



УДК 681.518: 666.1/28

С. П. Малюков, Ю. В. Клунникова

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ПОЛЕЙ В МОНОКРИСТАЛЛАХ САПФИРА ДЛЯ ОЦЕНКИ ПРОЦЕССОВ ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЯ

Рассчитан градиент температур в кристаллах сапфира, выращенных методом горизонтальной направленной кристаллизации. Применяется математическое моделирование в трехмерных координатах методом конечных объемов на неструктурированной сетке. Проведена оценка размеров и поведения газовых пузырьков вблизи фронта кристаллизации расплава сапфира. Результаты моделирования процессов в кристалле сапфира позволяют решать задачу получения кристаллов с пониженным уровнем дефектов.

Технологический процесс, метод горизонтальной направленной кристаллизации, монокристаллы сапфира, распределение температур

Парогазовые включения в виде микропор являются одними из главных и распространенных дефектов в кристаллах сапфира [1], [2]. При всём многообразии и сложности механизмов образования пор общим, сопутствующим условием их появления является пересыщение расплава растворенными газами в результате диссоциативного испарения материала шихты и процессов разложения молекулярных соединений в самом расплаве.

В случае получения монокристаллов сапфира методом горизонтально направленной кристаллизации (ГНК) проекция архимедовой скорости на направление движения фронта равна нулю, а направление температурного градиента в расплаве совпадает с направлением скорости фронта роста. Учитывая, что в стационарном режиме термокапиллярная сила [3], [4] равна

$$F_k = -2\pi \cdot r^2 \frac{\partial \alpha}{\partial T} \nabla T,$$

где r – радиус газового пузырька; α – поверхностное натяжение на границе газ–жидкость; ∇T – направление температурного градиента в расплаве, и должна быть равна силе вязкого сопротивления среды [5]

$$F_c = 6\pi \cdot r \cdot \mu \cdot v_k$$

Скорость термокапиллярного перемещения пузырька относительно жидкости можно определить по формуле

$$v_k = \frac{r}{3 \cdot \mu} \frac{\partial \alpha}{\partial T} \nabla T.$$

Здесь v_k – компонент скорости движения пузырька относительно расплава, вызванный действием капиллярной силы; μ – динамическая вязкость жидкости, а также учтено, что для большинства жидкостей производная $\partial \alpha / \partial T < 0$. При архимедовой скорости $v_a = 0$ скорость движения пузырька относительно фронта роста определяется равенством

$$v_{\Pi} = \frac{r}{3 \cdot \mu} \frac{\partial \alpha}{\partial T} \nabla T - v_{\Phi}, \quad (1)$$

где v_{Φ} – скорость фронта растущего кристалла.

Как видно из равенства (1), в ансамбле пузырьков в расплаве имеются пузырьки критического размера r , при котором меняется направление движения пузырька относительно поверхности роста кристалла. Газовые пузырьки, размер которых

$$r > r^* = \frac{3 \cdot \mu}{\nabla T} \frac{v_{\Phi}}{\partial \alpha / \partial T}, \quad (2)$$

будут двигаться в направлении от фронта, а пузырьки меньших размеров ($r < r^*$) – в обратном направлении к фронту роста кристаллов.

В процессе кристаллизации пузырьки с радиусом $r < r^*$, оказавшись в непосредственной близости от поверхности фазового превращения, будут захватываться фронтом роста, создавая систему устойчивых дефектов в объёме материала.

Для оценки процессов дефектообразования в монокристаллах сапфира необходимо рассчитать распределение температур в установках для получения сапфира методом ГНК. Задача нахождения распределения температуры в системе «кристалл–расплав–шихта» сводится к решению уравнений теплопроводности [6], [7]:

$$\frac{\partial T_i(x, y, z, \tau)}{\partial \tau} = \left(\frac{\partial}{\partial x} a_i \frac{\partial T_i(x, y, z, \tau)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} a_i \frac{\partial T_i(x, y, z, \tau)}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} a_i \frac{\partial T_i(x, y, z, \tau)}{\partial z} \right) -$$

$$- W \frac{\partial T_i(x, y, z, \tau)}{\partial x},$$

$$0 < x < x_L, \quad 0 < y < y_L, \quad 0 < z < z_L,$$

где $i = 1, 2, 3$ – соответственно, кристалл, расплав и шихта; $a_i = \frac{\lambda_i}{\rho_i \cdot C_i}$ – коэффициенты температуропроводности (λ_i – коэффициент теплопроводности; ρ_i – плотность материала; C_i – удельная теплоемкость); W – скорость движения контейнера.

