

УДК 621.315.592

С.П. Малюков, С.Н. Нелина

**ОСОБЕННОСТИ ТЕОРЕТИЧЕСКОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ
РАДИАЦИОННО-КОНДУКТИВНОГО ТЕПЛООБМЕНА В ПРОЦЕССЕ
РОСТА МОНОКРИСТАЛЛОВ**

Моделирование температурных полей в кристаллах, растущих из расплава, основывается на решении задачи радиационно-кондуктивного теплообмена (РКТ) в полупрозрачных средах. Обзор теоретических исследований показывает, что при расчетах процессов, происходящих в системах “расплав – кристалл”, важнейшей проблемой являются учет температурных зависимостей коэффициентов физических величин, входящих в систему, различия свойств отдельных фаз, а также постановка граничных условий в задачах радиационно-кондуктивного теплообмена.

Моделирование; теплообмен; рост; кристалл; обзор.

S.P. Malyukov, S.N. Nelina

**PARTICULAR QUALITIES OF THEORETICAL SOLUTION A PROBLEM OF
RADIATION-CONDUCTIVITY HEAT TRANSFER IN PROCESSES OF
CRYSTAL GROWS**

Temperature fields modeling in crystals growing from the melt is based on solving the problem of radiation - conductivity heat transfer (RCT) in semitransparent medium. Review of theoretical research has shown that the calculations of processes occurring in the systems of the melt - crystal major problem is the account of temperature dependence of physical quantities in the system, the differences of the properties of individual phases, as well as the formulation of boundary conditions in problems of RCT.

Modeling; heat transfer; growth; crystal; review.

Широкое применение оптических монокристаллов в области науки и техники требует увеличения размеров бездефектных областей в растущих монокристаллах.

Известно, что дислокации возникают как результат снятия термических напряжений в растущем монокристалле [1, 2]. Величина и распределение термических напряжений меняются в зависимости от механизма роста кристалла, который в свою очередь, определяется распределением температуры в системе кристалл – граница раздела – расплав. Однако экспериментальное получение этой информации очень трудоемко и дорогостояще. Это является причиной возрастающей роли математического моделирования температурных полей в растущих кристаллах и установках для их выращивания. Для этого решаются задачи нестационарного радиационно-кондуктивного теплообмена (РКТ).

Задаче РКТ в полупрозрачных средах посвящено большое количество работ. Одни из первых попыток решения задачи РКТ в плоском слое с полупрозрачными зеркально отражающими границами проделаны в работах [3,4], в которых плоский полупрозрачный образец расположен между непрозрачными параллельными плоскостями. Методики, используемые в этих работах, не учитывают некоторые важные для практики моменты: зависимость теплофизических и оптических свойств исследуемой среды от температуры, зеркально-диффузионный характер отражения на непрозрачных границах и так далее.

Дальнейшие разработки в этой области [5 – 14] позволяют учитывать одновременно следующие важные факторы: 1) зависимость теплофизических свойств

от температуры и частоты излучения, 2) смешанный зеркально-диффузионный характер отражения излучения непрозрачными границами, 3) наличие вакуумных зазоров между полупрозрачным изделием и непрозрачной стенкой, 4) наличие внутренней (межфазной) границы в слое и ее движение в задаче Стефана, 5) зеркально-диффузионный характер преломления и отражения на внутренней (диффузной) границе слоя.

