

На правах рукописи

УДК 532.516:536.25

ИВАНОВ Николай Георгиевич

ТРЕХМЕРНАЯ НЕСТАЦИОНАРНАЯ КОНВЕКЦИЯ В ЕМКОСТЯХ,
ВРАЩАЮЩИХСЯ ВОКРУГ ВЕРТИКАЛЬНОЙ ОСИ:
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЛЯ МАЛЫХ ЧИСЕЛ ПРАНДТЛЯ

Специальность 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург 2000

Работа выполнена на кафедре гидроаэродинамики Санкт-Петербургского государственного технического университета.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор
Евгений Михайлович Смирнов.

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
старший научный сотрудник
Валентин Степанович Юферев;
кандидат физико-математических наук,
старший научный сотрудник
Дмитрий Алексеевич Никулин.

Ведущая организация: Институт проблем механики РАН.

Защита состоится « » _____ 2000 года в _____ часов на заседании диссертационного совета Д 063.38.15 в Санкт-Петербургском государственном техническом университете (195251, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29, корп. 1, кафедра гидроаэродинамики).

Отзыв на автореферат в двух экземплярах, заверенный печатью учреждения, просьба направлять по вышеуказанному адресу на имя учёного секретаря диссертационного совета.

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке Санкт-Петербургского государственного технического университета.

Автореферат разослан « » _____ 2000 года.

Учёный секретарь диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук,
доцент

Д.К.Зайцев

Общая характеристика работы

Актуальность проблемы

Детальные знания о трёхмерной нестационарной конвекции жидких металлов и расплавов полупроводниковых материалов, характеризуемых значениями числа Прандтля $Pr \ll 1$, в емкостях, вращающихся вокруг вертикальной оси, представляют существенный интерес, особенно в приложении к оптимизации выращивания кристаллов полупроводников из расплава по методу Чохральского (методу вытягивания). Объём доступных к настоящему времени сведений фундаментального характера о свойствах автоколебательных режимов течения жидкости при малых значениях числа Прандтля крайне недостаточен. Проведение экспериментов, направленных на исследование структуры течения и теплового состояния полупроводниковых расплавов, в силу их непрозрачности и высоких температур затруднено, а зачастую и невозможно. В связи с этим прямое численное моделирование трёхмерной нестационарной конвекции на сегодняшний день является наиболее перспективным инструментом при исследовании определяющей качество получаемых монокристаллов полупроводников конвекции расплава. Его применение позволит существенно дополнить имеющуюся на сегодняшний день весьма скудную экспериментальную информацию по существующим устройствам, а в последующем в значительной степени заменить дорогостоящие экспериментальные исследования при отработке новых установок. В силу сложности течения, определяющегося совместным действием ряда факторов, до сих пор прямое численное моделирование конвекции расплава применительно к выращиванию кристаллов по методу Чохральского не носило систематического характера.

Существенным при проектировании и отработке установок по выращиванию кристаллов является также понимание механизмов неустойчивости, которые способствуют появлению в расплаве отчётливо выраженных квазипериодических и стохастических колебаний, приводящих, в конечном счёте, к существенной неоднородности свойств получаемого кристалла. Исследование конвекции в модельных установках метода Чохральского, в частности, в кольцевых и цилиндрических емкостях, позволяет выделить в чистом виде тот или иной из числа действующих механизмов неустойчивости. Данная проблема в настоящее время также далека от своего решения и требует серьёзной методической проработки.

Цели работы

Представляемая диссертационная работа направлена на

1) разработку и реализацию метода численного моделирования трёхмерных квазипериодических и стохастических режимов конвекции в областях со сложной геометрией;

2) численное моделирование конвекции в моделях тигля метода Чохральского (рассматриваются цилиндрические и кольцевые ёмкости) и описание проявляющихся в них бароклиной неустойчивости и неустойчивости центрального вихря;

3) прямое численное моделирование конвекции в емкостях с геометрией, типичной для тиглей метода Чохральского, при типичных же тепловых граничных условиях, вплоть до чисел Релея порядка 10^5 , а также на выявление условий бифуркации осесимметричного стационарного течения в трёхмерное стационарное и условий перехода к стохастическому характеру течения.

Научная новизна работы

1) Впервые получены данные о полях скорости и температуры для условий, при которых во вращающихся кольцевых или цилиндрических емкостях возникают структуры, обусловленные бароклиной неустойчивостью; воспроизведены наблюдавшиеся в экспериментах режимы регулярных волн для малых и больших чисел Прандтля и режимы негеострофической турбулентности для малых чисел Прандтля.

2) Поставлена и исследована модельная задача изотермического течения во вращающейся ёмкости с примыкающим противовращающимся центральным диском, направленная на выявление роли неустойчивости центрального вихря в развитии трёхмерных автоколебательных процессов в установках метода Чохральского; проведённые вычисления показали, что эта роль может быть определяющей и в режимах тепловой конвекции.

3) Впервые проведены параметрические расчёты трёхмерных квазипериодических и стохастических режимов конвекции во вращающихся емкостях, усложнённая форма которых типична для тиглей систем метода Чохральского; получен обширный набор данных об эволюции структуры конвекции при изменениях определяющих параметров и спектральном составе пульсаций.

4) Установлено, что превышение критического числа Релея на порядок приводит к развитию интенсивных крупномасштабных трёхмерных пульсаций в центральной

(подкристалльной) области; эти пульсации в сильной мере выравнивают распределение подводимого к интерфейсу теплового потока по сравнению с данными, получаемыми на основе осесимметричной постановки.

Достоверность полученных результатов

Сравнение результатов методических и тестовых расчётов, проведённых в рамках настоящей работы, с экспериментальными и расчётными данными других авторов показало хорошее согласование.

Практическая ценность работы

1) Накоплена ценная методическая информация по проведению расчётов трёхмерных автоколебательных режимов, включая условия слабой и сильной надкритичности.

2) Выявленные свойства конвекции во вращающихся емкостях и полученные подробные данные по полям скорости и температуры являются важным дополнением к скудной экспериментальной информации по локальным характеристикам и будут способствовать более рациональным постановкам последующих опытов.

3) Результаты расчётов представляют ценность для инженеров, вовлечённых в оптимизацию существующих установок выращивания кристаллов по методу Чохральского и отработку новых конструкций.

4) Содержащийся в работе анализ механизмов неустойчивости, проявляющихся при конвекции расплава в методе Чохральского, может стимулировать разработку новых способов управления процессом выращивания монокристаллов.

