

ПРИКЛАДНЫЕ
ЗАДАЧИ
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ
И
МАТЕМАТИЧЕСКОЙ
ФИЗИКИ

Министерство высшего и среднего специального образования
Латвийской ССР
Латвийский ордена Трудового Красного Знамени
государственный университет имени Петра Стучки
Вычислительный центр

ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ
ФИЗИКИ

Межведомственный сборник научных трудов

Латвийский государственный университет им. П. Стучки
Рига 1978

В работах настоящего сборника основное внимание уделяется математической постановке задач, описывающих конкретные физические явления, их качественному анализу и разработке численных методов решения таких задач. Круг вопросов, затронутых в сборнике, охватывает задачи теории кристаллизации, включая вопросы моделирования роста кристалла, задачи теплопроводности и диффузии, задачи гидродинамики в жидком расплаве, задачи с условиями типа сосредоточенной емкости.

В сборник включена большая обзорная статья по моделированию роста кристаллов методом Монте-Карло на атомно-молекулярном уровне.

Первый выпуск сборника "Прикладные задачи теоретической и математической физики" вышел в 1977 году. Настоящее издание является вторым выпуском.

Тематика сборника будет интересна для широкого круга математиков, физиков и специалистов, занимающихся изучением процессов роста и выращивания кристаллов, включая задачи вынужденной и естественной конвекции в расплаве.

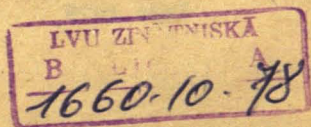
РЕДКОЛЛЕГИЯ:

Н.А.Авдонин (отв. ред.), Б.Я.Мартузан,
Г.Ф.Иванова, А.А.Буйкис, Т.А.Черепанова

Печатается по решению редакционно-издательского совета
ЛГУ им.П.Стучки от 16 июня 1978 года

© Латвийский государственный университет им.П.Стучки, 1978

П 20204-0757 174-78
М В12(11)-78



МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТЕЙ И РОСТА КРИСТАЛЛОВ

И. Ван ден Эрден, П. Беннема (Католический университет, Ниймеген, Нидерланды), Т. А. Черепанова (ВЦ ЛГУ им. П. Стучки, г. Рига)

В этой статье мы хотим показать, какую роль играет моделирование методом Монте-Карло (М.К.) в науке о росте кристаллов. Спецификой моделирования М.К. является его стохастичность: изменяется ли состояние системы, и если изменяется, то как — определяется случайными числами. Указанные события в системе происходят в соответствии с вероятностями переходов, которые могут быть найдены из модели физической системы, представляющей для нас интерес. При этом автоматически учитываются и флуктуационные процессы, в противоположность большинству других теорий, которые являются детерминистическими и, следовательно, описывают развитие системы во времени лишь в среднем.

Поскольку в настоящее время моделирование М.К. используется в самых различных областях исследований, начиная с математики ("экспериментальная математика") и кончая вопросами управления промышленностью, мы заранее ограничим класс систем, который представим для рассмотрения.

Во-первых, мы предполагаем, что изменения в системе вследствие совершения тех или иных элементарных событий (например, присоединений частиц к кристаллу) происходят столь быстро, что можно исключить из рассмотрения ее промежуточные состояния. Таким образом, мы ограничимся дискретным моделированием, т.е. моделированием систем с набором дискретных состояний.

Во-вторых, мы ограничимся описанием кристаллов, растущих из некоторой окружающей фазы, которая может быть жидкой, либо газообразной. Это позволит нам ввести в рассмотрение решетку с симметрией кристалла, элементарные ячейки которой могут быть либо твердыми, либо принадлежать окружающей фазе. Мы не будем давать детальное описание

окружающей фазы. Предполагается лишь, что она однородна, так что может быть введено понятие хипотенциала частицы, присоединяющейся к кристаллу.

Целью моделирования является описание развития во времени системы, если вероятности "элементарных событий" известны. В нашем случае принимаются в рассмотрение три типа элементарных событий: присоединения, отрыва и миграции (диффузии) отдельных твердых ячеек.

Дискретное моделирование М.К. может быть использовано для многих целей: 1) Оно является идеальным экспериментом на простой системе. В чистом виде могут быть изучены самые различные аспекты, например, зарождение, рост на винтовых дислокациях, поверхностная диффузия, структура кристалла и т.д. 2) Моделирование является прямым способом приближенного решения основных (микроскопических) уравнений системы, описывающих ее развитие во времени. Обычно как высокотемпературные, так и низкотемпературные разложения работают вблизи температур соответствующих фазовых переходов, так что во многих случаях, по-видимому, единственным путем исследований в широкой области значений параметров состояния системы является моделирование М.К. 3) В дополнение к 2) моделирование может быть использовано, чтобы показать, что результаты аналитических теорий часто применимы, даже если предположения, при которых они были получены, уже несправедливы. Это позволяет проверить или даже расширить область их применимости. 4) Моделирование конкретного физического эксперимента может дать лучшее понимание протекающих в системе атомных процессов, а следовательно, служить стимулирующим фактором для дальнейших экспериментальных исследований, развития новых идей и моделей. 5) Изучение флуктуирующих систем может выявить особенности, которые могут иметь фундаментальное значение.

С другой стороны, имеет место ряд ограничений в использовании М.К. моделирования самого по себе, в отрыве от других подходов: 1) Моделирование само по себе не дает понимания физических процессов и требует установления с ними

соответствия (детальной физической интерпретации). 2) Поскольку обычно для моделирования М.К. характерны большие затраты машинного времени, становится невозможным изучение сложных систем в течение относительно большого интервала физического времени. Даже специализированные ЭВМ (созданные специально для моделирования роста кристаллов) способны лишь частично справиться с этой трудностью.

Настоящая статья будет иметь следующий порядок изложения. В § I мы даем статистико-механическое описание системы и на основе его получим выражения для внутренней энергии и химпотенциалов частиц системы. С помощью принципа микроскопической обратимости получены соотношения между вероятностями переходов. Полное понимание этого параграфа не является необходимым для прочтения остальных частей статьи. § 2 содержит обзор тех классов систем, моделирование которых будет обсуждаться. Дается определение безразмерной температуры T , которое будет использовано для сравнения результатов моделирования различных систем. В §§ 3 - 6 обсуждаются вопросы равновесных состояний и различных механизмов роста. § 7 посвящен росту пленок на подложке.

§ I. Вероятности элементарных переходов.

В этом разделе мы развиваем обобщенную модель решеточного газа, используя ее для описания системы, содержащей кристаллическую фазу и полностью однородную жидкую фазу. Решетка имеет симметрию кристалла. Она может содержать твердые ячейки различных сортов, содержащие одну или более частиц каждая (как показано на рис. I). Жидкую фазу можно интерпретировать как расплав, раствор или пар. При этом градиентами температуры, плотности и т.д. пренебрегается. В этом параграфе мы будем использовать терминологию роста из растворов. Однако при обсуждении работ других авторов будет использована их интерпретация.

Как уже отмечалось, мы ограничимся рассмотрением

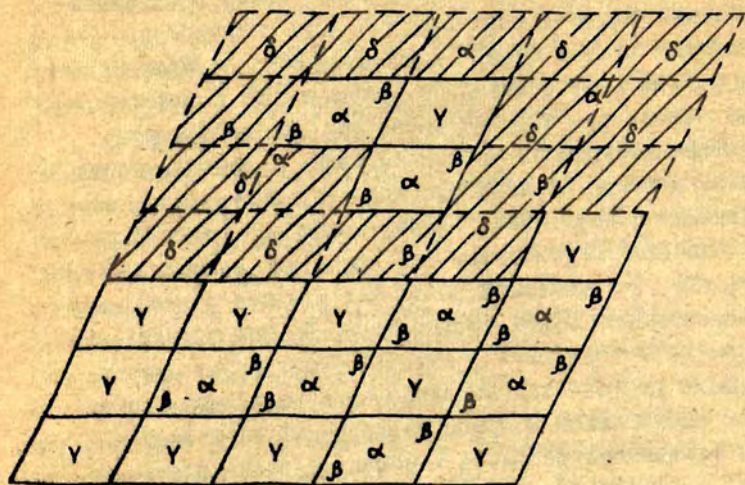


Рис. I. Пример межфазной границы: два типа твердых ячеек, содержащих α , β и γ -частицы. Жидкие ячейки содержат, кроме этих, еще и δ -частицы.

дискретного моделирования. Это означает, что в каждый момент времени состояние системы полностью описывается распределением Ψ твердых и жидких ячеек в решетке. Для описания жидкой фазы используется та же решетчатая модель. Нас интересует эволюция системы во времени. Она может быть изучена путем моделирования М.К., если вероятности элементарных переходов $\rho(\Psi \rightarrow \Psi')$ выбраны таким образом, что система изменяет свою конфигурацию из Ψ в Ψ' за некоторый интервал времени τ путем изменения типа самое большое одной частицы (приосоединение к кристаллу или отрыв от него) или двух частиц (поверхностная диффузия).

Мы получим выражения для вероятностей элементарных событий $\rho(\Psi \rightarrow \Psi')$ через вероятности равновесных состояний $P(\Psi)$, используя принцип микроскопической обратимости.

Для $P(\Psi)$ используем распределение Больцмана. Пусть H - гамильтониан системы. Тогда $H(\Psi, \{\xi\})$ есть энергия, где Ψ - конфигурация ячеек и $\{\xi\}$ означает другие степени свободы, не связанные с координатным пространством ячеек (импульсы и относительные координаты частиц, принадлежащих каждой ячейке). В результате выражение для $P(\Psi)$ имеет следующий вид:

$$P(\Psi) \sim \int d\{\xi\} \exp \left[- \frac{H(\Psi, \{\xi\}) - \sum_P \mu_{eq}^P N^P(\Psi)}{k_B T} \right], \quad (I)$$

($\rho = a, b, f$),

где интегрирование идет по всем $\{\xi\}$, соответствующим данному Ψ , а суммирование - по всем типам ячеек. Вероятности распределения $P(\Psi)$ могут быть нормированы лишь для конечных систем. Индексы a, b означают сорт твердых ячеек, индекс f - жидкую ячейку.

Мы предполагаем, что наша система конечна, но столь велика, что мы можем говорить о термодинамическом пределе. Тогда свободная энергия системы

$$F(V, T, \{N^p\}) = -k_B T \ln \sum_{\psi} \{N^p\} P(\psi) \exp \left[- \frac{\mu_{eq}^p N^p(\psi)}{k_B T} \right], \quad (2)$$

где суммирование идет по ψ , содержащим N^p ячеек сорта $p = a, b, f$.

Более того, мы предполагаем, что $H(\psi, \{\xi\})$ может быть представлена в виде суммы взаимодействий $U(\psi)$ между ячейками и внутренними частями $K_i(\{\xi\})$ для каждой ячейки i отдельно. В этом случае мы можем определить внутреннюю свободную энергию F^p ячейки сорта p согласно

$$F^p = -k_B T \int d\{\xi\}_p \exp \left[- \frac{K_i(\{\xi\}_p)}{k_B T} \right], \quad (p = a, b, f), \quad (3)$$

где интегрирование производится по всем степеням свободы изолированной p -ячейки, и подынтегральное выражение соответствует члену в (1), относящемуся к данной p -ячейке. Подставляя (3) в (1), получаем:

$$P(\psi) \sim \exp \left[- \frac{U(\psi) + \sum_p (F^p - \mu_{eq}^p) N^p(\psi)}{k_B T} \right], \quad (p = a, b, f). \quad (4)$$

Потенциальная энергия $U(\psi)$ определяется вкладами φ_{τ}^{pq} энергий взаимодействия p и q -ячеек, которые зависят от типов соседних ячеек и от их относительного расположения:

$$U(\psi) = -\frac{1}{2} \sum_{p, q, \tau} \varphi_{\tau}^{pq} N_{\tau}^{pq}(\psi) + \sum_{p, \tau} \varphi_{\tau}^{pp} N_{\tau}^{pp}(\psi). \quad (5)$$

Здесь суммирование производится по всем сортам ячеек и по всем \vec{z} . В этом выражении нетрудно учесть, что $N_{\vec{z}}^{pq}$ не независимы: если в положении \vec{z}_1 присутствует p -ячейка, то в $\vec{z}_1 + \vec{z}$ найдем ячейку либо сорта p , либо другого сорта $q \neq p$, причем

$$N_{\vec{z}}^p = N_{\vec{z}}^{pp} + \frac{1}{2} \sum_{q \neq p} N_{\vec{z}}^{pq} \quad \text{для всех } p, \vec{z}. \quad (6)$$

Уравнение (6) может быть использовано для исключения $N_{\vec{z}}^{pp}$ из уравнения (5). В результате находим:

$$u = Q + \sum N^p L_0^p, \quad (p = a, b, f). \quad (7)$$

Здесь Q есть так называемая энергия смещения, характеризующая степень взаимодействия различных ячеек:

$$Q = \frac{1}{2} \sum_{p \neq q, \vec{z}} \left(\varphi_{\vec{z}}^{pq} - \frac{1}{2} \varphi_{\vec{z}}^{pp} - \frac{1}{2} \varphi_{\vec{z}}^{qq} \right) N_{\vec{z}}^{pq} \equiv \frac{1}{2} \sum_{p \neq q, \vec{z}} \omega_{\vec{z}}^{pq} N_{\vec{z}}^{pq}, \quad (8)$$

$$(p, q = a, b, f)$$

и L_0^p есть энергия, приходящаяся на одну ячейку фазы, содержащей лишь p -ячейки:

$$L_0^p = \sum_{\vec{z}} \varphi_{\vec{z}}^{pp}, \quad (p = a, b, f). \quad (9)$$

Выражение (7) может быть интерпретировано также следующим образом. Второй член есть энергия системы, если ячейки каждого сорта принадлежат соответствующим чистым фазам. Первый член дает поправку Q , существенную при обмене ячеек между p и q фазами, обуславливающую достижение реальной конфигурации Ψ . Полезно заметить, что для I -ком-

понтентного кристалла с простой кубической решеткой в приближении взаимодействия ближайших соседей уравнение (7) переходит в:

$$\begin{aligned} \omega &= \omega N^{sf} + 3 N^s \varphi^{ss} + 3 N^f \varphi^{ff}, \\ \omega &= \varphi^{sf} - \frac{1}{2} \varphi^{ss} - \frac{1}{2} \varphi^{ff}. \end{aligned} \quad (10)$$

Следующий шаг для упрощения (4) - в явном виде получить выражение для химпотенциала на языке моделирования М.К. По определению химпотенциал p -ячейки есть:

$$\mu^p \equiv \left(\frac{\partial F}{\partial N^p} \right)_{T, V, N^q} = \left\langle \left(\frac{\partial H}{\partial N^p} \right)_{T, V, N^q} \right\rangle, \quad \begin{pmatrix} q \neq p, \\ p, q = a, b, f \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Второе равенство следует из уравнений (1) и (2), $\langle \dots \rangle$ означает усреднение по ансамблю, и для любой конфигурации Ψ мы понимаем под $\partial H / \partial N^p$ среднюю скорость убывания H в результате выхода из системы одной p -ячейки. Используя (2), (3) и (7), получаем явный вид уравнения (11):

$$\mu^p = F^p + L_0^p + \langle \partial Q / \partial N^p \rangle, \quad (p = a, b, f), \quad (12)$$

которое может быть использовано, чтобы переписать уравнение (4) в виде:

$$p \sim \exp \left[- \frac{Q + \sum_p N^p (\mu^p - \mu_{eq}^p - \langle \partial Q / \partial N^p \rangle)}{k_B T} \right], \quad (p = a, b, f). \quad (13)$$

Наконец, мы можем использовать тот факт, что конфигурация полностью задана, если задана конфигурация твердых ячеек. Действительно, можно исключить N^f из (13), которое в результате примет вид:

$$p \sim \exp \left[- \frac{Q - \sum_{p \neq f} (L_o^f - L_o^p) N^p}{k_B T} - \sum_{p \neq f} \theta_p N^p \right]. \quad (14)$$

Здесь θ_p - постоянные, интерпретация которых будет дана ниже. Следует заметить, что интерпретация θ_p необходима не для моделирования самого по себе, а для установления соответствия между результатами моделирования и физической ситуацией.

Существуют два принципиально разных случая, позволяющих исключить N^p , а, следовательно, интерпретировать θ_p .

Первый и, по-видимому, наиболее естественный подход - предположить, что общее число ячеек $\sum_p N^p$ в системе постоянно. Это означает, что p - ячейка, если $p = a$ или b , может превратиться в жидкую ячейку, и, следовательно, $\mu_{eq}^f = \mu_{eq}^p$. Из уравнения (13) и (14) получаем:

$$\theta_p = - \frac{(\mu^f - \mu^p) + \langle \partial Q / \partial N^p \rangle}{k_B T} + \frac{L_o^f - L_o^p}{k_B T}, \quad \begin{matrix} (p \neq f) \\ (p = a, b) \end{matrix}. \quad (15)$$

Этот подход обычно используется для моделей Изинга, однако применимо к росту кристаллов он обладает одним важным недостатком. Вообще говоря, число частиц не сохраняется, если одна твердая ячейка (содержащая целое число частиц) превращается в одну жидкую ячейку (содержащую концентрацию частиц, которая может быть существенно отличной от таковой в твердой фазе).