В работе [3] предложен эффективный численный метод решения нестационарной задачи о РКТ в плоском слое селективной рассеивающей среды с полупрозрачными зеркально отражающими границами, отделенном от внешних границ диатермическими нетеплопроводными зазорами. Теплофизические и оптические свойства полупрозрачной среды и непрозрачных границ считаются зависящими от температуры. Характер отражения на внутренней (межфазной) границе полупрозрачного материала при определенных условиях чрезвычайно сильно влияет на температурное поле этого материала. Здесь учитывается влияние характера отражения от непрозрачных границ на температурное поле и перенос тепла в слое, который в реальных условиях может сильно отличаться от зеркального. Перенос тепла в слое определяется уравнением

$$c(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} - 2\pi \int_0^1 dv \int_0^\pi (I_v^+(\mu, x, t) - I_v^-(\mu, x, t)) \mu d\mu \right), \quad (1)$$

где x – координата точки в слое; $\mu = |\cos \varphi|$; φ – угол между лучом и положительным направлением оси x ; λ – теплопроводность; ν – частота излучения; I_ν – интенсивность излучения («+» – в положительном направлении оси x , «-» – в отрицательном направлении); c – удельная объемная теплоемкость слоя.

Граничные условия для уравнения (1) зависят от расположения полупрозрачного материала и непрозрачных границ [15]. В случае абсолютного контакта между слоем и непрозрачным материалом на границе задается условие первого рода – температура, в противном случае задается условие второго рода – поток излучения, вычисляемый как результирующий поток между границей слоя и внешней границей, проинтегрированный по частоте в области непрозрачности слоя. Граничные условия для уравнения (1) также различны в случаях наличия и отсутствия контактов между полупрозрачным и непрозрачным материалами. При абсолютном контакте граничным условием является обычное условие зеркально-диффузионного отражения. При отсутствии контактов к этому условию добавляются условия баланса потока излучения на полупрозрачной границе слоя с учетом зеркального отражения и преломления. Расчеты, проведенные в [3, 11], показали, что при наличии контакта между слоем и обеими непрозрачными границами влияние характера отражения радиационных потоков от непрозрачных границ на температурное поле в слое серой среды максимально.

В работе [11] проведен расчет стационарных температурных распределений для кристаллов лейкосапфира с учетом зависимости спектрального коэффициента поглощения χ от температуры. На рис. 1 приведены разности стационарных температурных распределений в слое лейкосапфира с непрозрачными вольфрамовыми границами при температурах 2400 и 1500 К для χ , зависящего от температуры, и для χ , рассчитанного по средней температуре. При этом разница в потоках составляла для толщины образца $L=0,025\text{ м}$ – 4 %, для $L=0,1\text{ м}$ – 11 %. Эти данные показывают важность учета зависимости χ от температуры при расчетах РКТ.

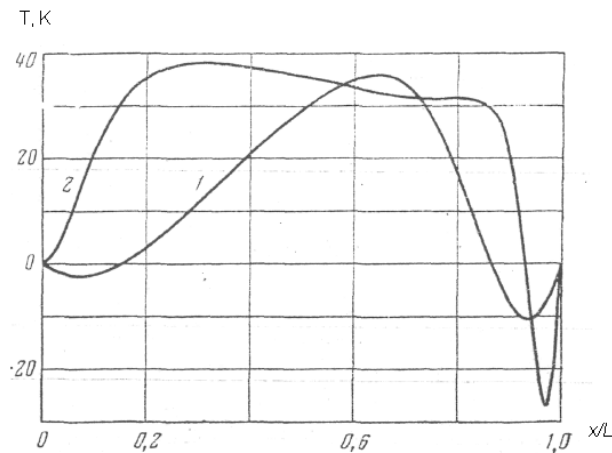


Рис. 1. Разности температурных распределений в образце лейкосапфира, полученных при спектральном коэффициенте поглощения, зависящем и независящем от температуры: 1 – $L=0,025$ м, 2 – $L=0,1$ м