Апробация работы

Основные результаты работы докладывались на российских и международных конференциях и семинарах: Третьей Санкт-Петербургской Ассамблее молодых учёных и специалистов (С.-Петербург, 1998), XXXIX Крыловских чтениях (С.-Петербург, 1999), Европейской конференции E-MRS (Страсбург, Франция, 1999), Четвёртой Санкт-Петербургской Ассамблее молодых учёных и специалистов (С.-Петербург, 1999), Третьей Международной конференции SCART (Цюрих, Швейцария, 2000), Международной конференции E-MRS – IUMRS (Страсбург, Франция, 2000), 12^{ой} Американской конференции по выращиванию кристаллов и эпитаксии

(Колорадо, США, 2000), семинаре кафедры гидроаэродинамики Санкт-Петербургского государственного технического университета под руководством проф. Ю.В.Лапина (С.-Петербург, 2000).

Публикации по теме диссертации

Основные результаты работы изложены в пяти научных публикациях.

Структура и объём работы

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы из 166 наименований. Работа изложена на 218 страницах машинописного текста, включая 13 таблиц и 120 рисунков.

Содержание работы

Во введении показаны актуальность проблемы, её научное и практическое значение, приведены основные задачи работы.

В первой (обзорной) главе отражены наиболее яркие результаты физического и математического моделирования гидродинамики и теплообмена в реальных установках метода Чохральского и в моделях тигля упрощённой геометрии.

Раздел 1.1 представляет введение в проблему моделирования конвекции расплава при выращивании полупроводниковых кристаллов по методу Чохральского. Основу данного метода составляет процесс кристаллизации полупроводника на охлаждаемой затравке, которую с определенной скоростью вытягивают вверх из расплава, помещаемого в подогреваемый тигель (см. схему тигля на рис. 6). В условиях, характерных для промышленно применяемых в настоящее время устройств выращивания кристаллов по методу Чохральского, значения числа Релея $Ra = (g\beta\Delta T H^3)/(va)$ составляют $10^6 - 10^8$ и более; здесь g – ускорение свободного падения, β – температурный коэффициент расширения, ΔT – характерный перепад температуры, H – высота ёмкости, v – кинематический коэффициент вязкости; a – коэффициент температуропроводности. Конвекция расплава при этом носит многомодовый нестационарный, а зачастую и развитый турбулентный характер.

В разделе 1.2 сопоставлены имеющиеся в литературе экспериментальные и расчётные результаты, доказывающие пространственный характер конвекции расплава. Указано, что имеющиеся экспериментальные данные не позволяют сформировать

достоверную картину структуры течения, представление о тепловом состоянии расплава также остаётся весьма приблизительным. Литературные данные свидетельствуют, что численное моделирование конвекции расплава в осесимметричной постановке позволяет получить правдоподобные результаты только для ограниченного набора определяющих параметров, характерных для лабораторных установок выращивания кристаллов по методу Чохральского малого размера. В то же время работы, посвящённые численному моделированию конвекции при выращивании кристаллов по методу Чохральского в трёхмерной постановке, до сих пор ограничивались рассмотрением емкостей упрощённой (цилиндрической) геометрии для умеренных чисел Ra .

В разделе 1.3 проанализированы основные концепции того, какие механизмы неустойчивости оказывают наиболее существенное влияние на конвекцию расплава. Подробно рассмотрены неустойчивость подогреваемого снизу вращающегося слоя и бароклинная неустойчивость.

Основные выводы, сформулированные на основе обзора, изложены в разделе 1.4.

Во второй главе рассматриваются математическая модель (раздел 2.1) и численный метод (раздел 2.2), на основе которых были проведены расчёты конвекции. Течение расплава описывается системой трёхмерных нестационарных уравнений Навье-Стокса, записанных во вращающейся с постоянной угловой скоростью Ω системе координат, в совокупности с уравнением энергии. Для учёта эффектов плавучести в поле силы тяжести и центробежной силы используется приближение Буссинеска. При проведении расчётов применялась разработанная на кафедре гидроаэродинамики СПбГТУ с участием автора новая версия программного комплекса SINF. Программа SINF-2 позволяет проводить расчёты стационарных и нестационарных течений несжимаемой жидкости или газа, развивающихся в общем случае в областях сложной геометрии. Используются многоблочные структурированные неравномерные сетки, согласованные с границами области течения. Для получения нестационарных решений реализованы схемы как первого, так и второго порядка. При этом на каждом шаге по физическому времени итерации осуществляются по методу искусственной сжимаемости. Для расчёта конвективных слагаемых применяется схема QUICK, а при дискретизации дифференциальных операторов, отражающих действие вязкости, применяется центральная разностная схема второго порядка. Применявшийся в рамках настоящей работы алгоритм многоблочных вычислений подразумевает, что сетки не

перекрываются и генерируются таким образом, что сеточные линии продолжаются при переходе из одного блока в другой. При этом используется концепция вспомогательного виртуального блока, что обеспечивает полную “прозрачность” межблочных границ и сохранение консервативных свойств разностной схемы.

Третья глава составляет методическую основу диссертации, в ней описаны проведённые в достаточно большом объёме методические и тестовые расчеты.

Раздел 3.1 посвящён рассмотрению стационарной конвекции и возникновения автоколебательных режимов в квадратных полостях ($A = L/H = 1$) с разнагретыми боковыми стенками как при умеренных ($Pr = 0,71$), так и при малых ($Pr = 0,023$) значениях числа Прандтля. Стационарные решения были получены в широком диапазоне чисел Релея на сетках размерностью $20^2 - 200^2$ ячеек, здесь и далее использовались сетки со сгущёнными к стенкам узлами. Проведённое сравнение с данными других авторов показало хорошее согласие результатов на сетках порядка 80^2 и более. Для расчётов нестационарной конвекции при малой надкритичности схема первого порядка точности по времени оказалась неприемлемой, так как даже в случае малых шагов по времени заведомо автоколебательное решение оставалось стационарным. В связи с этим все расчёты нестационарной конвекции в главах 3 – 5, кроме исследования конвекции расплава кремния во вращающейся кольцевой полости в разделе 4.1, проводились с использованием трёхслойной схемы второго порядка по времени. Для $Pr = 0,71$ был проведён расчёт квазипериодического режима с двумя ведущими частотами при $Ra = 3 \times 10^8$ на сетке 96^2 . Выполненное сопоставление с данными [Janssen R.J.A., Henkes R.A.W.M. J. Fluid Mech. – 1995. – Vol. 290. – P.319-344] показало хорошее согласие по структуре течения и частотам развивающихся автоколебаний. Для $Pr = 0,023$ были рассчитаны три режима конвекции при малой надкритичности на сетке 80^2 и проведена оценка критического числа Релея ($Ra_{cr} \approx 6,4 \times 10^4$), сопоставление с [Bergman T.L., Ball K.S. In: Heat Transfer 1994 / Proc. 10th Int. Heat Transfer Conf. Brighton UK, 1994. Vol.7. P.7-12] показало хорошее согласование результатов.