Поэтому мы предполагаем сохранение частиц, а не ячеек. Пусть C_p^α - число α -частиц в одной p -ячейке. Тогда общее число α -частиц постоянно, если $\sum_p C_p^\alpha N^p$ - постоянно. Растворение p -ячейки означает в этой интерпретации, что α -частицы переходят из p -ячейки в жидкую фазу, и, следовательно, $(\mu_\alpha^f)_{eq} = (\mu_\alpha^p)_{eq}$. Вообще мы определим вклад V_p^α α -частиц в величину V_p для p -ячейки таким образом, что

$$B_p = \sum_{\alpha} C_p^{\alpha} B_p^{\alpha} \quad (16)$$

Используя это уравнение для записи вкладов в μ^p, μ_{eq}^p и $\langle \partial Q / \partial N^p \rangle$ от различных сортов частиц, и используя условие, что $\sum_p C_p^{\alpha} N^p$ - постоянно, мы получаем следующее выражение θ_p из уравнений (13) и (14):

$$\theta_p = - \sum_{\alpha} C_p^{\alpha} \frac{\mu_{\alpha}^f - \mu_{\alpha}^p + \langle \partial Q / \partial N^p \rangle_{\alpha} - (L_0^f - L_0^p)}{k_B T} \equiv \quad (17)$$

$$\equiv - \sum_{\alpha} C_p^{\alpha} \frac{\Delta \mu_{\alpha}^p + \langle \partial Q / \partial N^p \rangle_{\alpha} - (L_0^f - L_0^p)}{k_B T},$$

(p ≠ f, p = a, b),

где $\Delta \mu_{\alpha}^p$ - пересыщение α -частиц в растворе по отношению к степени пересыщения в p-ячейке.

Используем принцип микроскопической обратимости

$$P(\psi) \cdot p(\psi \rightarrow \psi') = P(\psi') \cdot p(\psi' \rightarrow \psi) \quad \text{для всех } \psi, \psi' \quad (18)$$

для получения соотношения между вероятностью прямого и обратного процессов переходов;

$$\frac{p(\psi \rightarrow \psi')}{p(\psi' \rightarrow \psi)} = \exp \left[- \frac{Q(\psi') - Q(\psi) + \sum_{p \neq f} (L_0^f - L_0^p) (N^p(\psi) - N^p(\psi'))}{k_B T} \right] \quad (19)$$

$$- \sum_{p \neq f} \theta_p (N^p(\psi') - N^p(\psi)) \Big], \quad (p \neq f, p = a, b).$$

Очевидно, что этого соотношения недостаточно для определения всех вероятностей переходов. Для этого необходимо сделать дополнительные предположения о данной физической

кой системе. Частота присоединения частицы к кристаллу часто выбирается пропорциональной $\exp(\Delta\mu/k_B T)$ и независимой от числа ее связей в кристалле после ее присоединения. Вероятность перескока частицы в процессе поверхностной диффузии выбирается обычно пропорциональной частоте отрыва от данного узла и равновесной частоте присоединения.

Этих предположений достаточно для получения выражений для частот отрывов, так как отношение W_{10}/W_{01} , частот присоединений и отрывов задано уравнением (19). Для ряда специальных случаев мы приведем это выражение в явном виде. Взаимодействия в простой кубической решетке характеризуются параметром ω , приведенным в ур.(10), так что:

$$W_{10}/W_{01} = \exp \left[\frac{\Delta\mu - \ell_{\text{тж}} \omega}{k_B T} \right]. \quad (20)$$

Здесь $\ell_{\text{тж}}$ - число разрываемых твердо-жидких связей в процессе отрыва, связанных с числом ℓ разрываемых твердо-твердых связей согласно $\ell_{\text{тж}} = 6 - \ell$. Вводя ограничение конфигурациями без нависаний (при которых твердые ячейки расположены только над твердыми), мы получаем так называемый кристалл Косселя. В этом случае в результате элементарных событий изменяется лишь число ℓ' боковых связей; вместо (20) получаем $\ell_{\text{тж}} = 4 - \ell'$. То же справедливо для конфигураций без нависаний для грани (100). Для (111) грани без ограничений на конфигурации мы вновь имеем (20), однако теперь $\ell_{\text{тж}} = 12 - \ell$. Если боковые связи различны,

$$W_{10}/W_{01} = \exp \left[\frac{\Delta\mu - \ell_{\text{тж}}^x \omega_x - \ell_{\text{тж}}^y \omega_y}{k_B T} \right]. \quad (21)$$

Рост пленок на подложке можно моделировать согласно (20) для второго и более высоких слоев пленки; частоты

отрывов атомов с подложки имеют дополнительный множитель $\exp(\Delta\omega/k_B T)$, где $\Delta\omega = \omega$ (пленка-пар) + ω (пленка-подложка) - ω (подложка-пар). Для двухкомпонентного (a, b)-кристалла с одной частицей в ячейке имеем:

$$W_{10}^a / W_{01}^b = \exp \left[\frac{\Delta\mu^a + \gamma^a \omega^{ab} - l^{ab} \omega^{ab} - l^{af} \omega^{af} - l^{bf} \omega^{bf}}{k_B T} \right], \quad (22)$$

где $\gamma^P \equiv \left\langle \frac{\partial N_{ss}^{ab}}{\partial N^P} \right\rangle$, N_{ss}^{ab} - число твердо-твердых связей ближайших соседей сортов a и b.

Параметр γ^P характеризует пересыщение твердой фазы $\Delta\mu_P^s$ за счет отклонения структуры и состава ее от их равновесных значений.

$$\Delta\mu^P = \Delta\mu_P^f + \Delta\mu_P^s = \Delta\mu_P^f + (\gamma^P - \gamma_{eq}^P) \omega^{ab}, \quad (\rho \neq f, \rho = a, b).$$

Эти или подобные им выражения использовались в большинстве работ, которые мы будем обсуждать.

Отметим, что ограничение конфигурациями межфазной границ без нависаний разумно, лишь если мы предположим дополнительно сильные энергии связей в вертикальном направлении (направлении роста). Введение дополнительных взаимодействий, если выбрать их равными для взаимодействий aa, ab и bb частиц, не меняет основного кинетического ур-я (22). Действительно, если мы введем зависящие от направления и расстояния энергии взаимодействия $\psi_{\vec{z}}^{PQ}$ между двумя ячейками, которые могут быть соединены вектором \vec{z} , тогда ур.(22) запишется в виде

$$W_{10}^P / W_{01}^P = \exp \left[\frac{\Delta\mu^P - \sum_{\vec{z}} (l_{\vec{z}}^{ab} - \gamma_{\vec{z}}^P) \omega_{\vec{z}}^{ab} - l_{\vec{z}}^{af} \omega_{\vec{z}}^{af} - l_{\vec{z}}^{bf} \omega_{\vec{z}}^{bf}}{k_B T} \right], \quad (22')$$

($\rho \neq f, \rho = a, b$),

где индекс \bar{z} имеет тот же смысл, что и был упомянут выше. Если теперь дополнительно ввести анизотропию φ в вертикальном направлении наряду с изотропными взаимодействиями, мы получим:

$$\varphi_x^{pq} = \varphi_y^{pq} = \varphi_z^{pq} - \varphi \quad \text{для } p, q = a \quad \text{или } b.$$

Согласно условию отсутствия нависаний

$$l_z^{af} + l_z^{bf} = 0.$$

Следовательно, ур. (22') в этом случае совпадает с ур. (22) и изотропная модель с условием отсутствия нависаний очевидно эквивалентна модели с отсутствием нависаний и с дополнительным сильным вертикальным взаимодействием, а последняя в свою очередь эквивалентна модели с дополнительным вертикальным взаимодействием без пренебрежения нависаниями. Последний тип модели имеет физический смысл.

Несколько отличный вывод уравнения (20) был дан Gilmer и Venema [1]. Им были получены выражения для отношения частот элементарных событий на случай равновесных систем, используя принцип микроскопической обратимости, распределение Больцмана для замкнутых систем и понятие положения на половине кристалла, частоты присоединений и отрывов от которых должны быть равны (т.е. $l_{\pm} = 0$ в ур. (20)). Соответствующие выражения для неравновесных систем вводились соответственно теории абсолютных скоростей химических реакций Эйринга.

Наконец, сделаем несколько общих замечаний. Как было отмечено в начале параграфа, система должна быть достаточно большой для того, чтобы оправдать использование термодинамического описания. Что касается граничных условий, можно различить два случая. В случае ограничения конфигурациями без нависаний обычно выбираются периодические граничные условия в плоскости, параллельной межфазной границе. Высота каждого атомного столбца вдоль направления роста

может при этом меняться от $-\infty$ до $+\infty$. В модели без ограничений конфигураций также в вертикальном направлении могут быть выбраны в ряде случаев периодические граничные условия.

§ 2. Краткое изложение МК-исследований.

Моделирование Монте-Карло в области роста кристаллов оказалось весьма полезным для изучения свойств равновесных поверхностей граней и механизмов роста — таких как нормальный рост, рост путем двумерного зарождения, рост на винтовых дислокациях и т.д. Первые работы по моделированию были проведены Черновым [2,3] и Vinberg [4,5] в 1966-1971 гг. После 1971 г. число ученых, занимающихся моделированием, быстро возрастало. Таблица I, в которой собраны ссылки на все исследования, известные нам начиная с 1971 г. (включая обзор ссылок [2-5] в ссылках [6] и [7]), дает полную картину современного состояния исследований.

Прежде чем приступить к детальному обсуждению этого описания работ, необходимо сделать несколько общих замечаний. На рис. 2 представлена общая блок-схема моделирующей программы. В качестве начального состояния задается некоторое состояние ψ . Затем используются одно или более случайных чисел R_1 для определения типа события (присоединение, отрыв, диффузионный перескок). Следующее случайное число определяет, осуществляется ли элементарное событие; и цикл моделирования начинается снова. Вычисление скоростей роста, поверхностной структуры и т.д. производится после выполнения определенного числа циклов или событий.

Последовательность (R_1, R_2, \dots) случайных (точнее, псевдослучайных) чисел может быть получена согласно алгоритму:

$$R_{n+1} = I_{n+1} / I_{\max}. \quad (23)$$

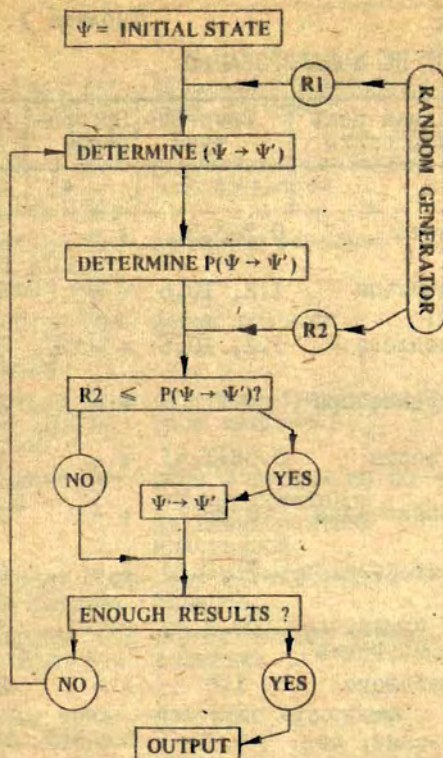


Рис.2. Блок-схема программы для моделирования методом Монте-Карло.

ОБЗОР РАБОТ ПО МОДЕЛИРОВАНИЮ

Структура кристалла	Основная цель исследования	Температура	Эр. процессы	Ссылки
I	2	3	4	5
Кристаллы Коссея (100)	шероховатость	0.7-3.5	+ -	16
Кристалл Коссея (100)	рост из расплава	1.2, 10.6	+ -	17
Кристаллы Коссея (100)	рост из расплава	1.2, 10.6	+ -	18
Кристалл Коссея (100)	теория зародышеобразования	?	+ -	15
Кристалл Коссея (100)	механизмы роста	0.88-1.41	+ -	19
Кристалл Коссея (100)	зародышеобразование	0.88	+ -	20
Кристалл Коссея (100)	динамика шероховатости	0.71-1.23	+ -	21
	Модель без ограничения на конфигурации	1.00-2.00	(+, -)	22
	динамика фазового перехода	> 1.8	+ -	23
Кристалл Коссея (100)	парообразование, потенциал Морзе	0.15	-	24
Кристалл Коссея (100)	октагональные взаимодействия	0.59-1.76	+ -	25
Орторомбическая (100)	равновесная поверхность	0.59-1.76	+ -	26
Кристаллы Коссея (100)	специализированная ЭВМ	0.78-1.41	+ -	27
Орторомбическая (100)	механизмы роста	0.78-1.18	+ -	28
гцк (100)	рост и парообразование	0.88-1.41	+ -	29
гцк (111)	равновесная поверхность	1.43-2.82	+ -	30
оцк (001)	потенциал Леннерда-Джонса	0.06-0.08	+	31

Продолжение таблицы I.

I	2	3	4	5
Кристалл Коссея (100)/ ступени (10)	зародышеобразование/ рост ступеней	0.88-1.41	+ -	9
Кристалл Коссея (100)/ ступени (10)	зародышеобразование/ рост ступеней	0.88-1.41	+ -	33
Кристалл Коссея (100)/ ступени (10)	динамика ступеней	0.80	+ - j	34
Кристалл Коссея (100)/ спираль	форма спирали	0.35, 0.88	+ -	32
Кристалл Коссея (100)/ спираль	зародышеобразование/ рост спирали	0.18-1.26	+ - j	38
Бинарная цепочка	рост в местах на по- ловине кристалла двухкомпонентных кристаллов	0.88-1.26	+ -	14
Бинарный кристалл Коссея	рост металлических сплавов	4.41	+ -	1,59
Бинарный кристалл Коссея	псевдо-ионные взаимодействия	1.76	+ -	39
Пленка кристалла Коссея	изотерма адсорбции	1.0 - 2.0	+ - j	40
Пленка кристалла Коссея	электрическая проводимость	0.0	+	41
Пленка кристалла Коссея	зародышеобразование	0.10-1.16	+ - j	42
Пленка кристалла Коссея	зародышевый послый- ный рост	0.68	+ -	43
Кристалл Коссея (100)/ ступени (10)	фазовый переход ме- роховатости	0.71-1.23	+ -	35
Кристалл Коссея (100)/ ступени (10)	структура ступеней	0.88-1.41	+ -	36

$$I_{n+1} = I_n I_0 \pmod{I_{\max}}. \quad (24)$$

Здесь I_{\max} есть максимальное число, которое может дать ЭВМ, I_0 - произвольное число, выбранное таким образом, чтобы два последовательных числа были независимыми. Действительно, можно показать, что коэффициент корреляции

$$\frac{\langle R_{n+1} R_n \rangle - \langle R_{n+1} \rangle \langle R_n \rangle}{\langle R_{n+1} \rangle \langle R_n \rangle} = \frac{1}{3I_0} - \frac{1}{I_{\max}} - \frac{I_0}{I_{\max}}. \quad (25)$$

равен нулю для $I_0 \approx \sqrt{I_{\max}/3}$. Так как длина цикла этого генератора равна $\frac{1}{2} I_{\max} = 2^{30}$ для IBM 370/55, может быть генерировано много различных R_n . Этот весьма простой генератор оказывается достаточно хорошим для моделирования.

Необходимо заметить, что энергии взаимодействия и температура не появляются в моделировании отдельно, а только в виде отношения этих величин. Таким образом, использование этого параметра для характеристики температурной области и энергий взаимодействий не представляется разумным. С методологической точки зрения мы используем температурное представление, определив стандартную безразмерную температуру \tilde{T} , обладающую следующими свойствами:

- 1) для данной системы \tilde{T} пропорциональна T ;
- 2) разные системы при одинаковой температуре и с одинаковым значением средней потенциальной энергии взаимодействия двух ячеек имеют одинаковые \tilde{T} ;
- 3) \tilde{T} выбрано таким образом, что критическая температура двумерной модели Изинга в приближении взаимодействия ближайших соседей $\tilde{T}_c \equiv 1$.

Пункт 2) основан на предположении, что система со сложным взаимодействием может быть в некоторой степени аппроксимирована системой со взаимодействием лишь ближайших соседей, полная потенциальная энергия которой такая же, что в исходной системе.

Пусть ΔU есть разность энергий, приходящихся на

одну твердую ячейку, полученная из ур.(10), т.е. разность энергий между двумя состояниями, в одном из которых твердые ячейки находятся так далеко друг от друга, что не взаимодействуют друг с другом; в другом состоянии ячейки упакованы в кристаллическую структуру, отвечающую выбранной физической системе. Тогда определим \tilde{T} согласно

$$\tilde{T} = 0,88138 \quad \text{эВ} \cdot T / \Delta U, \quad (26)$$

где s - число ближайших соседей в решетке. Для удобства мы приводим в таблице 2 и рис.3 соотношение \tilde{T} с параметрами, характеризующими взаимодействие в системе ω , ϵ , α , γ и $L/k_B T$, которые применяются другими авторами.

Таблица 2.