В связи с малой скоростью движения контейнера установки для роста монокристаллов сапфира можно сделать вывод о том, что процесс находится в квазистационарном состоянии, а распределение температуры можно найти по следующей формуле [6], [7]:

$$\operatorname{div}[\lambda_i \operatorname{grad} T_i(x, y, z)] = 0.$$

Граничные условия для системы уравнений (3)–(5), отражающие неразрывность тепловых полей и тепловых потоков на границах раздела сред, записываются в виде следующих соотношений:

$$\lambda_1 \frac{\partial T_1(x_T, y, z)}{\partial x} = \lambda_2 \frac{\partial T_2(x_T, y, z)}{\partial x}; \quad (3)$$

$$\lambda_2 \frac{\partial T_2(x_T + \Delta x, y, z)}{\partial x} = \lambda_3 \frac{\partial T_3(x_T + \Delta x, y, z)}{\partial x}; \quad (4)$$

$$q_{s_1} = q_{s_2} = q_{s_3} = \sigma \beta (T^4 - T_{\text{hot}}^4), \quad (5)$$

где σ – постоянная Стефана–Больцмана; β – коэффициент излучения; T_{hot} – функция, задающая распределение температуры на кристаллизаторах.

Моделирование проводилось с использованием метода конечных объемов (МКО) на неструктурированной сетке. Дискретный аналог уравнения теплопроводности для конечного объема (тетраэдра):

$$\sum_j \frac{\lambda(T_j - T_i) A_{ij}}{(x_j - x_i)n_{jx} + (y_j - y_i)n_{jy} + (z_j - z_i)n_{jz}} = 0,$$

где i -й объем – объем, для которого решается уравнение теплопроводности; j -й объем – соседний для i -го объема; A_{ij} – площадь общей грани i -го и j -го объемов; $\vec{n}_j(n_{jx}, n_{jy}, n_{jz})$ – нормаль к грани соседних i -го и j -го тетраэдров; $\vec{l}_j(x_j - x_i, y_j - y_i, z_j - z_i)$ – направление, вдоль которого определяется тепловой поток.

Результаты расчета распределения температур в системе «кристалл–расплав–шихта» показаны на рис 1. На рисунке представлены температурные поля: a – в системе «кристалл–расплав–шихта»; b – в вертикальном сечении кристалла.

Проведены расчеты при повышении уровня температур в системе «кристалл–расплав–шихта» на 300 К. Результаты показали, что ширина расплава увеличивается и, как следствие, меняется положение фронта кристаллизации. Из этого можно сделать вывод о возможности регулирования положения фронта кристаллизации повышением температуры нагревателя, что, в конечном счете, может привести к перераспределению дефектов.

Выполненные исследования для расчета температур в многослойной схеме вакуумной камеры показали, что поддон ростовой установки оказывает существенное влияние на формирование температурного поля не только внутри системы «кристалл–расплав–шихта», но

и в ростовой установке в целом, выполняя роль теплового экрана. Асимметрия распределения температуры относительно расплава составляет порядка 20 К, что приводит к необходимому изгибу фронта кристаллизации и способствует облегчению отвода пузырей от фронта. Образование пузырей в этом случае зависит от вязкости расплава перед фронтом кристаллизации и может быть устранено изменением технологических параметров выращивания (например, увеличением температуры нагревателя в среднем на 300 К). Для части контейнера с кристаллом, расположенного за нагревателем, поддон уменьшает отвод тепла и снижает осевые составляющие градиента температуры.