В разделе 3.2 приведены результаты расчётов стационарной естественной конвекции воздуха ($Pr = 0,71$) в кубической полости с двумя боковыми стенками, поддерживаемыми при разных температурах; представлены данные для $Ra = 10^4, 10^5, 10^6$, полученные на сетках $20^3, 30^3, 40^3, 60^3$. Проведённое сопоставление с результатами других авторов свидетельствует, что уже на сетке 40^3 для $Ra = 10^6$ погрешность в определе-

нии максимальных значений компонент скорости составляет не более 1,4%, а в определении среднего числа Нуссельта на изотермических стенках 0,2%.

В качестве тестового расчёта в конфигурации, моделирующей тигель метода Чохральского, в разделе 3.3 рассмотрена трёхмерная нестационарная конвекция при малой надкритичности в подогреваемой сбоку неподвижной цилиндрической ёмкости с расположенным на свободной поверхности диском ($A = R_c/H = 1$, $\beta = R_s/H = 0,4$, форма ёмкости аналогична показанной на рис. 1в). Расчёты проводились в условиях работы [Никитин Н.В., Полежаев В.И. Изв. РАН. МЖГ. – 1999. – №3. – С.26-39] ($Ra = 5 \times 10^4$, $Pr = 0,05$) на двухблочной сетке размерностью 41472 ячейки. Оптимальным шагом по безразмерному времени при этом было признано значение $\Delta t \approx 0,125$. Рассматриваемое течение является квазипериодическим, в ёмкости присутствует упорядоченная вихревая структура с волновым числом $m = 3$. Сопоставление с расчётом Никитина, Полежаева показало хорошее совпадение результатов.

Четвёртая глава посвящена численному моделированию конвекции в моделях тигля метода Чохральского и описанию проявляющихся в них бароклинной неустойчивости и неустойчивости центрального вихря.

В разделе 4.1 рассматриваются проявления бароклинной неустойчивости во вращающихся кольцевых полостях. Были проведёны расчёты конвекции воды в условиях эксперимента [Fein J.S. Geophys. Fluid Dyn. – 1973. – Vol. 5. – P.213-248] и ртути в условиях эксперимента [Fein J.S., Pfeffer R.L. J. Fluid. Mech. – 1976. – Vol 75. – P.81-112], в обоих случаях приняты геометрические соотношения $R_i : \Delta R = 1,37$, $H : \Delta R = 1,97$, здесь $\Delta R = R_o - R_i$ – масштаб длины, полость подвергается нагреву сбоку. Форма полости и тепловые граничные условия показаны на рис. 1а (для скорости на

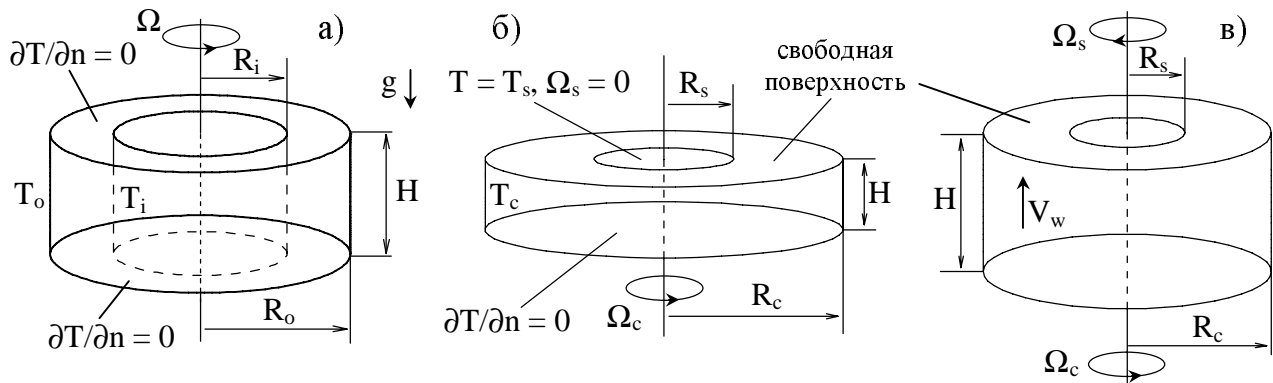


Рис. 1. Геометрия расчётных областей: (а) – кольцевая полость; (б) – цилиндрическая ёмкость; (в) – цилиндрическая ёмкость для модельной задачи в отсутствие сил плавучести.

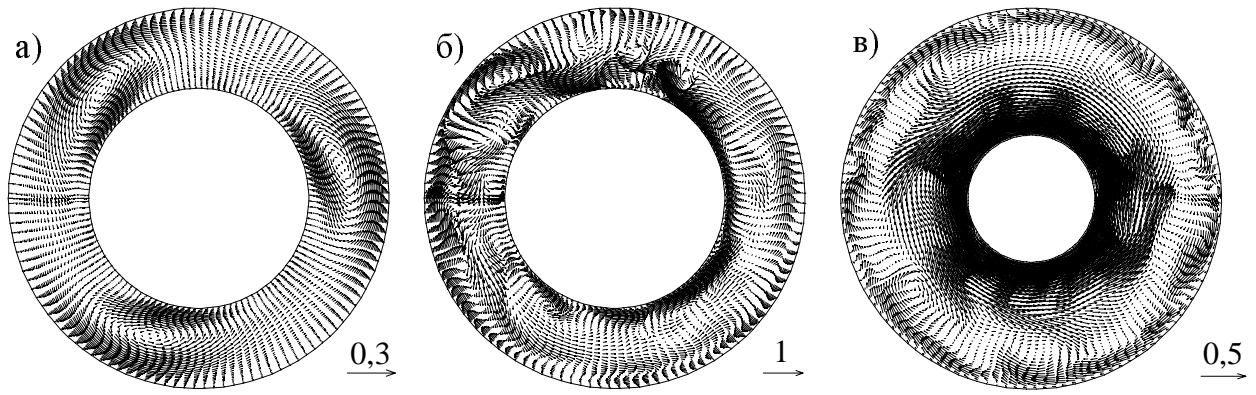


Рис. 2. Моментальные поля скорости в горизонтальном сечении кольцевой полости: (а) – $Pr = 7,16$, сечение $z = 0,94$; (б) – $Pr = 0,025$, $z = 0,94$; (в) – $Pr = 0,015$, $z = 0,48$.