СООТНОШЕНИЕ С ПАРАМЕТРАМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДРУГИХ АВТОРОВ

Ссылка	ω	ϵ в J, ϵ^{-1}	$\alpha = \gamma$	$L/k_B T$
Кристаллы Кооселя (100)	$0.88/\tilde{T}$	$1.76/\tilde{T}$	$3.53/\tilde{T}$	$5.29/\tilde{T}$
гцк (100)	$0.88/\tilde{T}$	$1.76/\tilde{T}$	$3.53/\tilde{T}$	$10.58/\tilde{T}$
гцк (100)	$0.88/\tilde{T}$	$1.76/\tilde{T}$	$5.29/\tilde{T}$	$10.59/\tilde{T}$
оцк (100)	$0.88/\tilde{T}$	$1.76/\tilde{T}$	$3.53/\tilde{T}$	$7.05/\tilde{T}$

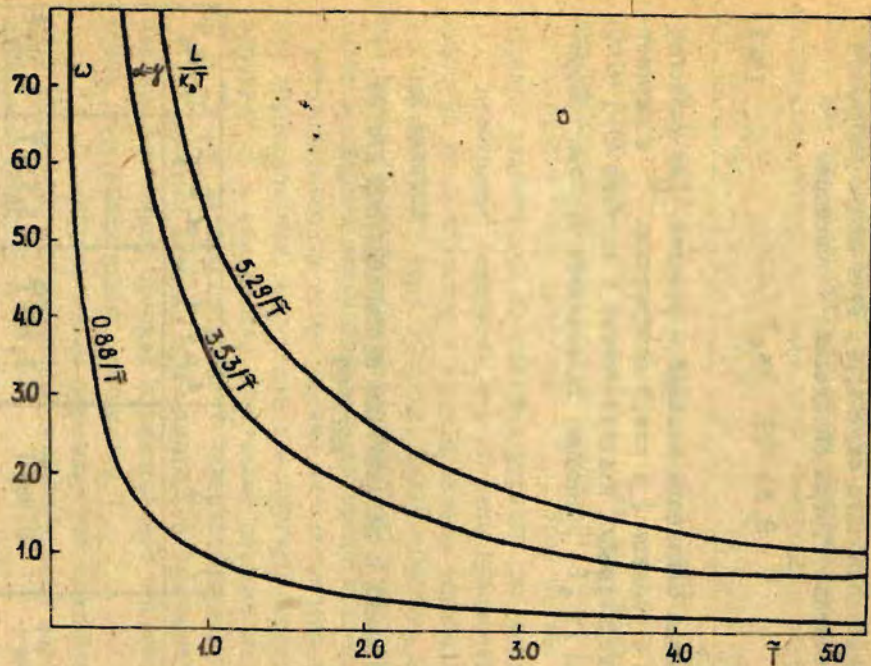


Рис.3. Зависимость стандартной температуры от параметров взаимодействия других авторов (см.также таблицу 2).

Обращаясь к списку осмол в таблице I, мы видим, что наибольшее внимание уделялось (100) грани кристалла Коссе-ля (простая кубическая решетка без нависаний), как со ступенями на поверхности, так и без них. Структура поверхности [1, 8, 9, 10, 13, 14, 17, 18, 21, 22, 23] и механизм роста [1, 7, 11, 12, 19, 20, 21, 25, 30, 31, 34, 35] были изучены в зависимости от температуры. Специальное внимание было уделено переходу от нормального механизма роста к росту на ступенях [8, 11, 13, 20, 21, 27, 35]. Динамические переходы и критические явления, обнаруженные при этом переходе [13] и при критической температуре 3-мерной модели Ивинга [15], обнаруживают ряд сходств. Ступени, генерируемые граними с высокими индексами или на винтовых дислокациях, были изучены с точки зрения их структуры [28, 29], вклада скорости роста на них в полную скорость роста [1, 12, 25, 30], влияния элементарных процессов [26] на их краевую энергию [27]. Влияние различных сортов частиц на соответствующий фазовый переход типа порядок-беспорядок обсуждается в [6, 31, 34]. Рост пленки моделировался путем задания подложки, частицы которой не участвовали в элементарных процессах [26-29].

Как отмечалось в §I к элементарным процессам мы относим процессы отрывов, присоединений и диффузионных миграций твердых ячеек на поверхности грани; обозначим в таблице I эти процессы +, - и δ соответственно. Уравнение (19) соответствует тому, что каждому элементарному процессу соответствует процесс обратный ему. Однако для некоторых систем обратный процесс столь маловероятен, что им пренебрегают [16, 33]. В [14] процессы отрывов и присоединений разыгрываются одновременно. В [23] молекулы пара имеют распределение Максвелла-Больцмана в пространстве импульсов.

Среди прочих работ по моделированию, представляющих интерес для исследования роста кристаллов, следует особо отметить работы по вычислению свободной энергии кластеров малых размеров [36, 37] и росту тонких полимерных пленок на шероховатой подложке [38].

§ 3. Равновесные характеристики

Важной характеристикой поверхностей является их шероховатость ζ^{σ} , определяемая как полное число твердо-жидких соседей на межфазной границе, отнесенное к одной поверхностной частице. Для модели без нависаний это соответствует полному числу таких соседей; для модели с нависаниями необходимо ввести поправку на жидкие включения и кластеры твердой фазы в объемах фаз.

Поверхностная энергия U^{σ} и свободная энергия F^{σ} тесным образом связаны с ζ^{σ} . Так для кристалла с простой кубической решеткой из (10) имеем:

$$U^{\sigma} = \omega \zeta^{\sigma} \quad (27)$$

$$F^{\sigma} = \frac{1}{T} \int_0^T U^{\sigma} dT = \frac{\omega}{T} \int_0^T \zeta^{\sigma} dT. \quad (28)$$

Здесь ω - обобщенная энергия взаимодействия твердо-жидкой пары частиц. Для модели без нависаний вычтем из ζ^{σ} и U^{σ} вклад, соответствующий $T=0$ (т.е. абсолютно плоской поверхности).

Из (27) и (28) получим U^{σ} , F^{σ} , обусловленные боковыми твердо-жидкими связями. Для более сложных систем необходимо принять во внимание анизотропию, означающую существование различных $\zeta^{\sigma}_{\vec{i}}$ для различных направлений в кристалле.

На рис. 4 показана зависимость ζ^{σ} от температуры для различных кристаллических структур. Грани кристалла Косселя (100) [8] и грани гцк (100) имеют одинаковую структуру в плоскости межфазной границы - квадратную решетку с изотропным взаимодействием ближайших соседей. Поэтому их ζ^{σ} близки при низких температурах. Однако при относительно высоких температурах различие их становится более существенным в основном из-за того, что условие без нависаний для гцк (100) грани является намного сильнее, чем это огра-

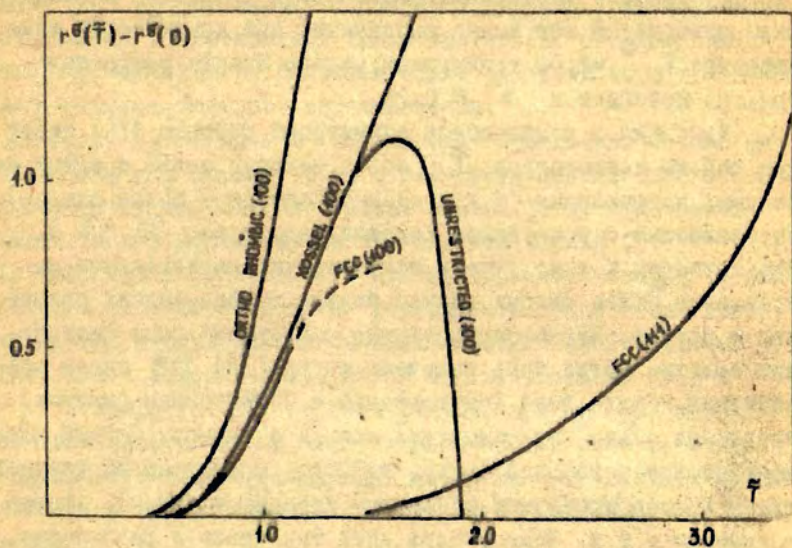


Рис. 4. Шероховатость межфазной границы как функция температуры для различных кристаллических структур: орторомбической [18], Коуселя [8], без ограничений на конфигурации [14], гцк (100) [21] и гцк (111) [22].

значение для (100) грани кристалла Коссея. (100) грань простого кубического кристалла [14] без ограничения на конфигурацию межфазной границы также эквивалентна при низких температурах (в смысле τ^6) грани кристалла Коссея (100). Однако с повышением температуры твердая и жидкая фазы становятся все менее различимы; при критической температуре $\tilde{T}_c^{3D} = 2.00$ трехмерной модели Изинга межфазная граница исчезает и $\tau^6 \equiv 0.26$.

Кристалл с ромбической симметрией решетки [15] имеет при той же температуре \tilde{T} более сильные связи в одном из боковых направлений (в другом направлении - более слабые), по сравнению с кристаллом Коссея (здесь $\omega_x/\omega_y = 3$). Это приводит к тому, что в направлении, параллельном направлению более слабых связей больше твердо-жидких связей, чем в другом. Низкотемпературные разложения ряда физических величин могут быть получены из ур.(14) [39] путем объединения в один член конфигураций с одинаковыми (малыми) энергиями связи поверхностных атомов с гранью. Первый член соответствует гладкой грани, второй - мономерам на гладкой грани (адсорбированным одиночным твердым ячейкам), второй - димерам и т.д. Если учесть лишь три члена в разложении, для τ^6 получим следующее выражение:

$$\tau^6 = 8 \exp\left[-\frac{2}{k_B T} (\omega_x + \omega_y)\right] \left[1 + 3 \exp\left(-\frac{2\omega_x}{k_B T}\right) + 3 \exp\left(-\frac{2\omega_y}{k_B T}\right) \right] \quad (29)$$

Экспоненциальная зависимость τ^6 от ω_x, ω_y приводит к тому, что при той же температуре \tilde{T} для ромбического кристалла ($\omega_x \neq \omega_y$) шероховатость больше, чем для кристалла Коссея (т.е. для одинаковых значений ω_x, ω_y).

Наконец, гцк (III) грань [22] имеет тригональную симметрию, так что ячейки гораздо сильнее связаны в боковом направлении. Это приводит к более высокой критической температуре $\tilde{T}_c^{2D} = 2.07$ двумерной модели Изинга для этого типа симметрии и к меньшему значению шероховатости.

Шероховатость грани имеет большое значение для механизма роста. Грубо говоря, нормальный механизм роста присущ шероховатым граням; на гладких поверхностях рост идет в основном на генерированных ступенях (зародышеобразование, рост на дислокациях). Фазовый переход шероховатости от гладкой к шероховатой грани привлекает большое внимание исследователей. Подведем итоги развитию идей и пониманию фазового перехода шероховатости.

Burton, Cabrera и Frank [40] предположили, что фазовый переход первого рода с двумерной модели Изинга (эквивалентной однослойной модели поверхности) будет иметь аналогию и в общем случае n -слойной модели ($n \rightarrow \infty$). То есть будет существовать температура перехода \tilde{T}_R , ниже которой адсорбированные на поверхности грани атомы имеют тенденцию к образованию больших плоских кластеров, что приводит к поверхности с малой шероховатостью.

Температура \tilde{T}_R - температура, при которой поверхностная энергия имеет точку перегиба. Ими было рассчитано положение точки перегиба \tilde{T}_R для ряда n -слойных моделей ($n = 1, 2, 4$) в аппроксимации Бете. Было получено $\tilde{T}_R = 1, 10$.

Используя аналогию с двумерной моделью Изинга, Leamy и Gilmer путем моделирования Монте-Карло [27] показали, что $\tilde{T}_R = 1,13$. Из полученной ими серии поверхностей со ступенями видно, что при высоких температурах ступени практически неотличимы от участков поверхности вне их (рис.5).

В результате последних более детальных исследований с помощью моделирования Монте-Карло [41] было показано, что производная от свободной энергии по температуре при $\tilde{T} = 1,13$ не обращается в нуль, а монотонно убывает. Низкотемпературные разложения до девятого порядка малости (ур.(29) представляет разложение лишь до третьего порядка) показали [39], что угол наклона межфазной границы, ширина обнаруживают особенность при $\tilde{T} = 1,08, 1,15$ соответственно. Ясно, что для ответа на вопрос о существовании фазового перехода необходимо рассмотрение большего числа членов.

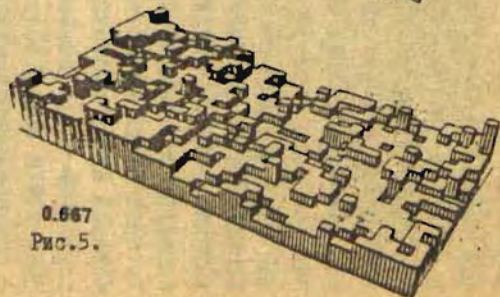
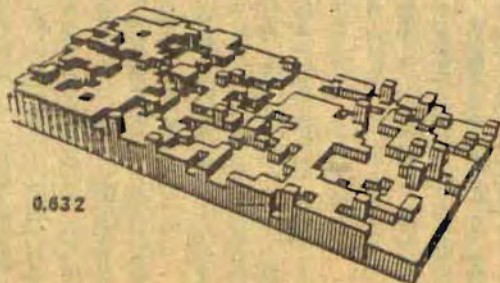
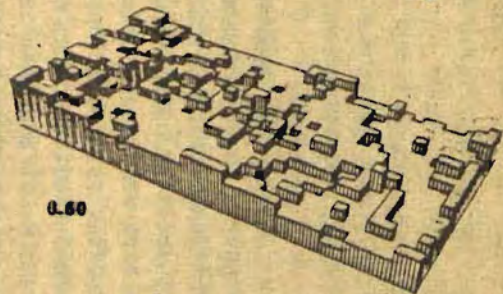
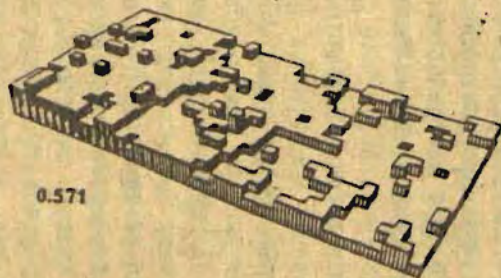
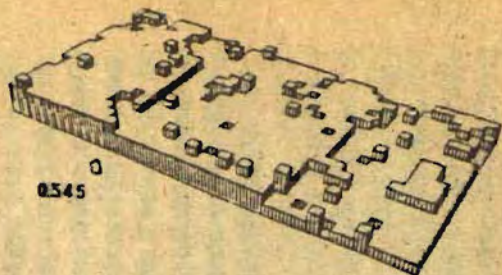
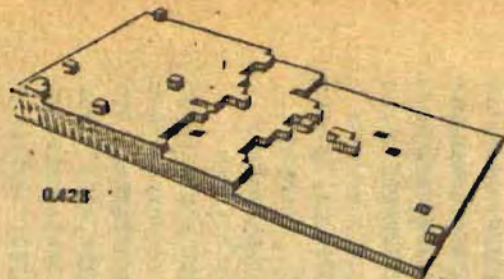


Рис. 5.

Swensden [13] изучил динамические аспекты, определив времена релаксации τ_E^I и $\tau_{h^2}^I$, соответствующие характерным флуктуационным временам поверхностной энергии и положения поверхности грани (ее высоты). Следовало ожидать, что времена релаксации окажутся малы как ниже \tilde{T}_R (где поверхность имеет тенденцию быть гладкой), так и выше \tilde{T}_R (где межфазная граница теряет устойчивость и флуктуации быстро затухают). При температуре \tilde{T}_R эти времена должны обнаружить максимум. Swensden получил этот эффект, однако неожиданностью явился тот факт, что \tilde{T}_R , полученная им, совпала с $\tilde{T}_C^{3D} = 1$, а именно: оказалась равной 1.01 ± 0.04 . Аномальная зависимость релаксационных времен от размера системы обнаружена при $\tilde{T} \gtrsim \tilde{T}_R$, что говорит о важности длинноволнового спектра флуктуаций межфазной границы.

В заключение можно сказать, что хотя до сих пор и не решена проблема фазового перехода шероховатости, существует переход от плоской к шероховатой поверхности при температуре, близкой к критической температуре модели Изинга $\tilde{T}_C \equiv 1$. Так как атомно гладкие поверхности приводят к макроскопическому ограничению кристалла, мы полагаем, что равновесная форма кристалла будет ограниченной ниже \tilde{T}_R и округленной выше \tilde{T}_R . Существуют две существенные трудности при экспериментальной проверке этого явления. Во-первых, экспериментально, по-видимому, всегда наблюдаются формы роста, которые могут быть, особенно вблизи \tilde{T}_R , совершенно отличными от соответствующих равновесных форм. Во-вторых, характерные длины волн спонтанных флуктуаций кристаллических поверхностей при $\tilde{T} \gtrsim \tilde{T}_R$ могут быть столь велики, что превысят характерный размер кристалла, так что кристалл все еще будет сохранять ограниченность.

Изучение моноатомной ступени [26] при температурах, меняющихся от $\tilde{T} = 0.8$ до $\tilde{T} = 0.9$, также выявило длинноволновую волнистость, видимую при электронно-микроскопических исследованиях. Переход к ограниченной форме ступени не предполагался (и не был получен), т.е. в одномерной модели

Наинга нет фазового перехода, кроме $\tilde{T} = 0$. Было показано, что плотность нависаний менялась от I до IO%. Следовательно, точные теоретические результаты для ступеней без конфигураций нависаний [39,40] справедливы для

$$\tilde{T} \leq 0,9 \tilde{T}_R.$$

Следует заметить, что из ур.(I4) можно получить свойство симметрии, справедливое в равновесии для однокомпонентных кристаллов. Это свойство иногда используется [I,2I] для проверки правильности работы моделирующей программы. Оно состоит в том, что вероятность $P(\Psi)$ данной конфигурации Ψ равна $P(\tilde{\Psi})$, где $\tilde{\Psi}$ - конфигурация, полученная из Ψ заменой твердых ячеек на жидкие и наоборот. Простым следствием является то, что поверхностные концентрации адсорбированных атомов и вакансий должны быть равны.

Поскольку равновесие в принципе определяется термодинамикой, можно ожидать, что статистические характеристики, введенные выше (τ^s , u^s , F^s , \tilde{T}_R и симметрия) не зависят от способа выбора элементарных событий. В частности, можно предположить отсутствие влияния на них поверхностной диффузии. Очевидно, кинетика может, и, по-видимому, будет влиять на динамические свойства системы, такие как времена релаксаций τ_E^I и τ_{μ}^I флуктуаций.