Большое значение для получения высококачественных оптических кристаллов имеет оптимальное положение и скорость перемещения фронта кристаллизации. Для определения оптимального теплового режима необходимо знать температурные распределения и потоки тепла в процессе формирования кристалла, на которые существенно влияет лучистый теплоперенос [12 – 14, 16], особенно при высоких температурах. В работе [6] решается задача расчета температурных полей и тепловых потоков с учетом излучения в плоском образце полупрозрачной селективной среды, состоящем из двух фаз (задача Стефана) или двух слоев разных веществ, разделенных прозрачной отражающей и преломляющей границами. Здесь задача Стефана исследуется в общей постановке, а именно, учитывается отражение на границе раздела фаз, которые характеризуются разными показателями преломления; рассматриваются случаи, отличающиеся способами отражения от внешних непрозрачных поверхностей (нагревателя и холодильника) и расположением полупрозрачного образца относительно последних. Предлагаемый численный метод расчета во многом сходен с примененным в [3]. Все приводимые результаты получены в сером приближении без учета зависимости свойств от температуры в пределах фазы, во всех расчетах полагалась удельная объемная теплоемкость одинаковой для обеих фаз, в большинстве расчетов отражение от внешних границ полагалось зеркальным, коэффициенты отражения от обеих границ равны. Однако предложенный метод позволяет проводить селективные расчеты и учитывать зависимость от температуры оптико-физических и теплофизических свойств.

Чтобы определить влияние характера отражения потоков излучения на границе раздела фаз на ее стационарное положение в образце, проводились расчеты в условиях абсолютного контакта образца с внешними поверхностями [3, 17]. Теплопроводность считалась одинаковой для обеих фаз, коэффициент поглощения твердой фазы вдвое меньше, чем для жидкой. Результаты расчетов показывают, что положение границы раздела фаз сильно зависит от отражения на этой границе, то есть от отношения показателей преломления твердой и жидкой фаз. Отмечено [6, 7, 18], что в реальном процессе отражение на границе раздела фаз может появиться не только за счет различия показателей преломления фаз, но и из-за сегре-

гации примесей на эту поверхность. В последнем случае заметное отражение на внутренней границе может иметь место и при приближенном равенстве показателей преломления фаз. Влияние этого явления на распределение температуры в системе контакта двух фаз исследуется в [7], где описано образование диффузной границы, вызывающей инверсию теплового поля (рис. 2). В отдельные моменты времени у фронта кристаллизации со стороны расплава может скапливаться слой микропузырей, размеры которых соизмеримы с длиной волны теплового излучения, а их выход на поверхность за счет конвективных потоков весьма затруднен. В этом случае фронт кристаллизации начинает излучать тепловой поток в кристалл диффузно, а также диффузно рассеивать тепловой поток, идущий из объема расплава. Это создает необходимые предпосылки для возникновения инверсного температурного поля в кристалле.

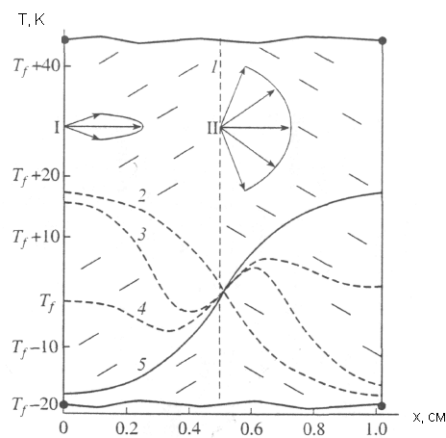


Рис. 2. Возникновение инверсии температуры (кривая 5) в прозрачном теле различной оптической толщины при наличии внутренней диффузно пропускающей границы в виде плоского слоя (пунктирная линия I): 2 – обычное распределение температуры; 3, 4 – немономонное температурное распределение; I – излучение от границы; II – рассеяние излучения на диффузной границе

Анализ выращенных кристаллов методом ГНК [7] показал, что в местах температурных скачков, обнаруженных в выращенных монокристаллах лейкосапфира, находится слой микропузырей размером 1-2 мкм, что совпадает с длиной волны максимума интенсивности радиационного потока при этих температурах. В результате в кристалле возникают значительные нестационарные термоупругие напряжения, которые могут быть причиной образования блоков и других дефектов структуры.