стенках полости задаётся условие прилипания). Для воды ($Pr = 7,16$, $Ra = 6,8 \times 10^6$, $Ra_\Omega = (\Omega^2 \beta \Delta T (\Delta R)^4) / (\nu a) = 4,5 \times 10^4$, $Ro = (g \beta \Delta T \Delta R)^{1/2} / \Omega \Delta R = 0,97$) воспроизведён режим регулярных волн, вихревая структура с волновым числом $m = 3$ (см. рис. 2а) медленно прецессирует в направлении основного вращения. Эволюция нормированной температуры во вращающейся точке мониторинга, связанной с полостью, представлена на рис. 3а, к концу рассчитанной выборки период составил более 400 временных единиц. Течение является периодическим, об этом свидетельствует энергетический спектр колебаний (рис. 3г), на котором можно выделить только одну независимую характерную частоту. Для ртути ($Pr = 0,025$) был рассчитан режим негеострофической турбулентности с неупорядоченными трёхмерными пульсациями скорости и температуры ($Ra = 6,9 \times 10^4$, $Ra_\Omega = 13$, $Ro = 1,04$), см. рис. 2б, 3б, 3д. И для воды, и для ртути представленные результаты расчётов на сетке 288 тыс. ячеек с шагами по

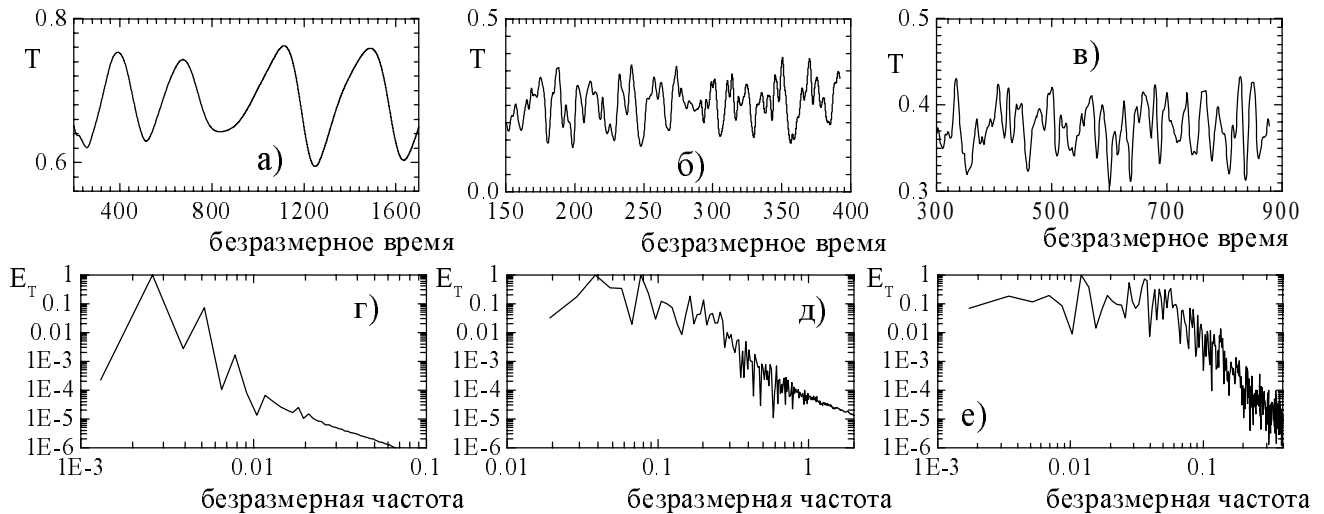


Рис. 3. Колебания температуры и соответствующие энергетические спектры при конвекции в кольцевой полости: (а, г) – $Pr = 7,16$, точка мониторинга $r = 1,84$, $z = 0,94$; (б, д) – $Pr = 0,025$, точка $r = 1,6$, $z = 0,5$; (в, е) – $Pr = 0,015$, точка $r = 0,55$, $z = 0,55$.

безразмерному времени, соответственно, 0,1 и 0,025 согласуются с экспериментальными данными. Расчёты на грубой сетке размерностью 36 тыс. ячеек не позволяют произвести количественные оценки, хотя и дают в целом правильную качественную картину поведения жидкости.

Конвекция расплава кремния ($Pr = 0,015$) была рассчитана в кольцевой ёмкости иной формы ($R_i : \Delta R = 1,5$, $H : \Delta R = 1$) в условиях одновременного нагрева и сбоку, и снизу. Для значений определяющих параметров $Ra = 2,7 \times 10^5$, $Ra_\Omega = 71$, $Ro = 4,7$ был получен автоколебательный режим течения с нерегулярными пульсациями (см. рис. 3в, 3е), на фоне которых можно выделить прецессирующую вихревую структуру с $m = 5 - 8$ (см. рис. 2в). Представленные результаты получены с использованием схемы первого порядка по времени ($\Delta t = 0,1$) на сетке 192 тыс. ячеек. Проведённые методические исследования показали, что в условиях сильной заkritичности использование схемы первого порядка в случае не слишком мелких шагов по времени не позволяет получать решения достаточно высокого качества.

В разделе 4.2 проведено численное моделирование конвекции ртути ($Pr = 0,025$) во вращающейся цилиндрической ёмкости с расположенным на свободной поверхности неподвижным диском ($A = 2,5$, $\beta = 1$, $Ra = 1,76 \times 10^5$, $Ra_\Omega = 8,96 \times 10^3$, $Ro = 0,746$). Форма ёмкости и граничные условия показаны на рис. 1б (на свободной поверхности задаётся $\partial u/\partial z = \partial v/\partial z = 0$, $w = 0$, $\partial T/\partial z = 0$). В результате расчётов на сетке 53760 яче-

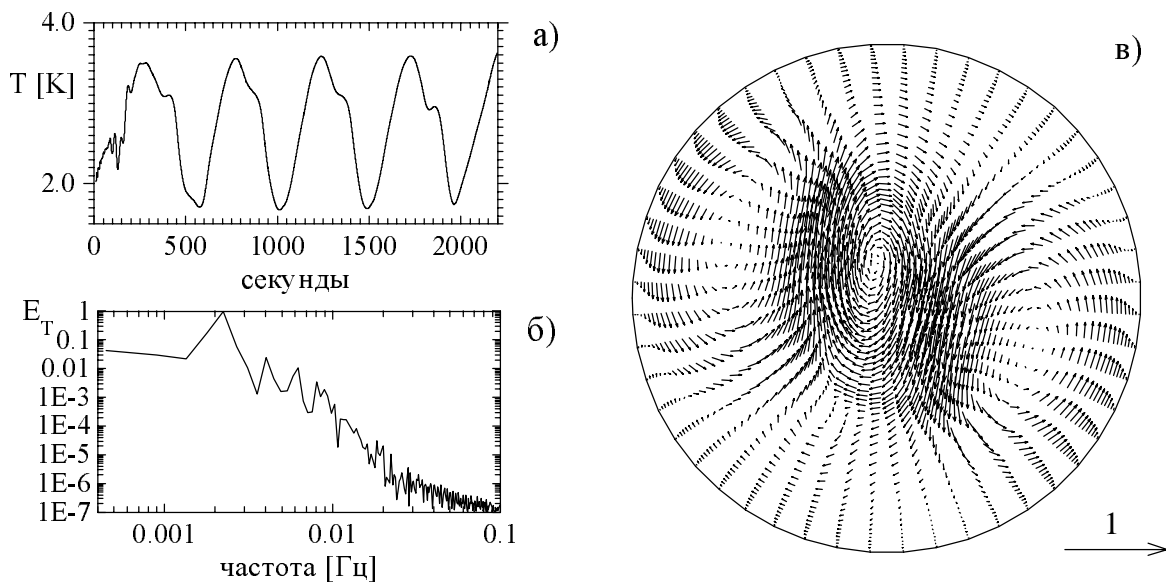


Рис. 4. Конвекция в цилиндрической ёмкости при $Pr = 0,025$: (а) – эволюция температуры в точке мониторинга $r = 1,4$, $z = 0,67$; (б) – соответствующий энергетический спектр; (в) – моментальное распределение векторов скорости в горизонтальном сечении $z = 0,47$.