§ 4. Нормальный механизм роста.

Этот механизм имеет место на относительно шероховатых поверхностях. Характерной чертой его являются линейная зависимость скорости роста R от пересмещения в области малых их значений. Определим R как число слоев, присоединившихся к кристаллу в единицу времени, отнесенное к одному узлу поверхности грани и к частоте присоединений W_{10} .

Можно показать [I], что если поверхность однокомпонентного кристалла сохраняет свою равновесную структуру,

$$R = 1 - \exp\left(-\frac{\Delta\mu}{k_B T}\right). \quad (30)$$

Это уравнение известно как уравнение Вилсона-Френкеля. Линейную зависимость от пересыщения при малых $\Delta\mu/k_B T$ дает первый член разложения (30). Из рис. 6 и 7 нетрудно увидеть, что линейная зависимость имеет место при $\bar{T} \geq T_p \approx 1,0$, однако значения R при этом лежат ниже кривой уравнения (30).

Ясно, что межфазная граница может сохранить свою равновесную структуру в течение всех стадий роста, только если она очень шероховата. В предыдущем разделе мы показали, что при температуре \bar{T}_R шероховатость ~ 0.3 , что значительно меньше, например, максимального значения шероховатости на слой. Так что структура поверхности все еще играет существенную роль в этой области температур.

Правая часть ур.(30) есть скорость роста в положении на половине кристалла, т.е. на местах с таким расположением ближайших соседей, что присоединение к ним или отрыв от них твердой ячейки не меняет энергии Q (для кристалла Коссея это означает, что число твердо-жидких соседей остается постоянным). Результаты, представленные на рис. 6, означают, что ур.(30) в общем случае имеет вид

$$R = A(\bar{T}, x_s) \left[1 - \exp\left(-\frac{\Delta\mu}{k_B T}\right) \right]. \quad (31)$$

Возможна следующая интерпретация константы пропорциональности A :

$$A(\bar{T}, x_s) = A_0(\bar{T}) \frac{1 + x_s^2}{1 + x_s^2 A_0(\bar{T})}. \quad (32)$$

Первый множитель описывает скорость роста без учета поверхностной диффузии. Видно, что он увеличивается от 0.4 при

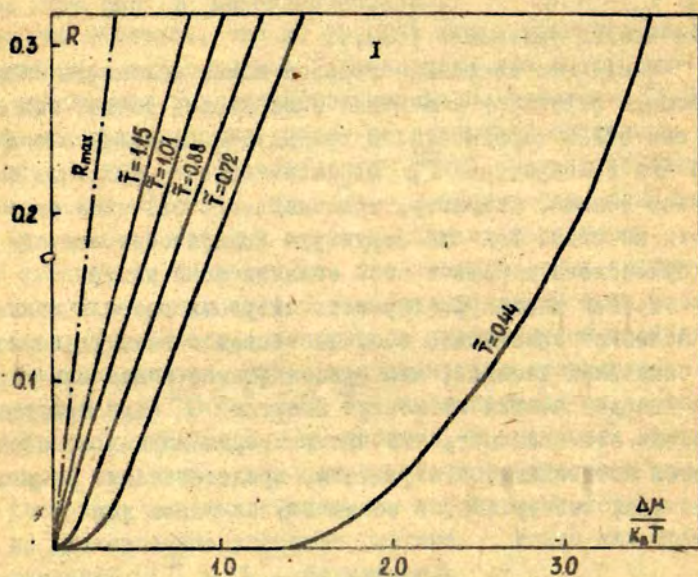


Рис.6. Скорость роста грани Косселя (100) при различных температурах $[1,30]$ для $\tilde{T} < \tilde{T}_R$. Виден участок кривой, характерный для зародышеобразования при низком пересыщении $\Delta\mu/k_B T$. I означает среднеквадратичное отклонение.

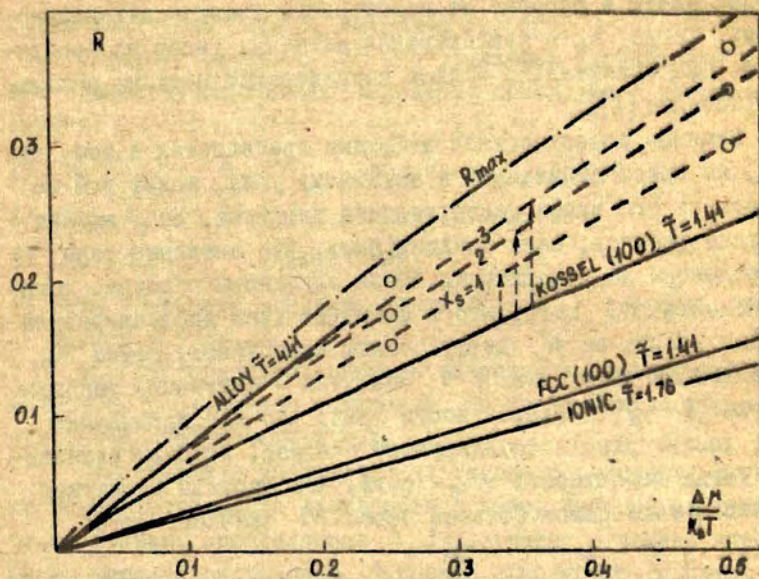


Рис. 7. Влияние поверхностной диффузии и кристаллической структуры на нормальную скорость роста. Прерывистые кривые получены с помощью уравнения (32). Кристалл Косселя: осмля [1]; гци: [21], копия: [31] сплав: [30].

температуре фазового перехода шероховатости $\tilde{T} \approx 1$ до величины 1.0, если $\tilde{T} \rightarrow \infty$. Можно предположить, что этот множитель пропорционален числу мест на межфазной границе, удобных для роста (плотности точек роста). Назовем такие узловые места в решетке на поверхности грани - активными узлами. Тогда A_0 - концентрация активных узлов на поверхности. Она значительно больше концентраций мест на половине кристалла [1].

Влияние поверхностной диффузии проявляется в том, что атом, не присоединившийся к активному узлу, может все же достигнуть его путем поверхностной диффузии. Этот эффект нетрудно оценить, если предположить, что активные узлы распределены по поверхности грани случайным образом. Тогда вероятность p_N того, что в активный узел диффундировала твердая ячейка за N диффузионных перескоков, равна A_0 (вероятности того, что $N+1$ -ый узел - активный) умноженному на $(1-A_0)^N$ (вероятности того, что все предыдущие узлы, достигнутые диффундирующей ячейкой, не были активными). Тогда вероятность W_M того, что частица достигнет активного узла самое большее через M скачков, есть:

$$W_M = \sum_{N=0}^M p_N = \sum_{N=0}^M A_0 (1-A_0)^N = 1 - (1-A_0)^{M+1}. \quad (33)$$

Пусть B_0 - вероятность испарения адсорбированного атома, тогда вероятность q_M того, что атом успеет сделать M диффузионных перескоков за время его жизни в адсорбированном состоянии есть $B_0 (1-B_0)^M$. Среднее расстояние, пройденное в процессе диффузии, x_s ,

$$x_s^2 = \langle M \rangle = \sum_{M=0}^{\infty} M B_0 (1-B_0)^M = (1-B_0)/B_0, \quad (34)$$

откуда $B_0 = (1+x_s^2)^{-1}$.

Вероятность A может быть найдена из q_M и W_M согласно:

$$A = \sum_{M=0}^{\infty} q_{V_M} W_M = 1 - \frac{B_0(1-A_0)}{1-(1-B_0)(1-A_0)} = \frac{A_0}{A_0+B_0-A_0B_0} \quad (35)$$

Подставляя (34) в (35), получаем ур.(32).

Следует отметить, что это уравнение удовлетворяет интуитивно предполагаемому характеру поведения в предельном случае:

- 1) При $X_S = 0$, $A_0 = 1$ получаем ур.(30);
- 2) При $X_S \rightarrow \infty$, $A_0 = 1$ также имеем (30);
- 3) При $X_S = 0$ имеем $A = A_0$;
- 4) Если плотность активных узлов $A_0 = 0$ - скорость обращается в нуль.

Ур.(35) описывает влияние поверхностной диффузии с точностью результатов измерений. То же относится и к результатам, полученным в [6].

Существующая аналитическая теория определения скорости нормального роста в отсутствие поверхностной диффузии (т.е. теория, определяющая A_0) построена в рамках приближения молекулярного поля. Поправка следующего порядка, с учетом двухчастичной функции распределения, дает результаты, достаточно точно совпадающие с результатами, полученными путем моделирования Монте-Карло [20,42,43]. Аппроксимация молекулярного поля при описании роста кристаллов определяет высокотемпературные (точнее для больших значений шероховатости) зависимости. Цель ее - получить систему дифференциальных уравнений для эволюции во времени вероятностей $P(k)$ иметь кристаллу в данном месте высоту k . Эта система должна соответствовать кинетике, полученной моделированием. Приближение, позволяющее численно решить проблему, состоит в аппроксимации вероятности отрыва вероятностью $P(k)$ существования конфигурации, в которой ячейка (или пара ячеек) находится в поле взаимодействия окружающей их поверхности, описываемом в среднем. Вид полученных уравнений можно найти в [20,42].

Для гцк (100) рост происходит значительно медленнее, чем для грани (100) кристалла Косселя. Это опять является следствием ограничения конфигурациями без нависаний, запрещающего присоединение или отрыв от некоторых мест поверхности и приводит к уменьшению концентрации активных узлов. То, что ионный кристалл растет медленнее, является, по-видимому, следствием того, что узлы, которые были бы активными на грани (100) кристалла Косселя, могут оказаться неактивными (по крайней мере для одного типа частиц + или -) из-за сорта ячеек, формирующих активный узел. Например, такой узел для (+)- частицы должен быть окружен тремя ячейками (-).

Этим объясняется и тот факт, что сплав, даже при температуре гораздо выше T_R не растет по закону (30).

§ 5. Рост путем двумерного зарождения

Основное отличие нормального механизма роста от различного вида роста на ступенях (зарождение, рост на дислокациях, рост ступеней высоких индексов), который будет обсужден в этом и следующем параграфах, состоит в том, что активные узлы не являются более случайным (равномерным) образом распределенными по поверхности грани. Они расположены теперь лишь по краям ступеней и становятся более похожими на классические места на половине кристалла. На идеальных гранях ступени являются краями больших твердых кластеров. Число активных узлов на ступени будет зависеть от ее кривизны: в слабо пересыщенной системе всегда будет расти прямая ступень; значительно искривленная ступень будет иметь тенденцию к растворению. Кластер, край которого таков, что находится в равновесии при данном пересыщении, называется зародышем. Кластеры большего размера имеют тенденцию роста, меньшие - растворения.

Размер зародыша явно зависит от пересыщения, поэтому множитель A в ур.(31) теперь также зависит от $\Delta\mu/k_B T$.

Теории зародышеобразования определяют скорость I , с которой образуются зародыши. Если присоединение и отрыв - единственные происходящие элементарные процессы, находим [12]

$$\frac{I}{W_{10}} = \xi C_1 \sqrt{\frac{\Delta\mu}{k_B T}} \exp\left(-\pi \xi^2 \gamma_0^2 / \Delta\mu k_B T\right), \quad (36)$$

где C_1 есть концентрация адсорбированных атомов на поверхности, ξ есть множитель, зависящий от формы зародыша, изменяющийся от 1.07 для квадратных зародышей (при $\tilde{\gamma} = 0$) до 1 для круглой его формы (при $\tilde{\gamma} = 0.9$) [44], и γ_0 есть краевая свободная энергия зародыша на единицу длины. Общая скорость роста состоит из I и скорости разрастания кластера сверхкритического размера. Обычно принимается степенная зависимость размера кластера от времени:

$$n(t) = a(t - t_0)^\alpha, \quad t > t_0, \quad (37)$$

где t_0 есть время образования зародыша, a и α есть феноменологические параметры. Теория Колмогорова-Аврами-Веттера [12] дает в этом случае:

$$R = \frac{\alpha + 1}{\Gamma\left(\frac{1}{\alpha + 1}\right)} \left(\frac{aI}{W_{10}}\right)^{\frac{1}{\alpha + 1}}, \quad (38)$$

где Γ есть гамма-функция. Если предполагается, что радикальная скорость v разрастания кластера постоянна ($\alpha = \pi v^2$, $\alpha = 2$), то ур.(36) принимает вид:

$$R = 1.137 \sqrt[3]{I v^2}. \quad (39)$$

Если, с другой стороны, разрастание кластера не принимать во внимание ($\alpha = \infty$, размер зародыша, и $\alpha = 0$), получаем:

$$R = I n_0. \quad (40)$$

Тщательное рассмотрение результатов, полученных методом Монте-Карло в [12], выявило тот факт, что на относительно шероховатых поверхностях (при $\bar{T} = 0,88$) имеет место промежуточный случай $\alpha = 1$, что приводит к

$$R = 0,789 \sqrt{I_0}. \quad (41)$$

Подстановка ур.(36) в ур.(38) или в любое из уравнений (39)-(41) дает зависимость R от пересыщения в виде

$$\bar{R} = A_1 \left(\frac{\Delta\mu}{k_0 T} \right)^{A_2} \exp(-A_3 \gamma_0^2 / \Delta\mu k_0 T), \quad (42)$$

где A_1, A_2 и A_3 - численные константы, зависящие от выбора типа элементарных процессов и механизма разрастания. Зависимость второго множителя от $\Delta\mu/k_0 T$ гораздо слабее, чем экспоненциальная. Поэтому, откладывая $\ln(R/W_{10})$ в зависимости от величины обратной $\Delta\mu/k_0 T$, находим для малых $\Delta\mu/k_0 T$ линейную зависимость с наклоном прямой $A_3 \gamma_0^2 / (k_0 T)^2$. Таким путем можно экспериментально определить краевую свободную энергию γ_0 и энергию активации $\pi \xi^2 \gamma_0^2 / \Delta\mu$.

Такие графики даны на рис.(8). Необходимо тут же отметить, что нужны очень точные значения для скорости роста, чтобы в области малых пересыщений определить линейную часть кривых и посредством этого найти параметры A_1 и γ_0^2 . К сожалению, это требует слишком продолжительного времени моделирования, большего, чем обычно имеется для подобных исследований. С другой стороны, из одних лишь измерений при высоких пересыщениях нельзя получить определенного вывода: наклон прямых для зародышеобразования, представленный на рис.(6) для $\bar{T} < 1,0$, указывает лишь, что какой-то еще механизм, кроме нормального роста имеет место для малых $\Delta\mu$.

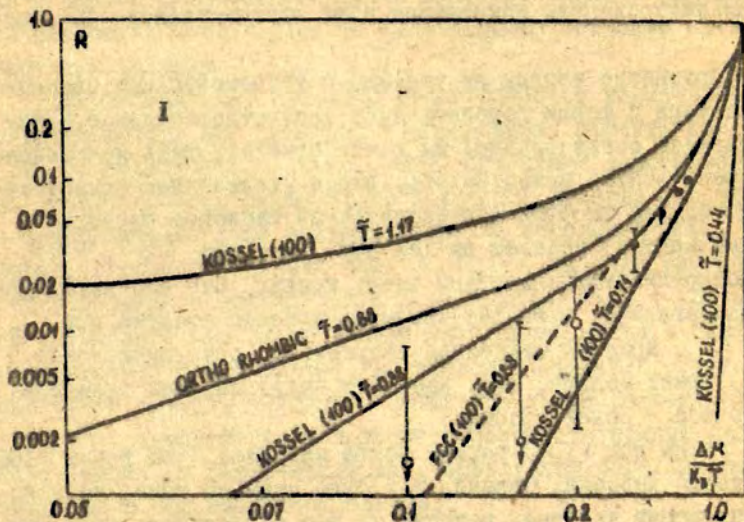


Рис.8. Скорости роста различных граней для различных температур. Кристаллы Косоеля и орторомбический - измерения получены на специализированной ЭЕМ [20], кроме измерений при $\bar{T} = 0,44$. [30]. Данные для гцк - из соеда [21]. Шкала осей линейна по $\ln R$ и по $(\Delta\mu)^{-1}$.

Специализированный компьютер, сконструированный в Делфте, способен моделировать рост на грани (100) Косселя примерно в 100 раз быстрее, чем быстродействующая ЭВМ, предназначенная для общих целей, подобная IBM 370/55 [19,20]. Из рис.(8) видно, что фактически только измерения на этом специализированном компьютере дают количественную информацию.

Сравнение кривых на рис.(8) с теоретическими оценками размера и формы зародыша дает удовлетворительное количественное согласование. Мы хотим отметить лишь качественные результаты. Можно видеть, что с увеличением температуры свободная энергия (представленная наклоном линейных частей кривых) убывает до тех пор, пока при $\tilde{T} \geq \tilde{T}_p \approx 1,0$ не обнаруживается линейная часть кривых. Это соответствует предполагаемому нулевому значению краевой энергии при $\tilde{T} > \tilde{T}_R$. Краевая свободная энергия для орторомбической (100) грани меньше, т.е. зародыши будут меньших размеров, а процесс - более простым.

Грани гцк (100) растут более медленно, чем грани (100) кристалла Косселя. Однако, как было указано выше, на основе измерений не ясно, зависит ли это от большего значения краевой энергии или от различия множителей A_1 и A_2 , которые могут зависеть от кинетики роста, различной в этих двух случаях.

