выводы

Для достижения высокой точности результатов расчетов решающее значение имеет полнота учета реальной структуры и разнообразия физических свойств материалов МТУ, что проще сделать в COMSOL. В тоже время задачи поиска приемлемых алгоритмов управления целесообразнее решать на упрощенной модели, реализованной в интерактивной среде Matlab.

Список литературы

1. Verozubova G.A., Okunev A.O., Gribenyukov A.I. and all. Growth and defect structure of ZnGeP₂ crystals // Journal of Crystal Growth. – 2010. – V. 312. – № 8. – P. 1122–1126.
2. Philippov M.M., Gribenyukov A.I., Ginsar V.E., Babushkin Yu.V. Improvement of spatial homogeneity of the ZnGeP₂ single crystal grown by the Bridgman method in a vertical geometry // Russian Physics Journal. – 2012. – V. 55. – № 7. – P. 759-763.
3. Филиппов М.М., Грибенюков А.И., Гинсар В.Е., Бабушкин Ю.В. Применение математической модели для сопровождения процесса выращивания кристаллов в многозонных термических установках // Изв. вузов. Материалы электронной техники. – 2013. – № 2. – С. 26–31.