ек с шагом $\Delta t = 0,125$ была получена двухвихревая структура с волновым числом $m = 2$ (см. рис. 4в), прецессирующая в направлении, противоположном направлению вращения ёмкости. Период колебаний составил $T \approx 450$ с, а амплитуда – $A \approx 1,9$ К (рис. 4а). Экспериментальные данные [Lee Y.-S., Chun Ch.-H. J. Crystal Growth. – 1999. – Vol. 197. – P.297-306] для указанного набора параметров свидетельствуют о развитии бароклинной волны с $m = 1$ ($T \approx 240$ с, $A \approx 2$ К). Различие экспериментального и расчётного значений m , скорее всего, следует отнести на счёт гистерезиса волновых чисел, существование которого отмечено при наблюдении бароклинных волн в кольцевых полостях.

Раздел 4.3 посвящён рассмотрению модельной задачи в отсутствие сил плавучести, направленной на выявление роли неустойчивости центрального вихря в развитии трёхмерных автоколебательных процессов в расплаве при выращивании кристаллов по методу Чохральского. Рассматриваемая цилиндрическая ёмкость показана на рис. 1в, для создания типичной для моделей систем метода Чохральского меридиональной циркуляции боковая стенка приводится в движение вертикально вверх с по-

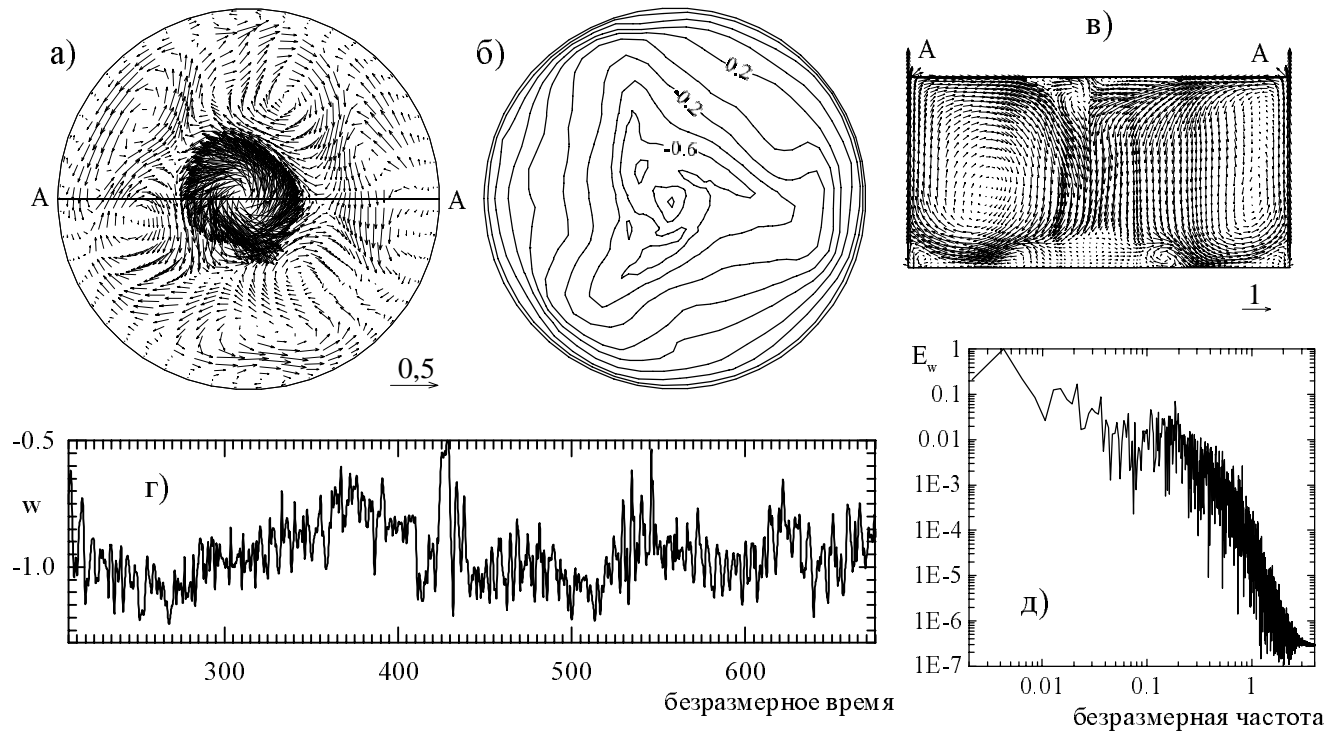


Рис. 5. Модельная задача во вращающейся цилиндрической ёмкости в отсутствие сил плавучести, $Re = 2400$, $Ro = 10$, $Re_s = 540$: моментальные распределения векторов скорости (а) и вертикальной скорости (б) в сечении $z = 0,5$; моментальное распределение векторов скорости (в) в вертикальном сечении А-А; эволюция вертикальной скорости в точке $r = 0$, $z = 0,53$ (г) и соответствующий энергетический спектр (д).

стоянной скоростью V_w . Расчёты на сетке 41472 ячеек с шагом $\Delta t = 0,125$ проводились при следующих значениях определяющих параметров: $A = 1 - 2$, $\beta = 0,5 - 1$, $Re = V_w H / \nu = 800 - 2400$, $Ro = 10 - 20$, $Re_s = 360 - 760$. Выявлено, что потеря устойчивости, ведущая к возникновению квазипериодических и стохастических режимов течения, в рассматриваемых случаях чисто гидродинамических течений наступает сравнительно рано. Появление сильных трёхмерных пульсаций скорости, характеризующихся несколькими ведущими частотами, происходит при достижении числом Re значений порядка 10^3 . Трансформация квазипериодического течения в полностью хаотическое наблюдается при значениях Re , не превышающих нескольких тысяч. На рис. 5 представлены результаты, относящиеся к хаотическому режиму течения, $Re = 2400$. Видно, что в окрестности оси вращения формируется сильно закрученный нисходящий поток (рис. 5а – 5в). Возникающие сильные колебания характеризуются периодом из диапазона 2 – 10 временных единиц (рис. 5г). Одновременно с преобладанием высоких частот на кривой эволюции вертикальной скорости (рис. 5г) заметна низкочастотная модуляция, период $T \approx 200$. Важным свойством описываемых нестационарных течений является тот факт, что они являются существенно трёхмерными.