Поверхностная диффузия влияет на кинетику процесса, но в принципе не на размер и форму зародышей. Следовательно, наклон линейной части кривой $\ln R$, зависящей от $1/\Delta\mu$, останется неизменным. Однако остальные характеристики кривых меняются, т.к. они определяются значениями A_1 и A_2 . Это имеет место особенно при высоком пересыщении, когда поверхность настолько шероховата, что растет по нормальному механизму роста [20]: скорость роста здесь значительно выше при учете поверхностной диффузии. Тем не менее, в [12] было отмечено (правда, небольшое) влияние поверхностной диффузии на сам зародыш. Это было интерпретировано как следствие того, что при температурах, близких,

но ниже \bar{T}_R , в процессе роста не достигается локально равновесное состояние и, следовательно, зародыш имеет большее значение свободной краевой энергии, чем полученное из оценок в рамках статистических теорий [44]. Поверхностная диффузия способствует более быстрому приходу системы к равновесию, и потому учет ее дает меньшее значение краевой свободной энергии.

При высоких пересыщениях вновь работает нормальный механизм роста. Это приводит к интересному эффекту для роста орторомбической грани (100). При малых пересыщениях она растет быстрее грани (100) кристалла Косселя для тех же температур за счет меньших размеров зародышей [44]. Наоборот, в области больших $\Delta\mu/k_bT$, за счет увеличившегося обратного потока частиц, от поверхностей с одинаковой шероховатостью отрыв частиц происходит легче в случае орторомбической симметрии, чем кристалла Косселя. Этот эффект можно понять, учитывая экспоненциальную зависимость в ур.(29). Соответствующая точка пересечения кривых скоростей роста от пересыщений дает оценку для перехода шероховатости в неравновесном случае.

Наконец, необходимо заметить, что удобным и точным методом определения размера зародыша является исследование ступени, связывающей две винтовые дислокации противоположных знаков. В случае, когда расстояние между ними меньше диаметра зародыша, грань не должна расти. Таким образом, было получено, что термодинамический подход для описания ступени [44] или края зародыша (т.е. понятие поверхностного натяжения) количественно разумен, если зародыш содержит более 50 частиц [12]. Для зародышей меньших размеров эти концепции могут быть использованы лишь для качественного описания; количественные же результаты несправедливы из-за важности учета тепловых флуктуаций.

§ 6. Рост на ступенях

Строго говоря, разрастание зародыша, обсуждавшееся в предыдущем параграфе, является примером роста на ступени, т.е. роста за счет присоединения твердых ячеек к краям ступеней. Другими примерами, которые будут рассмотрены в этом разделе, будут ступени, генерированные винтовыми дислокациями.

Поскольку в одномерной модели Изинга нет фазового перехода, мы будем предполагать, что фазовый переход шероховатости в этом случае также не существует и, следовательно, нет зарождения на краях ступеней. Таким образом, мы полагаем, что скорость ступени v описывается законом, аналогичным механизму нормального роста в ур.(31):

$$\frac{v}{\alpha W_{10}} = A_{st}(\bar{T}, X_s) \cdot \left[1 - \exp\left(-\frac{\Delta\mu}{k_B T}\right) \right], \quad (43)$$

где A_{st} — вероятность того, что активный узел ступени будет достигнут присоединившейся ячейкой. Если поверхностная диффузия отсутствует ($X_s = 0$) или если расстояние L между ступенями так велико, что диффузионные поля соседних ступеней не перекрываются ($L \gg X_s$), эта вероятность пропорциональна плотности ступеней на поверхности [26]. В [1] (см. также рис.(9)) было получено следующее выражение для A_{st} согласующееся с результатами моделирования:

$$A_{st}(\bar{T}, X_s) = 1 + \frac{2X_s}{1 + 4/X_s}. \quad (44)$$

Здесь предполагалось, что в процессе роста ступени (без нависаний) сохраняют свою равновесную структуру. Поэтому в (44) нет температурной зависимости. При температуре ниже (но вблизи) \bar{T}_d и высоком пересыщении ($\bar{T} = 0.88$, $\Delta\mu/k_B T > 0.3$) истинная скорость роста, полученная из моделирования, даже выше, чем в (44). Это, очевидно, обус-

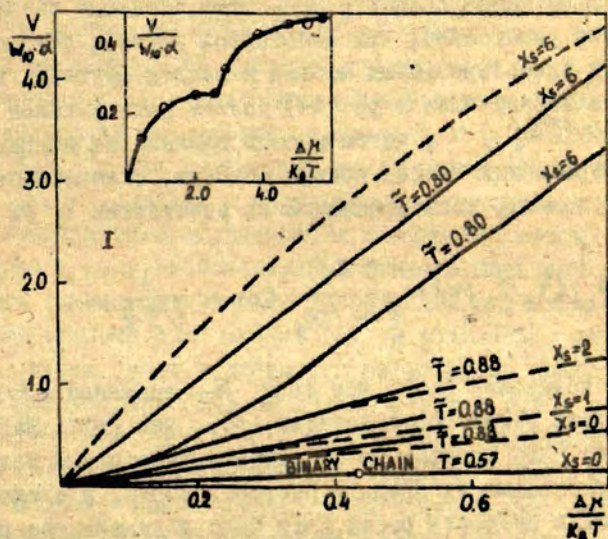


Рис.9. Скорость движения моноатомной ступени. Сплошные кривые измерены при $\bar{T} = 0,80$ в [26]; при $\bar{T} = 0,88$ в [I], а для бинарной цепочки - в [6]. Прерывистые кривые вычислены с помощью ур.(44).

довлено возрастанием плотности активных узлов по сравнению с равновесной за счет появления конфигураций с нависанием. В области более низких температур нависания почти отсутствуют, и ур.(44) дает максимально возможную скорость роста.

Если x_s - порядка расстояния между ступенями, при котором диффузионные поля перекрываются, меньшее значение характерного расстояния, чем полагалось в (44), обуславливает подвод адсорбированных частиц к каждой ступени. В этом случае второй член в ур.(44) должен быть умножен на $\tanh(L/\sqrt{2x_s})$, чтобы учесть влияние на концентрацию адсорбированных частиц вблизи ступени, оказываемое другими ступенями, расположенными на расстоянии L от нее [40]:

$$A_{st}(\bar{T}, x_s) = 1 + \frac{2x_s}{1+4/x_s} \tanh \frac{L}{\sqrt{2x_s}}. \quad (45)$$

Результаты показали, [26], что если x_s сравнима с L , то скорость роста более соответствует (45), чем (44). Из ур. (45) следует, что спонтанные флуктуации расстояний между ступенями уменьшают их среднюю скорость роста, а следовательно, и общую скорость роста, что было подтверждено результатами моделирования.

В [26] была также исследована модель Schwoebel. Адсорбированным атомам запрещалось достигать края ступени с более высокой ее стороны. Как было предсказано феноменологическими теориями, скорость ступеней уменьшалась и обнаруживалась тенденция к образованию макроступеней (кинематических волн). Скорость движения ступени двухкомпонентного кристалла ($\varphi^{aa} - \varphi^{bb} = \frac{1}{2} \varphi^{ab}$), растущего из расплава, была получена для случая роста лишь наполовине кристалла [6]. В этом случае переоснащение

$$\Delta\mu = L\Delta T/T, \quad (46)$$

где L - теплота плавления, $\Delta T = T_{eq} - T$ - разность температуры плавления и температуры системы. Связь скорости движения ступени и $\Delta\mu / k_B T$ была найдена умножением скорости роста в положении на половине кристалла на равновесную плотность таких мест на ступени. При $\bar{T} = 0.57$ активные места в основном - положения на половине кристалла, а нависания - редки. Очевидно, что скорость ступени в этом случае будет существенно меньше максимально возможной по двум причинам. Во-первых, не все типы узлов, соответствующих положениям на половине кристалла, являются активными. Во-вторых, с уменьшением температуры системы концентрация положений на половине кристалла на край ступени уменьшается. Скачок на кривой, описывающей зависимость v от $\Delta\mu / k_B T$, связан с переходом от упорядоченного (в смысле компонентной структуры) к разупорядоченному росту.

Форма и рост дислокационной спирали были описаны на основании феноменологических теорий: для случая изотропных скоростей ступени приближенно [40] и точно [45]; для анизотропных систем (учет зависимости скорости от направления) [46]. Форма спирали была исследована также путем моделирования Монте-Карло [29]; было произведено сравнение результатов с оценками аналитических теорий [46]. Было получено, что при высоких температурах спираль изотропна, ее форма соответствует форме архимедовой спирали на достаточно больших расстояниях от ее центра. При низких температурах форма спирали отражает симметрию кристалла.

Расстояние Δr между витками спирали пропорционально радиусу зародыша (и, следовательно, обратно пропорционально $\Delta\mu / k_B T$); константа пропорциональности равна 18,98 в области высоких температур и 8,0 - в области низких. Это изменение значения константы связано с переходом от изотропного роста к росту спиралей, отражающих симметрию кристалла в интервале значений \bar{T} между $\bar{T} \approx 0.1$ и $\bar{T} \approx 0.6$. Для $\bar{T} = 0.88$ было показано, что произведение $\Delta r \Delta\mu / k_B T$ постоянно до таких больших значений пересыщений, при которых размер зародыша становится порядка постоянной решетки.

Так как предполагается, что скорость движения ступени линейна по $\Delta\mu$ (ур.(43)), полная скорость роста грани, будучи произведением скорости движения ступени и плотности ступеней, должна быть квадратичной функцией $\Delta\mu / k_s T$. Этот характер зависимости справедлив в той же области значений $\Delta\mu$. Необходимо заметить, что в указанных работах по моделированию было введено ограничение событиями присоединений и отрывов частиц лишь на край спирали. Таким образом, зародышеобразование между ступенями спирали не учитывалось. Такое ограничение разумно лишь в области малых пересыщений и больших характерных расстояний поверхностной диффузии (но не больших, чем расстояние между витками спирали, т.к. это приведет к уменьшению R и в конечном счете к линейному закону роста [47]).

Эффект конкурирующего влияния спирального роста и роста путем двумерного зарождения был рассмотрен в [30]. На рис.(10) показано, что в области низких пересыщений доминирует спиральный рост, в то время как с увеличением $\Delta\mu$ возрастает вклад зарождения. При большом пересыщении поверхность становится настолько шероховата, что нельзя по кинетике роста отличить идеальную и дефектную поверхность. Как и следовало ожидать, для достаточно гладких поверхностей при $\bar{T} = 0.44$, что гораздо ниже \bar{T}_R , наблюдается сильное влияние поверхностной диффузии.

§ 7. Рост тонких пленок

В этой области был выполнен ряд исследований с помощью моделирования Монте-Карло для изучения различных экспериментально полученных явлений. Предполагалось, что подложка атомарно гладкая; она взаимодействует с осаждаемыми атомами; энергия этого взаимодействия отличается от энергии взаимодействия между осаждающимися атомами. Если маточная фаза недосыщена по отношению к твердой фазе пленки, на подложке формируется равновесный адсорбционный слой. Зависим-

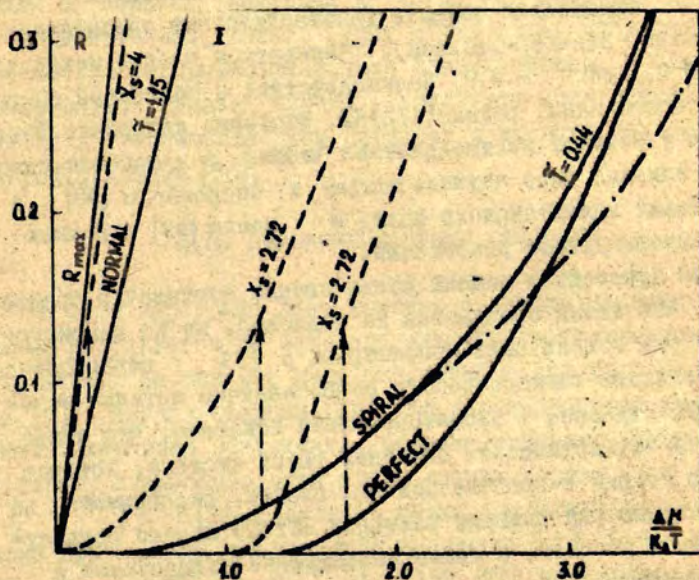


Рис. 10. Влияние поверхностной диффузии на три разных механизма роста грани кристалла Коссея (100). Данные для $\tilde{T} = 1,5$ из [1], для $\tilde{T} = 0,44$ - из [38]

мость концентрации частиц адсорбционного слоя от пересыщения (то есть давления газовой фазы) обычно называется изотермой адсорбции. В [32] они были получены для материала, имеющего в твердой фазе простую кубическую решетку и осаждающегося на подложку в квадратную решетку; результаты были получены в приближении взаимодействия ближайших и следующих за ближайшими соседями (взаимодействие описывалось потенциалом Ван-дер-Ваальса). Температура пленки менялась от $\tilde{T} = 0,1$ до $\tilde{T} = 2,0$. Взаимодействие с подложкой сохранялось постоянным, равным $(1/2)kT$. Изотерма адсорбции Лэнгмюра не учитывает взаимодействия частиц в плоскости пленки. Их влияние было изучено Fowler и Guggenheim [48] в приближении молекулярного поля, и Honig [49] в рамках низкотемпературного разложения.

Для простейшей модели роста пленки достаточно предположить, что атомы осаждаются на подложке, но не мигрируют по ней. Эта модель была рассмотрена в [33] с целью объяснить поведение электрического сопротивления металлической пленки на подложке - изоляторе. Было показано, что можно построить статистическое описание такой системы, которое является точным в пределе больших систем. Эксперименты по моделированию (на решетке размером 60×60) хорошо согласуются с этой теорией, а также качественно согласуются с экспериментами.

Если учесть взаимодействия в плоскости пленки, при $\tilde{T} < \tilde{T}_c$ будет работать механизм роста путем двумерного зародышеобразования. Этот механизм был изучен в [34] для $\tilde{T} = 0,10, 0,13, 0,16$ с учетом поверхностной диффузии ($X_s = 5,6, 3,9, 3,0$). Величины параметров взаимодействия были выбраны на основе оценок для осаждения серебра на хлористом натрии. Было показано, что соответствие результатов с теорией Zinsmeister для двумерного зарождения неудовлетворительное, и что вклад прямых присоединений из окружающей фазы к кластерам не может не учитываться при этих условиях.

Влияние пересыщения на форму растущей пленки было изучено в [35] для $\tilde{T} = 0,68$ без учета поверхностной диффу-

зии; энергии взаимодействия осажденных частиц с подложкой выбирались меньшими или равными энергии взаимодействия между осажденными частицами. При малом пересыщении механизм зарождения работает во всех слоях, но более медленно зарождение идет на подложке. Поэтому многие частицы осаждаются на вершине кластеров до того, как кластеры срастутся. Следовательно, пленка будет шероховата. При высоком пересыщении зародышеобразование необязательно, и будет формироваться гладкая пленка. Результаты моделирования оказались в количественном согласии с теорией Камчиева для роста пленки [50].

§ 8. Двухкомпонентные системы.

В этом параграфе дано краткое описание недавно полученных результатов по моделированию роста двухкомпонентных кристаллов. До сих пор было рассмотрено три случая: 1) Чернов [6] изучил системы, твердые ячейки которой характеризуются энергиями притяжения, большие значения которых соответствуют взаимодействиям ячеек разных сортов ($\varphi^{aa} = \varphi^{bb} = \frac{1}{2} \varphi^{ab}$); 2) В [51-53] система также характеризовалась энергиями притяжения, однако были выделены $b-b$ - взаимодействия ($\varphi^{aa} = \varphi^{ab} = \frac{3}{5} \varphi^{bb}$); 3) В [31] использован псевдоионный тип взаимодействия ($\varphi^{aa} = \varphi^{bb} = -\varphi^{ab}$).

В 1) случае поверхность кристалла искусственно поддерживалась плоской, за исключением одной моноатомной ступени, содержащей одно место в положении на половине кристалла. В 2) рассмотрена кристаллизация регулярных сплавов, использовано ограничение конфигурациями без нависаний. Эти ограничения при использованных температурах T нереалистичны. Поэтому результаты моделирования имеют физический смысл, если предположить, что дополнительное взаимодействие в направлении роста эффективно описет длинноволновые взаимодействия в физическом кристалле (в [31] было показано, что введение такого взаимодействия не меняет выражения для частот переходов (ур.(22)). В системах 1) и 2) пересыщение

создавалось понижением температуры системы: рост из расплава ($\Delta\mu^p = L^p \Delta T / T_{eq}$) с различными теплотами плавления L^p для α - и β -частиц. В [31] рассмотрен рост из раствора.

Основное различие одно- и двухкомпонентных кристаллов, как это очевидно, состоит в появлении новой характеристики системы - структуры твердой фазы. Поэтому специальное внимание было уделено структурным переходам, т.к. Черноз [6] показал, что формирование кристаллической фазы в процессе роста - процесс коллективный, т.е. имеет место кинетический фазовый переход. Был обнаружен переход от правильной NaCl структуры при малых пересыщениях к разупорядоченной при больших пересыщениях [6, 31]. Это привело к скачку на кривой скорости роста в зависимости от $\Delta\mu$ и к появлению доменов с внутренней регулярной структурой [31]. Можно считать интересным результатом, что тенденция к образованию регулярной структуры с ионным типом взаимодействия настолько сильна, что лишь очень высокие пересыщения могут разрушить такую структуру. Дополнительное длинноволновое кулоновское взаимодействие, которое играет важную роль в физической системе, лишь усилит эту тенденцию. По-видимому, этот результат согласуется с экспериментальными данными.

Например, игольчатые кристаллы гипса ($CaSO_4 \cdot 2H_2O$), растущие на шероховатых гранях ($\bar{T} > \bar{T}_g$ и/или очень большие $\Delta\mu$), никогда не проявляют нерегулярности в структуре чередования положительных и отрицательных ионов. Таким образом, для ионного типа взаимодействия структура NaCl формируется таким образом, что концентрации α - и β -частиц в кристалле останутся одинаковыми.