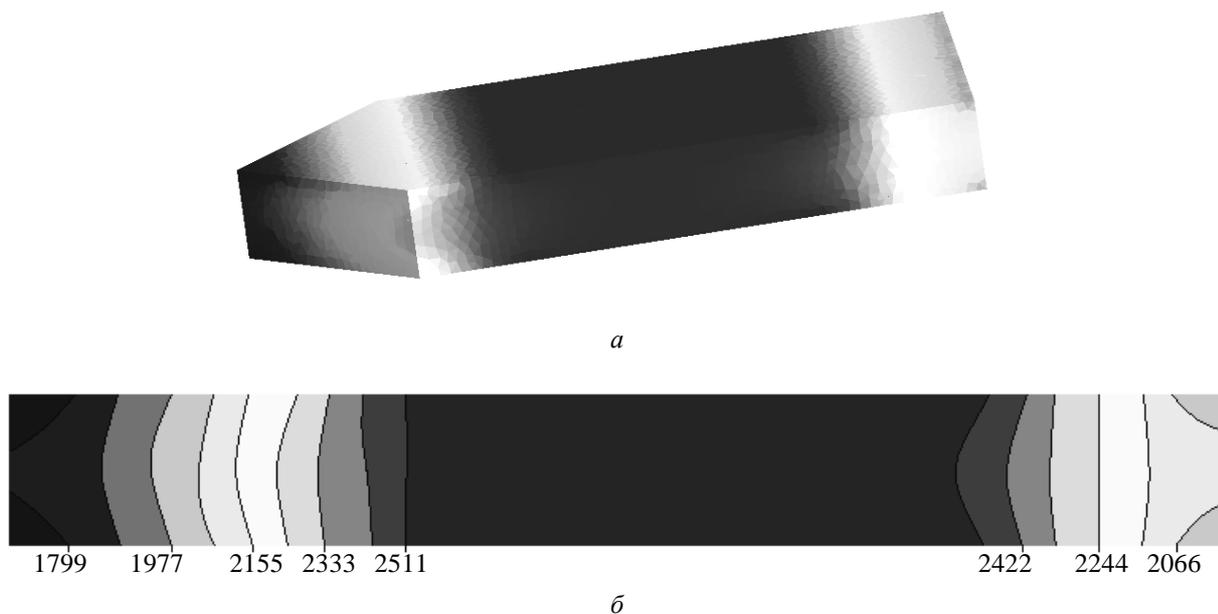


Рис. 1

Алгоритм прогноза качества монокристаллов сапфира приведен на рис. 2. По результатам моделирования устанавливаются зоны дефектообразования, выдаются рекомендации по повышению качества кристаллов. Уровень дефектов в кристаллах сапфира рассматривается как основной критерий при формировании целевой функции.

Численное моделирование процессов в кристалле сапфира позволяет в наглядной форме осмыслить природу физических явлений и выполнить количественные оценки параметров. Захват при кристаллизации из расплава включений и формирование термоупругих напряжений в кристалле определяют главные причины формирования дефектных структур твердой фазы.

Разработанная трехмерная модель решения задачи теплообмена в кристаллах сапфира позволяет выявить распределение температурного поля в кристалле. На основании данной модели методом наименьших квадратов рассчитаны градиенты температур в кристалле сапфира. Как видно из равенства (2), полученные градиенты температур позволили оценить размеры формируемых газовых пузырей. При захвате пузыря соотношение скоростей роста кристалла и пузыря определяет конечную форму включения. Полученные зависимости усредненного размера от скорости выращивания можно объяснить следующим образом.

При заданной скорости кристаллизации наибольшей вероятностью захвата характеризуются пузыри определенного радиуса (порядка 2 мм). Увеличение скорости роста будет приводить к увеличению вероятности захвата более крупных пузырей (порядка 4 мм).