В пятой главе рассматривается конвекция во вращающихся емкостях, усложнённая форма которых типична для тиглей систем метода Чохральского.

Раздел 5.1 посвящён выявлению условий бифуркации осесимметричного стационарного течения в трёхмерное стационарное в невращающемся тигле чечевицеобразной формы с расположенным на поверхности плоским диском ($A = 1,5$, $\beta = 0,5$). При $Ra = 300$ точность осесимметричного решения, рассчитанного в изначально трёхмерной постановке на сетке, аналогичной приведённой на рис. 6, тестировалась путём сравнения с эталонным решением, полученным в осесимметричной постановке. В диапазоне чисел Релея $Ra \approx 10^3 - 4,8 \times 10^3$, проявляются трёхмерные эффекты при сохранении стационарного характера течения, на основную меридиональную циркуляцию накладывается вторичное течение в виде двух трёхмерных структур. При значениях числа Релея, превышающих $4,8 \times 10^3$ стационарное решение получить не удалось.

В разделе 5.2 содержатся результаты параметрических расчётов трёхмерной нестационарной конвекции во вращающемся тигле с размещённым на поверхности противовращающимся центральным телом, моделирующим кристалл с близкой к реальной формой интерфейса кристалл/расплав (см. рис. 6). Структуру течения при изме-

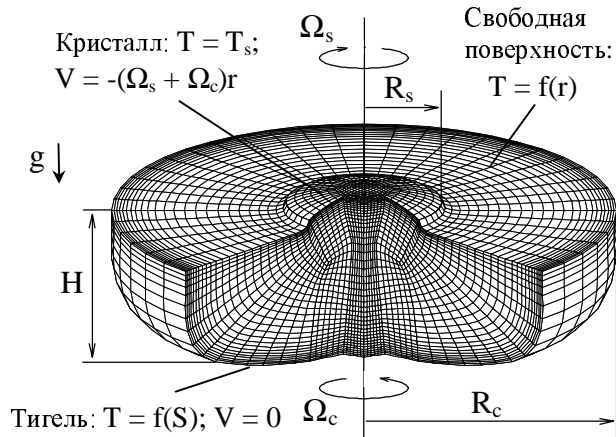


Рис. 6. Геометрия ёмкости и трёхблочная расчётная сетка размерностью 35712 ячеек.

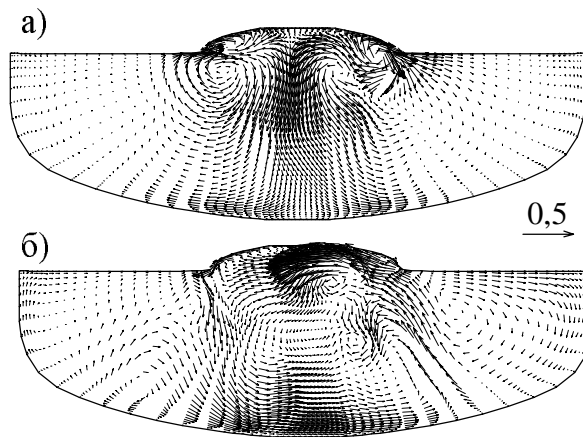


Рис. 7. Моментальные распределения скорости в вертикальном сечении: $Ra = 5,9 \times 10^3$ (а) и $Ra = 6,6 \times 10^4$ (б); $Ro = 1,38$; $Pr = 0,015$.

нении числа Релея на порядок иллюстрирует рис. 7: течение разделяется на две подобласти – подкристальную область, характеризующуюся интенсивным движением непосредственно под центральным телом и нисходящим центральным вихрём, и периферийную область, где течение сильно подавлено вращением. Рис. 8а, 9а и 9г свидетельствуют, что течение при $Ra = 6,6 \times 10^4$ следует отнести к хаотическому режиму. Вообще, во всём рассмотренном диапазоне чисел Релея ($Ra = 1,5 \times 10^3 - 6,6 \times 10^4$) были получены квазипериодические и стохастические режимы конвекции. Скорее всего, причиной столь раннего возникновения колебаний расплава во вращающемся тигле является проявление неустойчивости закрученного центрального вихря чисто гидродинамической природы, рассмотренной на модельной задаче в разделе 4.3.

При $Ra = 6,6 \times 10^4$ было исследовано влияние вращения кристалла и тигля на кон-

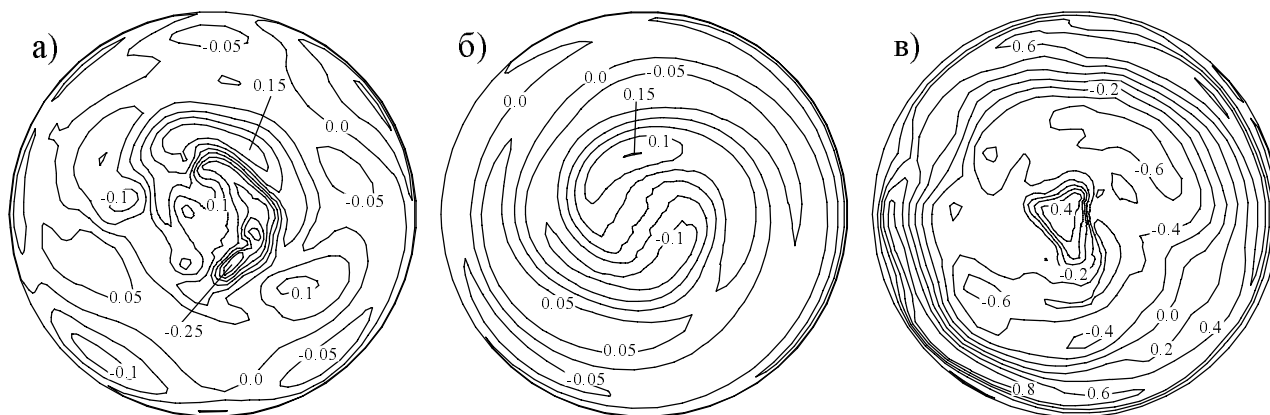


Рис. 8. Моментальные распределения вертикальной скорости в горизонтальном сечении $z = 0,64$ для $Ra = 6,6 \times 10^4$, $Pr = 0,015$: (а) – $Ro = 1,38$, $Re_s = 1732$; (б) – $Ro = 1,38$, кристалл неподвижен; (в) – $Ro = 6,67$, $Re_s = 1732$.