Для не ионного типа взаимодействия это не так. Здесь уменьшение скорости роста приводит к увеличению размеров областей, содержащих только β -частицы. Поэтому нет прямой корреляции между числом α - и β -частиц в кристалле. Состав кристалла будет определяться свойствами расплава. Удобно представить эту зависимость с помощью фазовых диаграмм, как на рис. II. Чтобы получить линию ликвидуса, было предположено, что частоты присоединения W_{10}^{α} и W_{10}^{β} пропор-

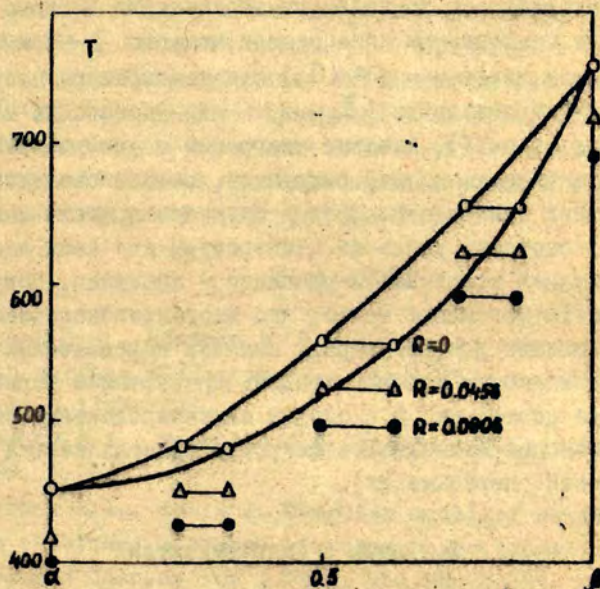


Рис. II. Равновесная и кинетическая фазовые диаграммы для сплава (случай 3, 5, 8) с равными теплотами плавления $L^a = L^b = \kappa_0 T$. Верхние линии (ликвидуса) определяют концентрации в расплаве, нижние (солидуса) - в кристалле.

циональные концентрации α - и β -частиц в расплаве соответственно. Если теплоты плавления L^{α} и L^{β} - одинаковы (а также $(W_{10}^{\alpha})_{\text{ср}} = (W_{10}^{\beta})_{\text{ср}}$), обнаруживается монотонная зависимость линий ликвидуса и солидуса от температуры в интервале температур от температуры образования чистого α -кристалла до температуры образования чистого β -кристалла. На равновесной диаграмме ($R=0$) эти температуры отвечают температурам плавления $(\bar{T}_{\alpha})_{\text{ср}}$ α -кристалла и $(\bar{T}_{\beta})_{\text{ср}}$ β -кристалла (рис. II). Фазовые диаграммы с увеличением скорости практически не деформируются, а лишь смещаются в область низких температур. Эффект ближнего предела мал. Зависимость скорости роста от температуры для всех значений концентраций компонент в расплаве - линейная. Полученные результаты указывают на то, что многокомпонентность системы не вносит для регулярных сплавов качественных особенностей в кинетику кристаллизации. Проявлением нормально-го механизма роста, как и в случае однокомпонентных систем, является линейная зависимость скорости кристаллизации от переохлаждения (пересыщения).

§ 9. Связь с экспериментом.

Для того, чтобы иметь возможность сравнить результаты экспериментов с результатами моделирования, необходимо соотносить температуру, параметры взаимодействия и пересыщения сложной экспериментальной системы с теми же параметрами упрощенной модели для моделирования.

После установления соответствия между характерными параметрами в моделировании и экспериментальной системой, можно сравнить обе системы и использовать результаты моделирования для обеспечения результатов эксперимента. Одна возможность, о которой мы уже говорили, - это сравнение скоростей роста, более того, механизмов роста, которые дают обнадеживающее соответствие. Можно также изучать ступени растущих дислокационных спиралей и анодного травления в экспериментах и моделировании. Следует ожидать в будущем

плодотворного сотрудничества в этой области, особенно если моделирование будет использовано в более низкотемпературной области (например, $T < 0.5$) с учетом больших характерных расстояний поверхностной диффузии (скажем, порядка десяти узлов решетки). Третьей областью, представляющей интерес, являются структурные изменения в двухкомпонентном кристалле, вызванные кинетикой роста. Важен не только переход порядок-беспорядок в сплавах, но и точечные дефекты (вакансии, примесные включения) в однокомпонентном кристалле. Очевидным пробелом в моделировании структуры кристаллов является структура алмаза.

Литература

1. Gilmer G.H., Bennema P. Simulation of crystal growth with surface diffusion. - J.Appl.Phys. , 1972, vol.43, No.4, p.1347-1360.
2. Chernov A.A.. Proc.I.G.C.C. Boston, ed.II.Steffen Peiser, 1966, p.25.
3. Chernov A.A., Lewis J. Computer model of crystallization of binary systems; kinetics phase transition. - J. Phys.and Chem.Solids , 1967, vol.28, No.11, p.2185-2198.
4. Binsbergen F.L. A revision of some concepts in nucleation theory. - Kolloid-Z. und Z.Polym. , 1970, vol. 237, No.2, p.289-297.
5. Binsbergen F.L. A reconsideration of polymer crystallization theory. - Kolloid-Z. und Z.Polym. , 1970, vol. 238, No.1-2, p.389-395.
6. Чернов А.А. Рост цепей сополимеров и смешанных кристаллов - статистика проб и ошибок.- Успехи физ.наук , 1970, т.100, № 2, с.277-328.
7. Binsbergen F.L. Study of molecular phenomena in the nucleation of crystallization by computer simulation and application to polymer crystallization theory.- J.Cryst. Growth , 1972, vol.13/14, p.44-47.

8. Leamy H.J., Jackson K.A. Roughness of the crystal-vapor interface.- *J.Appl.Phys.* , 1971, vol.42, p.2121
9. Соловьев В.Э., Борисов В.Т. Изучение кинетики роста грани кристалла методом моделирования.- *ДАН* , 1972, т.202, № 2, с.329-332.
10. Соловьев В.В., Борисов В.Т. Изучение атомной структуры грани растущего кристалла.- *Кристаллография* , 1972, т.17, вып.5, с.918-928.
11. Bennema P., Boon J., Van Leeuwen C., Gilmer G.H. Confrontation of the BCF theory and computer simulation experiments with measured (R, ξ) curves.- *Krist. u. Techn.* , 1973, vol.8, No.6, p.659-678.
12. Van Leeuwen C., Van der Berden J.P., to be published in *Surf.Sci.*
13. Swendsen R.H., unpublished.
14. Leamy H.J., Gilmer G.H., Jackson K.A., Bennema P. Lattice gas interface structure: a Monte-Carlo simulation. *Phys.Rev.Lett.*, 1973, vol.30, No.13, p.601-603.
15. Müller-Krumbhaar H., Binder K. Dynamic properties of the Monte-Carlo method in statistical mechanics.- *J. Statist.Phys.* , 1973, vol.8, No.1, p.1-24.
16. Kohl C.S., Ives M.B. Computer simulation of crystal dissolution morphology.- *J.Cryst.Growth* , 1972, vol. 16, No.2, p.123-130.
17. Van Leeuwen C. The equilibrium structure of octupole type Kossel crystal-fluid interfaces.- *J.Cryst.Growth* 1973, vol.19, p.133.
18. Van Dijk D.J., Van Leeuwen C., Bennema P. Monte-Carlo simulation of anisotropic surfaces.- *J.Cryst.Growth* , 1974, vol.23, No.1, p.81-84.
19. de Haan S.W.H., Meusen V.J.A., Veltman B.P., Bennema P., Van Leeuwen C., Gilmer G.H. Simulation of Crystal growth with a special purpose computer.- *J.Cryst. Growth* , 1974, vol.24/25, p.491-494.
20. Van der Berden J.P., Van Leeuwen C., Bennema P., Van der Kruk W.L., Veltman B.P.Th., to be published in *J.*

Appl. Phys.

21. Betrocci U. Computer simulation of crystal growth on a fcc surface.- J.Cryst.Growth , 1974, vol.26, p.219.
22. Есин В.О., Данилюк В.И., Плишкин Ю.М., Подчищенова Г.Д. Моделирование равновесной атомной структуры поверхности кристалла в однокомпонентной системе.- Кристаллография , 1973, т.18, вып.5, с.920-925.
23. Eddleston B.M.F., Thesis M.I.T. September 1966.
24. Horsak I., Skrivanek J. Simulation study of the crystal surface during dissolution. Ber.Bunsenges.- Phys. Chem. , 1975, vol.79, No.5, p.433-436.
25. Gilmer G.H., Bennema P. Computer simulation of crystal surface structure and growth kinetics.- J.Cryst. Growth , 1972, vol.13/14, p.148-153.
26. Van Leeuwen C., Van Rosmalen R., Bennema P. Simulation of stop motion on crystal surfaces.- Surface Science , 1974, vol.44, No.1, p.213-236.
27. Leamy H.J., Gilmer G.H. The equilibrium properties of crystal growth steps.- J.Cryst.Growth , 1974, Vol. 24/25, p.499-502.
28. Van Leeuwen C., Mischgofsky F.H.- J.Appl.Phys. , 1975, vol.46, p.1075.
29. Swendsen R.H., Kortman P.J., Landau D.P., Müller-Krumbhaar H. Spiral growth of crystals: Simulation on a stochastic model.- J.Cryst.Growth , 1976, vol.35, No.1, p.73-78.
30. Gilmer G.H., unpublished.
31. Cherepanova T.A., Van der Eerden J.P., Bennema P. Ionic crystal growth at high supersaturation: A Monte-Carlo simulation, to be published.
32. Abraham Farid P., White George M. Computer simulation of vapor deposition on two-dimensional lattices.- J. Appl.Phys. , 1970, vol.41, No.4, p.1841-1849.
33. Coutts T.J., Hopewell B. Monte-Carlo studies of thin film growth.- Thin Solid Films , 1972, vol.9, No.1, p.37-55.

34. Adams A.C., Jackson K.A. Computer simulation of vapor deposition.- *J.Cryst.Growth* , 1972, vol.13/14, p.144-147.
35. Kashchiev D., Van der Eerden J.P., Van Leeuwen C., unpublished.
36. Bonissent A., Mutaftschiev B. Monte Carlo calculation of the free energy of small monoatomic clusters.- *J. Cryst.Growth* , 1974, vol.24/25, p.503-506,
37. Abraham Farid F. Monte Carlo simulation of physical clusters of water molecules.- *J.Chem.Phys.* , 1974, vol.61, No.3, p.1221-1225.
38. Hinzo D., Poll H.-U. Computer-Simulation des Schichtwachstums bei dünnen Polymerschichten, hergestellt in einer Glimmentladung.- *Thin Solid Films* , 1974, vol. 21, No.1, p.1-9.
39. Leamy H.J., Gilmer G.H., Jackson K.A. in *Surface Physics* ed. Blackley J.H., 1976.
40. Burton W.K., Cabrera N., Frank F.C.- *Phil.Mag.* , 1961, No.243, p.299.
41. Müller-Krumbhaar H., *Proc.ECCG1 Zürich*, 1976.
42. Gilmer G.H., Leamy H.J., Jackson K.A. Pair approximation for interface kinetics.- *J.Cryst.Growth* , 1974, vol.24/25, p.495-498.
43. Van der Eerden J.P., Kalf R.L., Van Leeuwen C. Evaporation at high underpressure: confrontation of theory and experiment.- *J.Cryst.Growth* , 1976, vol.35, No.2, p.241-244.
44. Van Leeuwen C., Bennema P. The critical nucleus.- *Surface Science* , 1975, vol.51, No.1, p.109-130.
45. Cabrera N., Levine M.M. On the Dislocation theory of evaporation of crystals.- *Phil.Mag.* , 1956, vol.1, No.5, p.450-458.
46. Müller-Krumbhaar H., Burkhardt T.W., D.M.Kroll, unpublished.
47. Bennema P., Boan J., Van Leeuwen C., Gilmer G.H., Confrontation of the BCF theory and computer simulation

experiments with measured (R, G) curves.- Krist.u. Techn. , 1973, vol.8, No.6, p.659-678.

48. Fowler R.H., Guggenheim E.A. Statistical thermodynamics. Cambridge, New York, 1939.
49. Honig J.M. The solid gas interface. Ed.E.A.Flood, Dekker, New York, 1967, p.371.
50. Kashchiev D., unpublished.
51. Cherepanova T.A., Shirin A.V., Borisov V.T. Computer simulation of crystal growth from melt.-In Industrial crystallization, New York, Plenum Press, 1976, p.113.
52. Черепанова Т.А., Ширин А.В., Борисов В.Т. Моделирование равновесной структуры межфазной границы кристалл-расплав.- Ученые записки ЛГУ им.П.Стучки, 1975, т.237, с.40.
53. Черепанова Т.А., Ширин А.В., Борисов В.Т. Моделирование роста бинарного кристалла на ЭВМ.-Кристаллография, 1977, т.22, с.260.

ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА ФАЗ И КИНЕТИКИ РОСТА БИНАРНОГО ГЦК КРИСТАЛЛА, РАСТУЩЕГО ИЗ РАСПЛАВА

Н.Н.Трунов (Горьковский госуниверситет
им.Н.И.Лобачевского)

Изучение кинетики роста и структуры границы раздела фаз продолжает оставаться одним из актуальных вопросов теории и эксперимента по росту кристаллов [1-7]. Значительные успехи в этом направлении связаны с использованием машинного моделирования процесса роста на основе элементарных актов атомного обмена на границе раздела фаз. Однако, большинство работ посвящено изучению однокомпонентных систем. Изучение многокомпонентных систем связано с целым рядом трудностей. Если сделать некоторые упрощающие предположения, то удастся построить модель для изучения роста бинарного кристалла. В работе [6] изучается рост двумерного бинарного кристалла Косселя в приближении Брэгга - Вильямса. Трехмерный кристалл Косселя смоделирован методом Монте-Карло в работе [7]. Настоящая работа посвящена рассмотрению роста бинарного ГЦК-кристалла из расплава в направлениях $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$.

В основу модели положены следующие условия: при затвердевании выделяющаяся энергия фазового перехода равна энергии связи между атомом, перешедшим в твердую фазу, и ближайшими соседями, принадлежащими твердой фазе, т.е. учитываются атомы первой координационной сферы; тепловая энергия атомов, находящихся как в жидкой, так и в твердой фазах вблизи границы фазового перехода, соответствует распределению Больцмана; скорость роста задается отводом тепла от фазовой границы. Взаимодействие атомов, находящихся в твердой фазе, с атомами расплава не учитывается. В случае бинарных сплавов в состав кристалла входят атомы двух сортов, поэтому необходимо знать энергию связи между одноименными атомами и между атомами разных сортов. На рис. 1 приводятся два возможных варианта расположения соседей у

атома в плоскости (III), остальные соседи могут находиться только выше или ниже приведенной. Как видно из рисунка, могут существовать связи типа А-А, В-В, А-В. При подсчете энергии одноименных связей типа А-А и В-В использовалась теплота фазового перехода для чистых элементов А и В. При этом предполагалось, что вся теплота плавления равномерно распределена между ближайшими соседями. Подсчет энергии связи между атомами разного сорта в твердой фазе проводился с учетом теплоты смещения. Число связей между разнородными атомами при заданной концентрации примеси определялось из выражений, приведенных в работе [8]. Зная число разноименных связей типа А-В и теплоту смещения раствора, можно определить дополнительную энергию, приходящуюся на одну связь между атомами разных сортов. Энергия связи между разноименными атомами ϵ_{AB} определялась из выражения:

$$\epsilon_{AB} = (\epsilon_{AA} + \epsilon_{BB})/2 + \epsilon_S,$$

где ϵ_{AA} , ϵ_{BB} - энергия, приходящаяся на одну связь между атомами сорта А и В соответственно; ϵ_S - дополнительная энергия, появляющаяся в результате смещения.

Модель роста включает элементарные акты обмена: присоединение и отрыв атомов в позициях на фазовой границе, а также диффузию атомов по поверхности раздела фаз. В результате обычной процедуры Монте-Карло выбор может пасть на атом, находящийся на поверхности твердой фазы, или на атом, находящийся в жидкости, граничащей с твердой фазой. После того, как атом был выбран, следующим шагом было определение его тепловой энергии ϵ . Для этого использовался датчик случайных чисел с нормальным распределением, при этом учитывалась текущая температура на границе раздела фаз. Если выбранный атом оказывался в жидкой фазе, то разыгрывался сорт атома. Для этого интервал 0,0-1,0 разбивался на два участка, пропорциональных количеству атомов в единице объема первого и второго типов. Очередное случайное число попадало в один из выделенных промежутков,

что и определяло сорт выбранного атома. Тип атома и его местоположение в твердой фазе хранились в памяти машины.

Процессы перехода атома из жидкой фазы и, наоборот, идут через барьер активации. Поэтому выбранный атом может присоединиться к твердой фазе, если выполнится условие: $\epsilon > W_L$, где W_L - энергия активации перехода из жидкой фазы в твердую. Следующим этапом было вычисление энергии, выделившейся в результате присоединения атома. Количество выделившейся энергии зависит от числа и сорта ближайших соседей, находящихся в твердой фазе. Эта энергия распределялась поровну между ближайшими соседями и присоединившимся атомом. Если при этом у атома оставалась энергия, достаточная для отрыва, то он отрывался, в противном случае атом оставался в занятой позиции.