В настоящее время широко известен математический аппарат, позволяющий решать задачу теории теплопроводности в случае с перемещением только границ фазового перехода. В большинстве задач, где проводятся попытки учитывать и динамику перемещения границы прогрева в окружающей среде, вводятся существенные упрощения, такие как предположения о стабилизированном распределении температуры по сечению зоны прогрева [8, 19], а также границу прогрева в окружающей среде устремляют в бесконечность [9, 20].

В работах [6, 10, 21-24] рассматривается задача о динамике продвижения в переохлажденном расплаве границы раздела фаз с учетом перемещения границы прогрева в окружающей среде для частиц простейших форм. Здесь имеется систе-

ма, состоящая из жидкой и твердой фаз. В начальный момент времени расплав охлажден ниже температуры кристаллизации. Выделение тепла фазового перехода приводит к тому, что слой расплава, примыкающий к фронту кристаллизации, оказывается нагретым выше температуры расплава. Это позволяет выделить вблизи от границы раздела фаз слой расплава с конечным радиусом границы прогрева в окружающей среде. Температура твердой фазы тоже считается постоянной на протяжении всего процесса кристаллизации и равна температуре фазового перехода. Физико-химические свойства частицы и расплава считаются одинаковыми и не принимаются во внимание температурные зависимости теплофизических характеристик каждой из фаз. Конвекционные потоки отсутствуют. По результатам решения сформулированной задачи для роста боковой поверхности неограниченной пластины видно, что частица с течением времени замедляет свой рост. Это подтверждается и исследованием модели роста кристалла лейкосапфира в [15]. Это объясняется тем, что с ростом толщины зоны прогрева падает количество отводимого тепла. Установлено, что с уменьшением температуры расплава размер частицы будет больше, чем при том же времени кристаллизации, но при более высоких температурных показателях расплава. В реальных условиях температура твердой фазы не постоянна, а изменяется в зависимости от своей длины, распределения температур в кристаллизаторе и собственной прозрачности для теплового излучения, поэтому скорость роста частицы (например, Al_2O_3) со временем не уменьшается, а наоборот, увеличивается. Это подтверждают результаты опытов; термопарные измерения, кристаллофизический эксперимент, визуальные наблюдения и так далее. Процесс, описанный в [25], возможно протекает на этапе последовательной кристаллизации (первоначальный, $L=30$ мм), который можно принять за одномерную модель роста [26]. Далее, с увеличением длины закристаллизованного слоя вступает в силу другая модель роста, где необходимо учитывать теплоотвод излучением через твердую фазу и при которой происходит изменение градиента роста, которое приводит к образованию термоупругих напряжений в растущем кристалле.

В работах [27–31] теоретически рассмотрены температурные и термоупругие поля при выращивании тугоплавких монокристаллов и их влияние на изменения оптической симметрии в кристаллах. Применяется математическое моделирование в трехмерных криволинейных координатах с постановкой замкнутой термоупругой задачи для векторов перемещений в материалах монокристаллов в условиях малых деформаций. Учитывается изменяющийся характер свойств теплофизических коэффициентов материалов от температуры, нелинейных и нестационарных процессов с произвольными граничными условиями. Показано, что нарушение оптической симметрии в кристаллах является важнейшей причиной невозможности увеличения их геометрических размеров.

Обзор решения задач о РКТ показывает, что при расчетах процессов, происходящих в системе “расплав – кристалл” в процессе роста кристаллов, наиболее важными факторами, влияющими на приближенность теоретических моделей к реальным условиям, является учет температурных зависимостей коэффициентов физических величин, входящих в систему, различия свойств отдельных фаз, и, несомненно, постановка граничных условий в задачах радиационно-кондуктивного теплообмена.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *E. Dobrovinscaya, L. Lytvynov, V. Pishchik* Sapphire and other corundum crystals. Folio Institute for Single Crystals Ukraine – Kharkiv, 2002. – 349 с.
2. *Бодячевский С.В., Лингарт Ю.К., Петров В.А.* О температурных полях при выращивании лейкосапфира методом горизонтальной направленной кристаллизации // Физика и химия обработки материалов. – 1984. – №1. – С. 24-27.