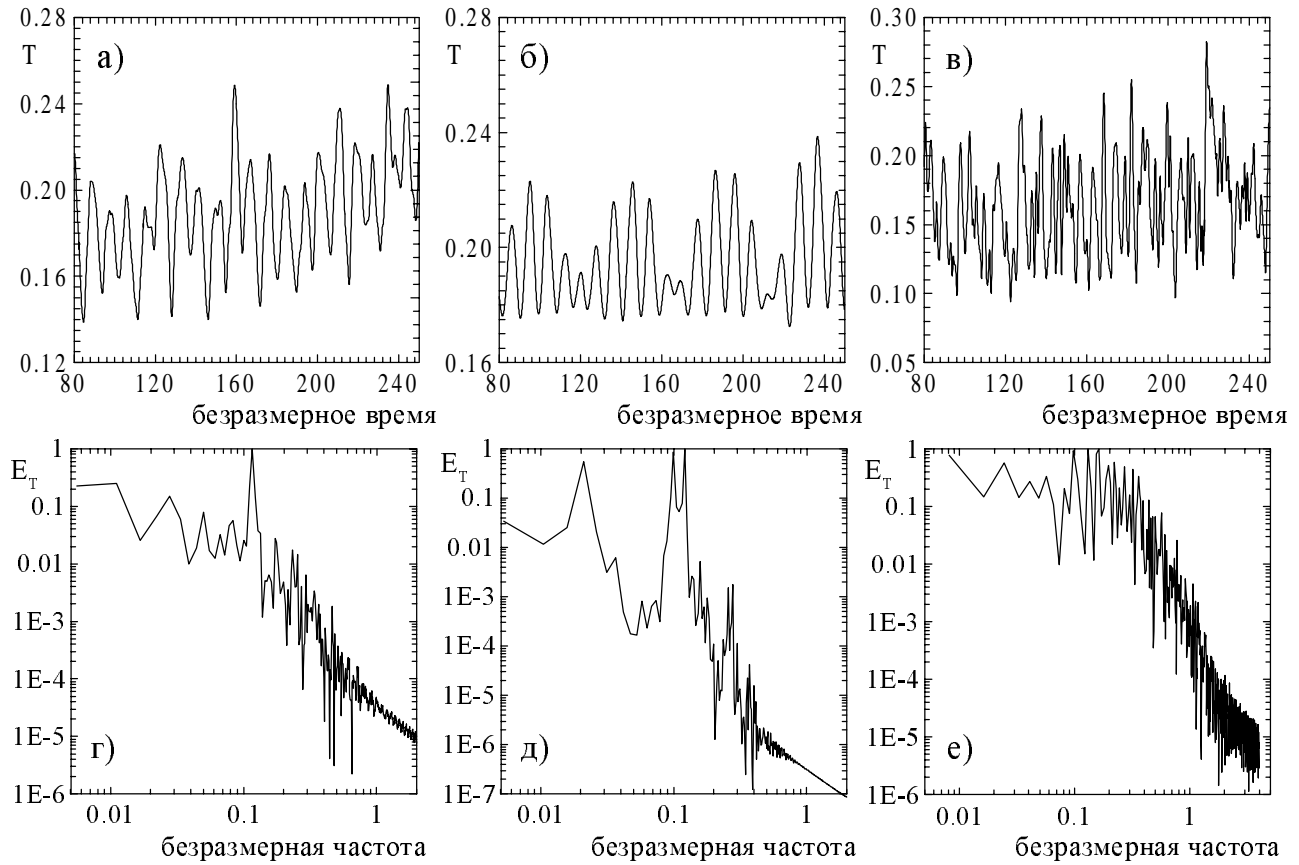


Рис. 9. Колебания температуры в точке $\gamma = 0,1$, $z = 0,9$ и соответствующие энергетические спектры для $Ra = 6,6 \times 10^4$, $Pr = 0,015$: (а, г) – $Ro = 1,38$, $Re_s = 1732$; (б, д) – $Ro = 1,38$, кристалл неподвижен; (в, е) – $Ro = 6,67$, $Re_s = 1732$.

векцию и тепловое состояние расплава. В случае с остановленным кристаллом распределение вертикальной скорости (рис. 8б), кривая колебаний температуры (рис. 9б) и соответствующий спектр (рис. 9д) свидетельствуют о большей упорядоченности течения. Напротив, увеличение числа Россби (ослабление вращения) оказывает дестабилизирующее воздействие на расплав: имеет место резкая интенсификация движения (см. рис. 8в), эволюция температуры (рис. 9в) и энергетический спектр (рис. 9е) подчёркивают сугубо хаотический характер конвекции.

Проведённый анализ осреднённых характеристик позволяет сделать вывод о том, что для рассмотренных режимов конвекции трёхмерный характер течения расплава оказывает существенное влияние на осреднённые поля. На рис. 10 показаны осреднённые распределения скорости и температуры в вертикальном сечении для $Ra = 6,6 \times 10^4$, полученные в трёхмерной постановке. Сопоставление осреднённого поля скорости (рис. 10а) с моментальным (рис. 7б) показывает, что значения осреднённых скоростей существенно меньше актуальных как в подкристальной области, так и

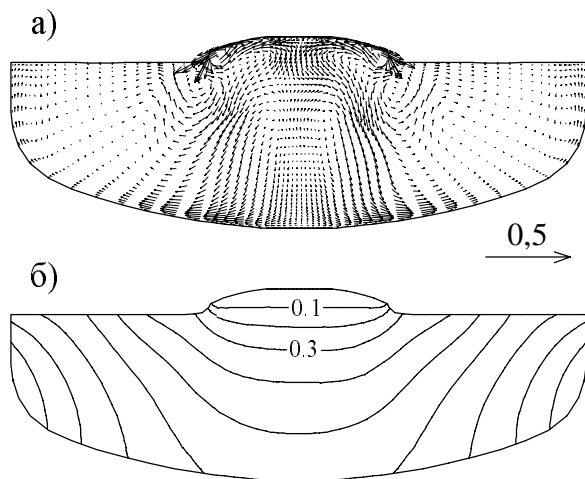


Рис. 10. Осреднённые поля скорости (а) и температуры (б), рассчитанные в трёхмерной постановке; $Pr = 0,015$, $Ra = 6,6 \times 10^4$, $Ro = 1,38$, $Re_s = 1732$; осреднение проводилось за 50 временных единиц.

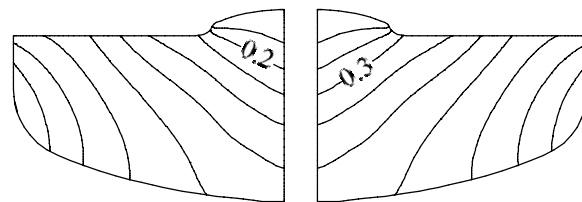


Рис. 11. Осреднённое за период поле температуры, рассчитанное в осесимметричной постановке.