Рис. 2

Результаты исследования позволяют проводить количественную оценку процессов дефектообразования в монокристаллах сапфира. Нарушение стабильности тепловых условий на фронте кристаллизации приводит к захвату в расплаве на границе раздела фаз газовых пузырей, обуславливающих возникновение пор в кристалле, которые, являясь концентраторами напряжений, служат дополнительным источником дислокаций и, как следствие, источником дефектов в виде блоков.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Малюков С. П., Стефанович В. А., Чердниченко Д. И. Исследование модели самосогласованного роста монокристаллов сапфира по методу горизонтальной направленной кристаллизации // Изв. вузов. Электроника. 2007. № 2. С. 3–9.
2. Теплофизические процессы при получении кристаллов лейкосапфира методом горизонтальной направленной кристаллизации / Г. А. Лебедев, С. П. Малюков, В. А. Стефанович, Д. И. Чердниченко // Кристаллография. 2008. Т. 53. С. 356–360.

3. Дзюба А. С., Ионг Зу Ю. Взаимодействие газовых пузырьков с фронтом кристаллизации расплава // Кристаллография. 1985. Т. 30. С. 1177–1179.
4. Гегузин Я. Е., Дзюба А. С. Роль открытых включений переохлажденного расплава в формировании газовых пузырей в тылу фронта кристаллизации // Кристаллография. 1981. Т. 26. С. 577–581.
5. Френкель, Я. И. Кинетическая теория жидкостей. Л.: Наука, 1975. 582 с.
6. Малеюков С. П., Клунникова Ю. В. Моделирование распределения температуры в процессе роста монокристаллов сапфира методом горизонтальной направленной кристаллизации в трехмерных координатах // Изв. ЮФУ. Технические науки. Тематический вып. «Нанотехнологии». 2011. № 4. С. 86–94.
7. Малеюков С. П., Клунникова Ю. В. Оптимизация производства изделий из сапфира для электронной техники. Германия: LAP Lambert Academic Publishing, 2012. 151 с.

S. P. Malyukov, Y. V. Klunnikova

TEMPERATURES DISTRIBUTION SIMULATION IN THE SAPPHIRE CRYSTALS FOR DEFECTS FORMATION DIAGNOSTIC

The temperatures gradient for the sapphire crystals growth by the horizontal directed crystallization method is received. The three-dimensional mathematical simulation by the method of final volume on the unstructured grid was used. The estimation of gas bubbles sizes near the liquid crystallization front was made. This approach allows to solve such problem in the field of sapphire crystals growth as crystals reception with the reduced defects level.

Technological process, horizontal directed crystallization method, sapphire crystals, temperatures distribution

УДК 53.082.52

А. А. Ухов, Д. К. Кострин

ОПТИМИЗАЦИЯ СИСТЕМЫ РЕГИСТРАЦИИ МНОГОКАНАЛЬНОГО ОПТИЧЕСКОГО СПЕКТРОМЕТРА

Рассмотрена конструкция многоканального оптического спектрометра на основе ПЗС-фотоприемников. Показана возможность выравнивания чувствительности прибора во всем диапазоне длин волн. Предложен метод, позволяющий значительно уменьшить общее время регистрации спектра излучения.

Оптический спектрометр, ПЗС-фотоприемник, регистрация спектров

Основными требованиями, предъявляемыми к современному спектрометрическому оборудованию, являются широкий рабочий диапазон длин волн, высокая разрешающая способность, возможность панорамного изображения спектра и малое время регистрации [1]. В последние десятилетия получил развитие метод одновременного, многоэлементного спектрального анализа, в котором спектр излучения регистрируется одной или несколькими одномерными ПЗС-матрицами, каждая из которых содержит несколько тысяч фоточувствительных элементов. Благодаря электронной регистрации время получения спектров сократилось до нескольких миллисекунд, расширился спектральный диапазон измерений, исчез процесс расшифровки спектра, появились возможности анализа формы спектральных линий и ввода спектра в ЭВМ для его последующей автоматизированной обработки. Большинство спектроскопических методов нуждаются в панорамном наблюдении участка спектра или всего спектрального интервала 200...1100 нм с оптическим разрешени-