3. Степанов С.В., Петров В.А., Битюков В.К. Радиационно-кондуктивный теплоперенос в плоском слое селективной рассеивающей среды с полупрозрачными границами // Теплофизика высоких температур. – 1978. – Т. 16. – № 6. – С. 1277-1284.
4. Марченко Н.В., Венякина Е.А. Нестационарный радиационно-кондуктивный теплоперенос в плоском слое селективной рассеивающей среды // Теплофизика высоких температур. – 1980. – Т.18. – № 4. – С. 781-787.
5. Марченко Н.В., Аронов Б.И., Штипельман Я.И. Расчет нестационарного радиационно-кондуктивного теплообмена в плоском слое селективной рассеивающей среды // Теплофизика высоких температур. – 1980. – Т. 18. – № 5. – С. 1007-1017.
6. Рубцов Н.А., Бурка А.Л., Степаненко П.И. Нестационарный и радиационно-кондуктивный теплообмен в селективно-поглощающих слоях газов // Изв. СО АН СССР – 1977. – № 3. – Сер. Техн. наук. – Вып. 1. – С. 29-34.
7. Рубцов Н.А. Теплообмен излучением в сплошных средах / Н.А. Рубцов; Под ред. С.С. Кутателадзе С.С. – Новосибирск: Наука, 1984. – 278 с.
8. Марченко Н.В., Аронов Б.И., Штипельман Я.И. Задача Стефана при радиационно-кондуктивном теплопереносе в плоском слое селективной полупрозрачной среды // Теплофизика высоких температур. – 1982. – Т. 20. – № 5. – С. 897-905.
9. Антонов П.И., Бахолдин С.И., Куандыков Л.Л., Лингарт Ю.К. Явление скачков теплового поля при кристаллизации монокристаллических лент сапфира по способу Степанова и методом ГНК // Кристаллография. – 2004. – Т. 49. – № 2. – С. 300-309.
10. Самойлович Ю.А., Тимошпольский В.И., Турусова И.А. Анализ кристаллизации переохлажденного расплава методом интегрального баланса // Инженерно-физический журнал. – 2001. – Т. 74. – № 1. – С. 139-144.
11. Любов Б.Я. Теория кристаллизации в больших объемах. – М., 1975. – 256 с.
12. Багдасаров Х. С. Высокотемпературная кристаллизация из расплава. – М.: Физматлит, 2004. – 160с.
13. Горяинов Л.А., Иванов С.Г. О расчете радиационно-кондуктивного теплообмена в двумерных областях // Радиационный теплообмен в технике и технологии. – Каунас, 1987. – С. 118-119.
14. Горяинов Л.А., Иванов С.Г. Радиационно-кондуктивный перенос теплоты в растущих кристаллах // Тепло и массоперенос при росте кристаллов. – М., 1985. – С.10-11.
15. Пантакар С. Численное решение задач теплопроводности и конвективного теплообмена при течении в каналах. – М.: Изд-во. МЭИ, 2003. – 312 с.
16. Lisienco V.G., Malikov G.K., Malicov Yu.K. Numerical heat transfer // Pt. B. Fundamentals. 1992. V.22. P. 1 – 22.
17. Будак Б.М., Соловьева Е.Н., Успенский А.Б. Разностный метод со сглаживанием коэффициентов для решения задачи Стефана // Вычислит. Матем. и мат. физики. – М., 1965. – № 5. – С. 828.
18. Багдасаров Х. С., Горяинов Л.А. Тепло- и массоперенос при выращивании монокристаллов направленной кристаллизацией. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. – 224 с.
19. Горяинов Л.А., Иванов С.Г. Решение одномерной задачи кристаллизации при наличии дополнительной стенки со стороны отвода тепла // Тр. МИИТ. – М. – 1971. – Вып.350. – С. 107-112.
20. Сергеев С.А., Спиридонов Ф.Ф. Влияние величины зоны прогрева на кристаллизацию расплава // Математическое моделирование. – 2003. – Т. 15. – №. 7. – С. 3-10.
21. Горяинов Л.А. О математическом моделировании процессов теплопереноса в технологических процессах // Теплообмен. ММФ. Минск. – 1988. – С. 83-85.
22. Самойлович Ю.А., Тимошпольский В.И. Турусова И.А. Анализ кристаллизации переохлажденного расплава методом интегрального баланса. // Инженерно-физический журнал. – 2001. – Т. 74. – № 1. – С. 139-144.
23. Абгарян А.А. моделирование температурных и термоупругих полей в сапфире в трехмерных криволинейных координатах // Математическое моделирование. – 2001. – Т. 13. – № 8. – С. 20-34.
24. Карташов Э.М. Аналитические методы решения краевых задач нестационарной теплопроводности в областях с движущимися границами // Инженерно-физический журнал. – 2001. – Т.74. – № 2. – С. 171-195.