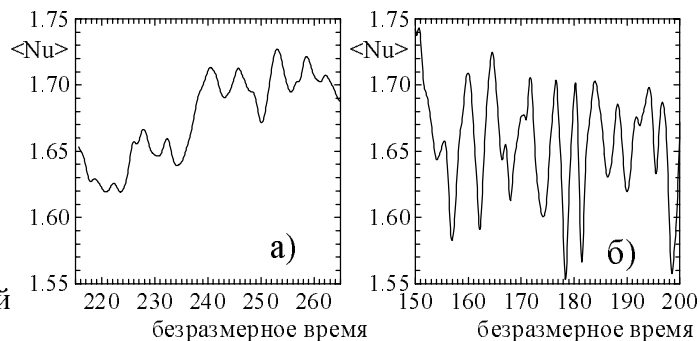


Рис. 12. Эволюция средней теплоотдачи через интерфейс кристалл/расплав для $Pr = 0,015$, $Ra = 6,6 \times 10^4$, $Re_s = 1732$: (а) – $Ro = 1,38$, (б) – $Ro = 6,67$.

на периферии течения. Распределение осреднённой температуры (рис. 10б) иллюстрирует сильное выравнивание температуры в подкристалльной области, изотермы практически горизонтальны. Это свидетельствует об относительной однородности подводимого к интерфейсу кристалл/расплав теплового потока. В то же время на осреднённом поле температуры, полученном в осесимметричной постановке (рис. 11), изотермы имеют выраженный провал в подкристалльной области.

Принципиально важной характеристикой, позволяющей непосредственно судить о качестве получаемого кристалла, является тепловой поток, подводимый к интерфейсу кристалл/расплав. Степень изменения во времени среднего теплового потока через интерфейс $\langle Nu \rangle$ весьма существенна, особенно для случая слабого вращения тигля (рис 12б), пульсации $\langle Nu \rangle$ при $Ro = 6,67$ составляют 5–7 %. В случае $Ro = 1,38$ (рис 12а) имеет место выраженная низкочастотная составляющая изменений среднего теплового потока. Таким образом, трёхмерные пульсации температуры оказывают сильное влияние на величину теплового потока, подводимого к интерфейсу кристалл/расплав. Следует предположить, что сильно меняющийся во времени подводимый к интерфейсу тепловой поток создаёт условия для появления флуктуаций скорости роста кристалла, что может приводить к неоднородностям его свойств.

В заключении кратко сформулированы основные результаты, полученные в ходе выполнения диссертационной работы, которые состоят в следующем:

- 1) Разработан и реализован метод численного моделирования квазипериодических и стохастических режимов конвекции в областях сложной геометрии; проведённое тестирование алгоритма показало хорошее согласие результатов с экспериментальными и расчётными данными других авторов.
- 2) Накоплена ценная методическая информация по проведению расчётов трёхмерных автоколебательных режимов, включая условия слабой и сильной надкритичности.
- 3) Получены подробные данные о полях скорости и температуры для условий, при которых во вращающихся кольцевых или цилиндрических емкостях возникают структуры, обусловленные бароклинной неустойчивостью; воспроизведены наблюдавшиеся в экспериментах режимы регулярных волн для малых и больших чисел Прандтля и режимы негеострофической турбулентности для малых чисел Прандтля; выявленные свойства конвекции во вращающихся емкостях могут способствовать более рациональным постановкам последующих опытов.
- 4) Поставлена и исследована модельная задача изотермического течения во вращающейся ёмкости с примыкающим противовращающимся центральным диском, направленная на выявление роли неустойчивости центрального вихря в развитии трёхмерных автоколебательных процессов в установках метода Чохральского; проведённые вычисления показали, что эта роль может быть определяющей и в режимах тепловой конвекции.
- 5) Для неподвижной ёмкости, усложнённая форма которой типична для тиглей, используемых при выращивании кристаллов по методу Чохральского, выявлены условия бифуркации осесимметричного стационарного течения в трёхмерное стационарное.
- 6) Проведены параметрические расчёты трёхмерных квазипериодических и стохастических режимов конвекции во вращающейся ёмкости с геометрией, типичной для тиглей в процессе Чохральского; получен обширный набор данных об эволюции структуры конвекции при изменении определяющих параметров и спектральном составе пульсаций.
- 7) Установлено, что превышение критического числа Релея на порядок приводит к развитию интенсивных крупномасштабных трёхмерных пульсаций в центральной

(подкристалльной) области, при этом противовращение кристалла дестабилизирует течение расплава, а увеличение скорости вращения тигля, напротив, оказывает стабилизирующее влияние.

- 8) Проведён анализ осреднённых характеристик течения; показано, что значения осреднённых скоростей существенно меньше актуальных как в подкристалльной области, так и на периферии течения.
- 9) Выявлено, что трёхмерные пульсации приводят к сильным изменениям во времени локального и среднего теплового потока, подводимого к интерфейсу кристалл/расплав.
- 10) Показано, что трёхмерность течения существенно изменяет статистически осесимметричные поля скорости и температуры по сравнению с полученными в изначально осесимметричной постановке; трёхмерные пульсации в сильной мере уменьшают радиальную неоднородность подводимого в среднем к интерфейсу теплового потока по сравнению с результатами решения осесимметричной задачи.

Основные результаты диссертации опубликованы в работах:

1) Иванов Н.Г. Численное моделирование трёхмерной нестационарной смешанной конвекции во вращающейся кольцевой полости // Третья Санкт-Петербургская Ассамблея молодых учёных и специалистов. Тезисы докладов. – СПб, 1998. – С.56-57.

2) Иванов Н.Г., Рудинский Э.А. Численное моделирование ламинарной свободной конвекции в областях сложной геометрии при малых числах Прандтля // Вестник молодых ученых, серия технические науки. – 1998. – №1. – С.40-46.

3) Иванов Н.Г., Смирнов Е.М. Вычислительные аспекты задач моделирования бароклинных волн, развивающихся во вращающейся кольцевой полости // Тезисы докладов научно-технической конф. “Проблемы мореходных качеств судов и корабельной гидромеханики” (XXXIX Крыловские чтения 1999г.). – СПб, 1999. – С.179-180.

4) Иванов Н.Г., Смирнов Е.М. Численное моделирование развития автоколебаний расплава в установках метода Чохральского // Четвёртая Санкт-Петербургская Ассамблея молодых ученых и специалистов. Тезисы докладов. – СПб, 1999. – С.42.

5) Goriatchev V., Ivanov N., Smirnov E. Postcomputational visualization of baroclinic wave drift / In: Proc. 3rd Int. Conf. on Flow Interaction of Science and Art, Zürich, Switzerland, 2000. P.211-216.