Условием отрыва атома от поверхности и перехода его в жидкую фазу служило: $\epsilon > \epsilon_{AA} \cdot n_1 + \epsilon_{AB} \cdot n_2 + W_S$

или $\epsilon > \epsilon_{BB} \cdot n_1 + \epsilon_{AB} \cdot n_2 + W_S$ в зависимости от того, отрывается атом сорта А или В, где W_S - энергия активации отрыва атома; n_1, n_2 - числа ближайших соседей одинакового и разного сорта соответственно. Если энергия теплового движения выбранного атома недостаточна для реализации отрыва от поверхности и перехода его в жидкую фазу, то проверялась возможность диффузионного акта. Условием диффузионного перехода было: $\epsilon > W_D + E_1 - E_2$,

где W_D - энергия активации диффузионного движения, E_1 и E_2 - энергия связей до и после диффузии, вычисленные по числу и сорту связей. Если разность $E_1 - E_2$ была отрицательной, то для осуществления диффузионного перехода необходимо, чтобы тепловая энергия диффундирующего атома была выше энергии активации. Направление диффузии выбиралось из условия стремления системы к равновесию.

Число присоединяющихся и отрывающихся атомов существенным образом зависит от выбора величин W_L и W_S . При заданном теплоотводе соотношение между числом присоединяющихся и отрывающихся атомов от поверхности раздела

фаз в единицу времени должно быть в среднем постоянной величиной. Выделяющаяся теплота фазового перехода компенсирует теплоотвод, что осуществляет стационарное состояние системы и реализует в среднем постоянную скорость роста. В исходном состоянии величины барьеров выбирались следующие: $W_L = 7\epsilon_{A_2}$; $W_S = 3\epsilon_{A_2}$; $W_D = 3\epsilon_{A_2}$, где ϵ_{A_2} - энергия одной связи в чистом A_2 . Потенциал диффузии в процессе счета оставался постоянным. Потенциалы W_L и W_S при выходе системы на стационарный режим изменялись с шагом $\Delta W_L = 0,5\epsilon_{A_2}$ и $\Delta W_S = 0,2\epsilon_{A_2}$. Подбор величин потенциалов W_L и W_S проводился самосогласованным методом. Критерием правильности выбора потенциалов служило то, что температура на фронте кристаллизации в процессе роста не отклонялась более чем на 3° . К моменту выхода на стационарный режим устанавливались вполне конкретные значения потенциалов, которые зависели от скорости роста (величины теплоотвода). Вариация начальных значений W_L и W_S в разумных пределах не влияет на результаты машинного эксперимента в пределах статистических ошибок, но при других значениях W_L и W_S медленнее осуществлялся выход на стационарный режим.

В процессе роста контролировалась средняя текущая температура на фронте кристаллизации. Для этого в исходном состоянии на границе раздела фаз выделялся объем $N_L = 1200$ атомов в жидкой фазе, прилегающей к границе раздела фаз, и $N_S = 1200$ атомов в твердой фазе. Подсчитывалась начальная средняя тепловая энергия атомов выделенного объема E при температуре фазового равновесия T_0 кристалла с концентрацией примеси C_S и жидкой фазы с концентрацией примеси C_L : $E = 3/2 kT_0 (N_L + N_S)$.

В результате одного элементарного события (отрыв, присоединение, диффузия) энергия выделенного объема уменьшается на величину Δq , с помощью которой задается скорость роста и $\pm (\epsilon_{AA} \cdot n_1 + \epsilon_{AB} \cdot n_2)$ или $\pm (\epsilon_{BB} \cdot n_1 + \epsilon_{AB} \cdot n_2)$ в зависимости от сорта атома, совершающего переход. Знак выбирался в соответствии с тем, выделялась или поглощалась

энергия при переходе атома. После каждого элементарного события проводился подсчет суммарной тепловой энергии в выделенном объеме, что позволяло получать среднюю температуру выделенного объема, т.к. сумма ($N_L + N_S$) независимо от типа события не меняется. Окончательное выражение для подсчета текущей температуры на $n+1$ шаге имеет вид:

$$T_{n+1} = T_n - [\Delta q \pm (\epsilon_{AA} \cdot n_1 + \epsilon_{AB} \cdot n_2)] / 1,5 K (N_L + N_S)$$

для совершающего переход атома сорта А. В процессе роста кристалла соотношение между N_L и N_S изменяется, т.к. атомы из жидкой фазы переходят в твердую. В процессе счета это соотношение нарушалось не более чем на 0,5%. Для этого из твердой фазы атомы убирались со средней энергией, соответствующей текущей температуре, а в жидкую фазу добавлялись со средней энергией, соответствующей температуре фазового перехода. Это равносильно тому, что выделенный объем двигался вместе с границей раздела фаз.

Чтобы задать в среднем постоянную скорость роста, необходимо обеспечить равномерный теплоотвод из выделенного объема системы. Если каждому машинному акту, в результате которого рассматривается история одного атома, приписать постоянное физическое время Δt , то отводя постоянную величину тепла Δq с каждым машинным актом, можно получить в среднем постоянную скорость роста кристалла. По числу просчитанных историй (машинных актов) и числу выросших атомных слоев вычислялось численное значение скорости роста. Для определения величины Δt была применена модель Эйнтштейна, т.е. считалось, что каждый атом как в твердой фазе, так и в жидкой совершает в среднем 10^{12} кол/сек. Однако, чтобы совершить переход, атом должен двигаться в определенном направлении. Число колебаний атома в выбранном направлении в единицу времени гораздо меньше, чем 10^{12} . Далее необходимо учесть тот факт, что теплоотвод совершается от площади в 400 атомов, т.е. в данный момент необходимо проследить за судьбой 400 атомов. Учет описан-

ных выше условий привел к тому, что в данной работе время одного машинного акта бралось равным 10^{-11} сек.

Списанная выше модель справедлива для бинарных сплавов, представляющих собой твердый раствор замещения. Компоненты, входящие в состав сплава, должны иметь в чистом виде при температуре плавления одинаковую структуру с твердым раствором. Модель была применена для изучения стационарного роста бинарного сплава $Ag - Al$, который удовлетворяет всем требованиям модели. Алгоритм был реализован на языке Алгол-60 для транслятора ТА-2М и на его основе проведен цикл исследований на ЭВМ-222. Для каждого случая было просчитано 10^5 историй.

В исходном состоянии, чтобы задать структуру кристалла, в памяти машины моделировалось три атомных слоя кристалла. Моделирование кристалла проводилось по аналогии с решеточной моделью, описанной в работе [5]. В расплаве задавалась концентрация примеси C_L . Начальная температура бралась равной температуре равновесного состояния кристалла с концентрацией примеси C_S , и расплава с концентрацией примеси C_L . Расчеты проводились для двух значений концентрации $C_L = 10$, $C_L = 19$ атомных процентов примеси (Ag - примесь).

В качестве основного результата машинного эксперимента выводились: шероховатость $R = (\eta - \eta_0) / N_{пл}$, где η_0, η - число нереализованных поверхностных связей на атомногладкой и шероховатой поверхностях; $N_{пл}$ - число атомов на атомногладкой поверхности раздела фаз; ΔT - переохлаждение на фронте кристаллизации; C_S - концентрация примеси в твердой фазе; диффузность фазовой границы. Через каждые $5 \cdot 10^3$ историй результаты выводились на печать. В процессе роста перераспределение примеси на фронте кристаллизации не учитывалось, т.е. концентрация примеси в жидкой фазе оставалась постоянной и равной C_L . Это условие справедливо для больших объемов жидкой фазы, высоких коэффициентов диффузии в жидкости и малых скоростей роста.

На рис.2 приводятся зависимости шероховатостей и переохлаждения от скорости роста. Приведенные на рисунке ошибки подсчитывались по обычной методике расчета статистических ошибок эксперимента. Результаты приведены для концентрации примеси 19 атомных процента. Для других концентраций результаты совпадают с приведенными с точностью до ошибки машинного эксперимента. Как видно из рисунка, шероховатость в широком диапазоне скоростей роста остается постоянной величиной, но при скоростях роста, превышающих скорость 1,5 см/сек, величина шероховатости заметно возрастает. Это, очевидно, обусловлено тем, что для данного сплава при равновесном состоянии системы кристалл - расплав (скорость роста равна нулю) поверхность раздела фаз сильно развита. Это приводит к тому, что плотность точек роста высокая и при скоростях роста, меньших 1,5 см/сек, достаточна для осуществления роста кристалла. При скоростях роста, превышающих 1,5 см/сек, равновесной плотности точек роста становится недостаточно. Это приводит к тому, что поверхность раздела фаз начинает развиваться, присоединяя к фазовой границе атомы с минимальным числом связей закрепления. Соответственно происходит возрастание плотности точек роста, необходимой для обеспечения высоких скоростей роста. Диффузность границы раздела фаз также возрастает с увеличением скорости роста от 7 атомных слоев при минимальной скорости роста до 12 атомных слоев при максимальной скорости роста. Приведенные результаты ΔT показывают, что кинетический коэффициент близок к 10 см/сек·град. Это находится в согласии с экспериментальными результатами роста металлических кристаллов из расплава и с результатами моделирования, приведенными в работе [7].

На рис.3 приведены зависимости концентрации примеси в твердой фазе C_s в изученном диапазоне скоростей и двух направлений роста. Результаты получены для двух значений концентрации серебра в жидкой фазе C_L равной 10 и 19 ат.%. Рисунок 4 иллюстрирует зависимость C_s (примесь

σ) от скорости роста граней (100) и (111) для $C_L = 19$ ат.%. Рисунки показывают, что с увеличением роста коэффициент распределения примеси в твердой фазе стремится к единице. Этот коэффициент возрастает быстрее для растущей грани, (100).

Экстраполяция результатов до пересечения с осью ординат дает значение концентрации примеси в твердой фазе при равновесии кристалла с расплавом. Сравнение полученных значений C_S при нулевой скорости роста с значениями концентрации примеси на линии солидуса фазовой диаграммы состояний [9] дает хорошее совпадение. Таким образом, модель позволяет по заданной линии ликвидуса получать линию солидуса фазовой диаграммы состояния бинарных сплавов, представляющих собой твердый раствор замещения.

Литература

1. Соловьев В.В., Борисов В.Т. Изучение кинетики роста грани кристаллов методом моделирования. - ДАН, 1972, т.202, с.329
2. Соловьев В.В., Борисов В.Т. Изучение атомной структуры грани растущего кристалла. - Кристаллография, 1972, т.17, с.918
3. Jackson K.A. The Present state on the Theory of Cr. growth from the Melt. - Journ.of Cryst.Growth, 1974, v.24/25, p.130.
4. Gilmer G.H. and co. Pair Approximation for interface Kinetics. - Journ.of Cryst.Growth, v.24/25, p.495.
5. Есин В.О., Данилюк В.И. и Подчинова Г.Л. Решеточная модель (100) и (111) межфазных границ гцк кристалла. - Кристаллография, 1975, т.20, с.1130.
6. Темкин Д.Е. Нестационарное бездиффузионное фазовое превращение в бинарной системе. - Кристаллография, 1972, т.17, с.77

7. Черепанова Т.А., Ширин А.В., Борисов В.Т. Моделирование роста бинарного кристалла на ЭВМ. - Кристаллография, 1977, т.22, с.260
8. Вагнер К. Строение и свойства двойных металлических систем. М., ГИФМЛ, 1959, т.1, с.448

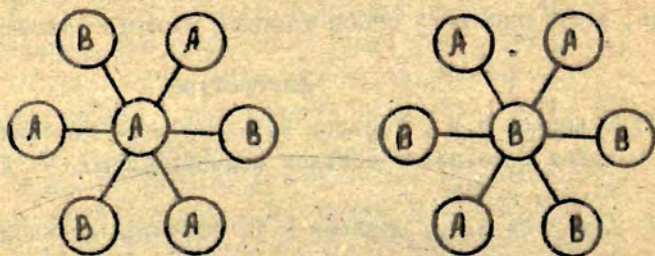


Рис. 1. Возможное расположение атомов примеси в плоскости (111) ГЦК кристалла.

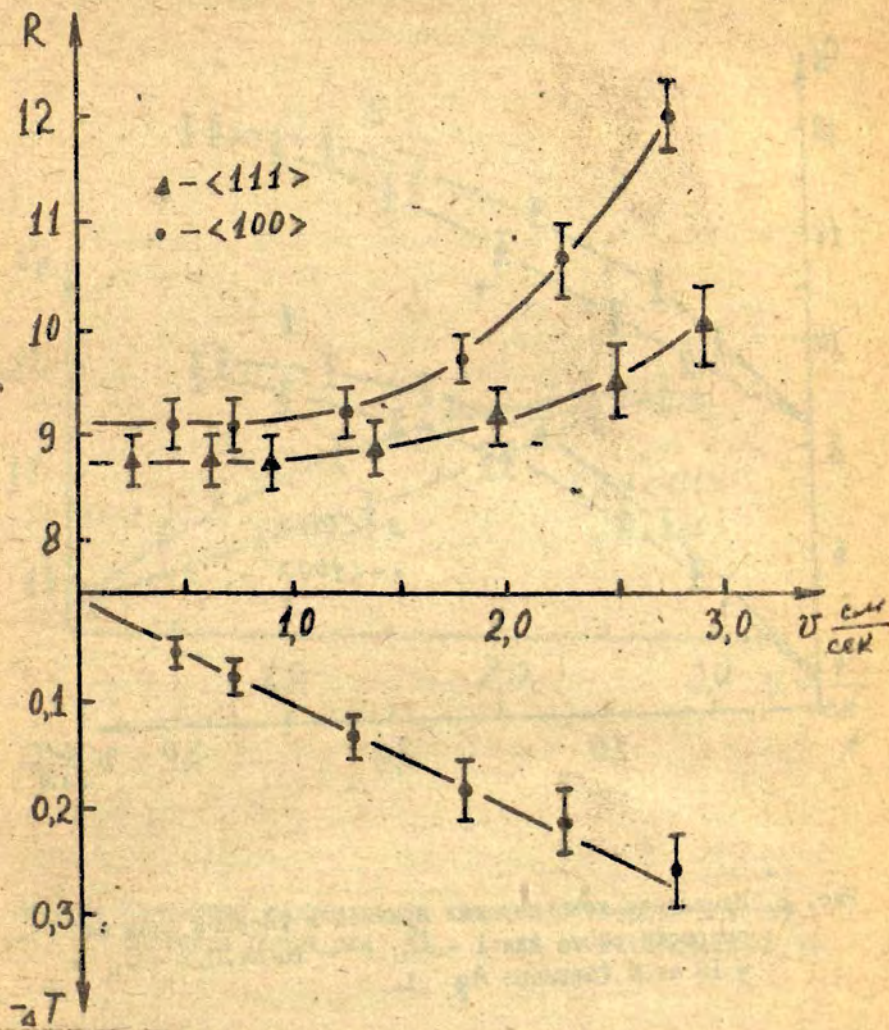


Рис. 2. Зависимость шероховатости и переохлаждения границы раздела фаз от скорости роста.

- \blacktriangle - растущая грань (111),
- \bullet - растущая грань (100).

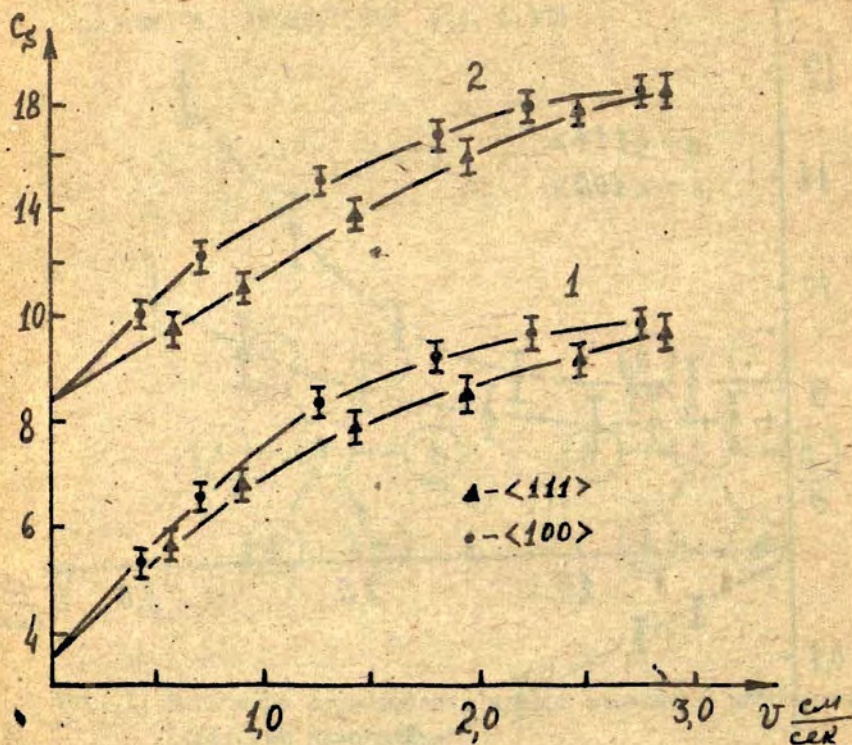


Рис. 3. Изменение концентрации примеси в твердой фазе от скорости роста для 1 - $C_L = 10$ ат.%, 2 - $C_L = 19$ ат.% (примесь Ag).