25. *Малюков С.П., Стефанович В.А., Чердниченко Д.И.* Исследование модели самосогласованного роста монокристаллов сапфира по методу горизонтальной направленной кристаллизации // Известия вузов. Электроника. – 2007. – №2. – С. 3-9.
26. *Малюков С.П., Стефанович В.А., Чердниченко Д.И.* Теплофизические процессы при получении кристаллов лейкосапфира методом горизонтальной направленной кристаллизации // Кристаллография. – 2008. – Т. 53. – № 2. – С. 356-360.
27. *Habib I.S.* Solidification of Semitransparent materials by conduction and radiation // Int. J. Heat Mass Transfer. 1971. V.14. – P.2161 – 2169.
28. *Doornink D.G., Hering R.G.* Transient combined conductive and radiative heat transfer // J. Heat Transfer. 1972. V.94. – P. 473-481.
29. *Abrams M., Viscanta R.* The effects of radiative heat transfer upon the melting and solidification of semitransparent crystals // J. Heat Transfer. 1972. V.94. –P. 1279-1291.
30. *Рубцов Н.А. Слепцов С.Д.* Влияние граничных условий на нестационарный радиационно-кондуктивный теплообмен в слое полупрозрачной среды // Теплофизика и аэромеханика. – 2005. – Т. 12. – № 1. – С. 95-103.

Малюков Сергей Павлович

Технологический институт Федерального государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Южный федеральный университет» в г. Таганроге.

E-mail: kes@fep.tsure.ru.

347928, г. Таганрог, пер. Некрасовский, 44.

Тел.: 88634371603.

Нелина Светлана Николаевна

E-mail: nelina76@mail.ru.

Malyukov Sergey Pavlovich

Taganrog Institute of Technology – Federal State-Owned Educational Establishment of Higher Vocational Education “Southern Federal University”.

E-mail: kes@fep.tsure.ru.

44, Nekrasovskiy, Taganrog, 347928, Russia.

Phone: 88634371603.

Nelina Svetlana Nikolaevna

E-mail: nelina76@mail.ru.

УДК 007.52:611.81

С.Е. Бублей

ОСОБЕННОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ ГИБРИДНОГО РЕГУЛЯТОРА

Рассматривается применение искусственных нейронных сетей к задачам управления энергетическими объектами. Приведены модели регулятора с предсказанием и регулятора на основе эталонной модели.

Автоматическое управление; нейронные сети.

S.E. Bublely

FEATURES OF HYBRID REGULATOR APPLICATION

Application of artificial neuron networks is examined to the tasks of management power objects. The models of regulator with a prediction and regulator are resulted on the basis of standard model.

Automatic control; neuron networks.