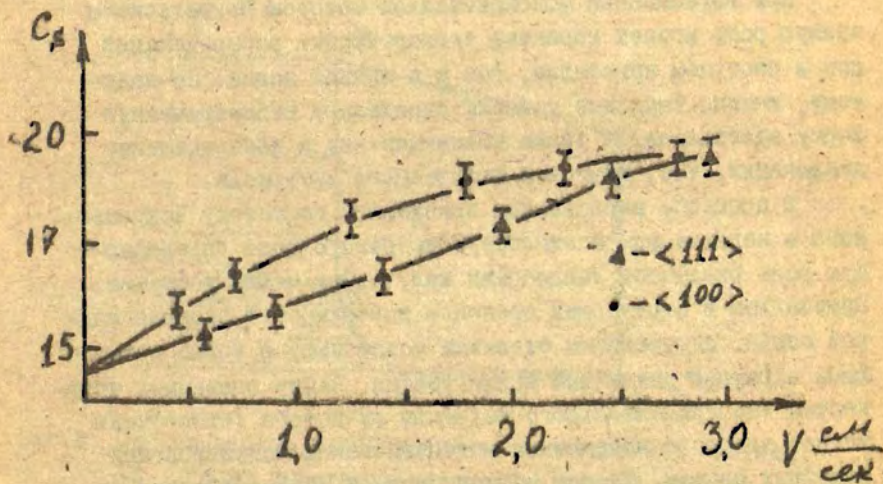


Рис. 4, Изменение концентрации примеси в твердой фазе от скорости роста для $C_L = 19$ ат. % (примесь Al).

РАСЧЕТ ТЕМПЕРАТУРЫ В РАСТУЩЕМ КРИСТАЛЛЕ С УЧЕТОМ РАДИАЦИОННОГО ТЕПЛООБМЕНА С ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДОЙ В УСЛОВИЯХ ПРОЦЕССА ЧОХРАЛЬСКОГО

В.Д. Ломкис, Б.Я. Мартузан (ВЦ ЛГУ им. П. Стучки,
г. Рига)

При выращивании монокристаллов методом Чохральского важную роль играет характер температурных распределений как в растущем кристалле, так и в жидкой ванне. По-видимому, именно тепловые условия определяют геометрическую форму кристаллов, а также возникновение и распределение дислокаций, т.е. качество получаемого материала.

В процессе выращивания кристаллов по методу Чохральского в вакууме или в атмосфере инертного газа определяющую роль оказывает теплообмен излучением между растущим кристаллом и окружающей средой — поверхностью зеркала жидкой ванны, внутренними стенками установки, а также возможными экранами различной конфигурации. Ввиду очевидных трудностей экспериментального изучения лучистого теплообмена встает вопрос о корректном математическом моделировании подобных систем. На наш взгляд, полная математическая модель должна учитывать многократное отражение от поверхностей системы. В имеющихся в литературе работах [1-3], посвященных математическому моделированию метода Чохральского, учитывалось только однократное отражение.

Устранению этого допущения и исследованию его влияния на результаты расчетов и посвящена настоящая работа. Здесь приводится методика расчета квазистационарного распределения температуры в растущем кристалле с учетом многократного лучистого теплообмена и выделения скрытой теплоты фазового перехода. Приводится формула расчета дифференциальных угловых коэффициентов для осесимметричных систем. Проводится сравнение результатов расчета с учетом и без учета многократного отражения.

Поскольку задача теплопроводности в кристалле решалась релаксационным методом Федоренко Р.П. [4,5], предложенным для решения линейных задач, большое внимание здесь уделяется анализу сходимости итерационного процесса для рассматриваемой нелинейной задачи.

I. Постановка задачи.

Геометрия систем, для которых применима методика, предлагаемая в настоящей статье, изображена на рисунке I.

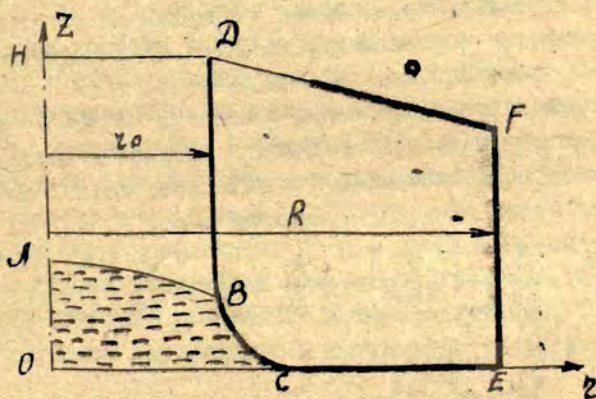


Рис. I. Схематическое изображение рассматриваемой системы. AB — фронт кристаллизации, BC — жидкий столбик, CE — поверхность расплава, DF — экран, BD — боковая поверхность кристалла, EF — внутренняя стенка установки.

Выбранная схематизация установки близка к реальной, поэтому именно в такой постановке представляется разумным проводить модельные расчеты.

Распределение температур на поверхности расплава CE, стенки EF и экрана DF считалось известным, а температура на поверхности кристалла DB и жидкого столбика BC находилась из решения тепловой задачи. Уравнение поверхности жидкого столбика бралось из работы [2]

$$r(z) = r_0 + \left(\sqrt{4a - z_0^2} - \sqrt{4a - z^2} \right) + \sqrt{a} \ln \frac{z_0 (\sqrt{a} + \sqrt{4a - z^2})}{z (\sqrt{a} + \sqrt{4a - z_0^2})}, \quad (1)$$

где

$$a = \frac{\sigma r_0 z_0}{\rho g z_0 + \sigma \sin \beta}.$$

Здесь r и z - текущие координаты, z_0 - высота жидкого столбика, r_0 - радиус кристалла, ρ - плотность расплава, σ - коэффициент поверхностного натяжения на границе кристалл-расплав, β - угол между касательной к поверхности столбика в точке В и осью ОВ (см. рис. I).

Распределение температуры в области ОСВДН описывается уравнением теплопроводности, которое в системе отсчета, связанной с движущимся кристаллом, имеет обычный для случая цилиндрической симметрии вид:

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda(T) r \frac{\partial T}{\partial r} \right), \quad (2)$$

$$\lambda(T) = \begin{cases} \lambda_{тв}, & T < T_{пл} \\ \lambda_{ж}, & T > T_{пл} \end{cases}$$

Здесь c - удельная теплоемкость, $\lambda_{тв}$ и $\lambda_{ж}$ - коэффициенты теплопроводности твердой и жидкой частей, $T_{пл}$ - температура плавления, z' - координата по оси ОН в движущейся системе координат. На границе раздела фаз $z^*(r, t)$ ставится условие Стефана

$$-\gamma\rho \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \left(\lambda_{тв} \text{grad } T \Big|_{T_{пл}-0} - \lambda_{ж} \text{grad } T \Big|_{T_{пл}+0}, \text{grad } \varphi \right), \quad (3)$$

где γ - удельная скрытая теплота плавления,

$\varphi(z', t) = z' - z^*(r, t) = 0$ - уравнение границы раздела фаз. В дальнейшем нас будет интересовать только квазистационарное распределение температур в слитке, движущемся со скоростью

$v = \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \text{const}$, поэтому удобно будет вернуться в неподвижную систему координат.

На поверхности ОС в данной работе ставилось граничное условие I-го рода

$$T = T_{\text{пер}},$$

$T_{\text{пер}}$ - температура перегрева.

На торце кристалла ставилось условие теплообмена по закону Стефана-Больцмана:

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial x} = \tilde{\epsilon}_1 \sigma (T^4 - T_0^4), \quad (4)$$

T_0 - температура окружающей среды, $\tilde{\epsilon}_1$ - степень черноты кристалла, σ - постоянная Стефана-Больцмана.

Внутри полости ВДФЕС рассчитывался теплообмен излучением, используя метод сальдо (см., например, [6]), который позволил учесть многократное переизлучение. Все поверхности, участвующие в радиационном теплообмене, полагались диффузно серыми. Суть использованного здесь метода сальдо состоит в следующем.

Пусть x_k - координата, а A_k - площадь k -ой элементарной площадки внутренней поверхности полости, q_k^e - плотность эффективного выходящего потока излучения. Тогда для каждой площадки справедливо интегральное уравнение

$$q_k^e(x_k) = \tilde{\epsilon}_k \sigma T^4(x_k) + (1 - \tilde{\epsilon}_k) \sum_j \int_{A_j} q_j^e(x_j) dF_{dk-dj}. \quad (5)$$

Угловой коэффициент dF_{dk-dj} между элементарными площадками dk и dj определяется формулой

$$dF_{dk-dj} = \frac{\cos \varphi_k \cos \varphi_j}{\pi S^2} dA_j, \quad (6)$$

где φ_k и φ_j - углы между прямой, соединяющей элементарные площадки, и нормальными к ним, S - расстояние между k -ой и j -ой площадкой, dA_j - площадь элементарной площадки.

Плотность суммарного теплового потока Q_k связана с q_k^e соотношением

$$Q_k = \frac{\tilde{\epsilon}_k}{1 - \tilde{\epsilon}_k} (\sigma T_k^4 - q_k^e). \quad (7)$$

Уравнение (7) и определяет граничное условие на рассматриваемом участке поверхности.

2. Метод решения.

При численном решении задачи Стефана использовался метод введения осредоточенной теплоемкости на границе раздела фаз [7]. Реализация этого метода описана, например, в работах [8,9]. После замены переменных

$$u = \frac{1}{\lambda_{\tau\delta}} \int_0^T \lambda(\tau) d\tau$$

и перехода к неподвижной системе координат $x = x' + vt$ уравнение (2) в квазистационарном приближении принимает вид:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \frac{1}{z} \frac{\partial}{\partial z} z \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{v c \rho}{\lambda_{\tau\delta}} \frac{\partial \varphi}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad (8)$$

где функция $\varphi(u)$ равна

$$\varphi(u) = \begin{cases} u, & u < T_{пл}, \\ \frac{\lambda_{\tau\delta}}{\lambda_{ж}} (u - T_{пл}) + T_{пл} + \frac{\tau}{c\rho}, & \end{cases}$$

Функция $\varphi(u)$ "размазывалась" на малый объем в окрестности $T_{пл}$ и аппроксимировалась кубической параболой.

Поверхность плоскости разбивалась на K осесимметричных колец (разбиение на поверхности кристалла и жидкого отолбика совпадало с узлами разностной сетки для уравнения (8)) и вычислялись угловые коэффициенты F_{kj} между кольцами. Методика расчета угловых коэффициентов для таких систем изложена в разделе 3. Считая q_j^6 постоянным на кольце, условие (5) переписываем в виде

$$q_k^6 = \tilde{\epsilon}_k \sigma T_k^4 + (1 - \epsilon_k) \sum_{j=1}^K q_j^6 F_{kj}, \quad (9)$$

$k = 1, 2, \dots, K.$

Если температура T_k всех площадок известна, из решения системы линейных уравнений (9) определяем q_k^6 , а затем

из формулы (7) находим плотность суммарного теплового потока Q_k . Поскольку $Q_k = -\lambda \frac{\partial T_k}{\partial z}$ на поверхности кристалла, очевидной становится итерационная процедура решения задачи. Считая известным с предыдущей итерации значение Q_k , из решения задачи (8) находим поле температур; далее для нового значения температуры на поверхности кристалла определяем q_k , корректируем Q_k и т.д. В использовавшемся вычислительном алгоритме линеаризировалось, кроме того, граничное условие (7) и на каждом $j+1$ -ом итерационном шаге это условие после разностной аппроксимации принимало вид

$$-\lambda_k \frac{T_{k,N}^{j+1} - T_{k,N-1}^{j+1}}{h_z} = \frac{\tilde{\epsilon}_k}{1 - \tilde{\epsilon}_k} \left[4\sigma (T_{k,N})^{j+1} (T_{k,N}^{j+1} - T_{k,N}^j) + (6T_{k,N}^4 - q_k^6)^j \right], \quad (10)$$

т.е. записывалось (и аппроксимировалось) как нелинейное условие третьего рода. В (10) h_z - шаг разностной сетки по координате z , $k = 1, 2, \dots, M$, M и N - число узлов разностной сетки по высоте и по радиусу.

Шаг разностной сетки по радиусу выбирался постоянным, а по z - кусочно-постоянным, меньшим в жидкой части и в нижней части кристалла (в окрестности фронта кристаллизации) и значительно большим в остальной части кристалла. Разностная схема второго порядка точности записывалась в виде [10]:

$$L u \equiv \frac{1}{h_{z,j} \frac{\partial \varphi}{\partial u}} u_{\bar{z},j} + \frac{1}{2} (u_{\bar{z},j})_{\bar{z}} - \frac{v_{sp}}{\lambda} \frac{\partial \varphi(u)}{\partial u} u_{\bar{z}}, \quad (11)$$

где $h_{z,j} = \frac{h_{z,j} + h_{z,j+1}}{2}$, $h_{z,j}$ - шаг по z , $j = 1, \dots, M$. В (11) использованы общепринятые обозначения разностных производных.

Для решения разностных уравнений, получаемых после аппроксимации (8), использовался релаксационный метод Федоренко [4,5], что обеспечивало высокую скорость сходимости.

ти итерационного процесса. Представляет интерес анализ убывания невязки для такого метода, в частности, из-за сильной нелинейности задачи.

Использовались две сетки - мелкая и грубая, при этом бралось $N_z = 3h_z$, $N_x = \alpha h_x$, α полагалось равным 2 в окрестности фронта, и 3 - в остальной части кристалла. В качестве основного итерационного процесса выбирался метод строчной итерации по Зайделю (II). Вначале делалось несколько итераций для уравнения (II) на грубой сетке и функция $u(z, x)$ интерполировалась на мелкую сетку. Это обеспечивало хорошее начальное приближение для u . Далее делалось

ν итераций на мелкой сетке ($\nu = 6-8$), находилась невязка τ^ν после ν итераций и на грубой сетке решалось уравнение для поправки ϵ^ν

$$L^* \epsilon^\nu = \tau^\nu, \quad (I2)$$

$\epsilon^\nu = u^\nu - u$, u - точное решение уравнения (II).

На грубой сетке делалось 10-20 итераций, что обеспечивало достаточную точность определения ϵ^ν . Далее функция ϵ^ν интерполировалась на мелкую сетку, исправлялась функция u^ν , на мелкой сетке делалось еще ν итераций и т.д.

Из-за отсутствия нелинейного члена в (II) вид оператора L^* в (I2) отличается от L , именно, аргумент функции $\frac{\partial \psi}{\partial u}$ становится равным $u^\nu - \epsilon^\nu$, причем ϵ^ν меняется после каждой итерации на грубой сетке. Тогда правая часть τ^ν в (I2) равна

$$\tau^\nu = \xi^\nu + \frac{v \sigma \rho}{\lambda} \left[\frac{\partial \psi(u^\nu)}{\partial u} - \frac{\partial \psi(u^\nu - \epsilon^\nu)}{\partial u} \right] u_x^\nu, \quad (I3)$$

где $\xi^\nu \equiv L u^\nu$.

Аналогичным образом нелинейные члены влияют на вид граничных условий для функции ϵ . Показем это для граничного условия (7). Точное разностное условие перепишем в виде:

$$-(T_{\kappa, N})_{\bar{z}} = c_0 (\sigma T_{\kappa, N}^4 - q_{\kappa}^6), \quad (14)$$

где $c_0 = \frac{\tilde{\epsilon}_{\kappa}}{\lambda (1 - \tilde{\epsilon}_{\kappa})}$.

После ν итераций с учетом невязки ξ_{Γ}^{ν} в граничном условии, запишем (14) в виде:

$$-(T_{\kappa, N}^{\nu})_{\bar{z}} = c_0 [\sigma (T_{\kappa, N}^{\nu})^4 - q_{\kappa}^6 (T_{\kappa, N}^{\nu})] - \xi_{\Gamma}^{\nu}. \quad (15)$$

Вычитая (14) из (15), получим краевое условие для $\epsilon_{\kappa, N}^{\nu}$:

$$-(\epsilon_{\kappa, N}^{\nu})_{\bar{z}} = \tilde{\epsilon}_{\kappa} c_0 \sigma [2 T_{\kappa, N}^{\nu} - \epsilon_{\kappa, N}^{\nu}] [2 (T_{\kappa, N}^{\nu})^2 - 2 T_{\kappa, N}^{\nu} \epsilon_{\kappa, N}^{\nu} + \epsilon_{\kappa, N}^{\nu 2}] - \xi_{\Gamma}^{\nu} - c_0 [q_{\kappa}^6 (T_{\kappa, N}^{\nu}) - q_{\kappa}^6 (T_{\kappa, N}^{\nu} - \epsilon_{\kappa, N}^{\nu})]. \quad (16)$$

Характер убывания невязки ξ_{ν} в зависимости от числа итераций ν на основной сетке виден из рис. 2, кривая 3. Для изображенного на рисунке случая на мелкой сетке делалось по 8 итераций, после чего решалось уравнение для ϵ^{ν} с точностью 10^{-3} , и т.д. По оси z бралось 16 узлов, по оси x - 45 узлов. Из графика видно, что зависимость ξ от ν является типичной для итерационного процесса Федоренко: после перехода с грубой сетки на мелкую из-за погрешности, вносимой интерполяцией, невязка ξ^{ν} может быть больше значения $\xi^{\nu-1}$. Однако затем ξ^{ν} быстро уменьшается и примерно после 6 итераций на мелкой сетке скорость убывания невязки замедляется. Таким образом на погашение высокочастотных гармоник разложения невязки в ряд Фурье достаточно примерно 6 итераций на основной сетке, после чего скорость сходимости определяется скоростью гашения низкочастотных гармоник. Для сравнения приводится также кривая I, когда задача решалась только методом строчных итераций и из-за невысокой скорости гашения низкочастотных гармоник итерационный процесс сходиллся очень медленно.

Если положить $w = q_{\kappa}^6 (T^{\nu}) - q_{\kappa}^6 (T^{\nu} - \epsilon^{\nu})$ - член в квадратных скобках в условии (16), равным нулю, то при решении задачи для поправки будет не полностью учитываться не-

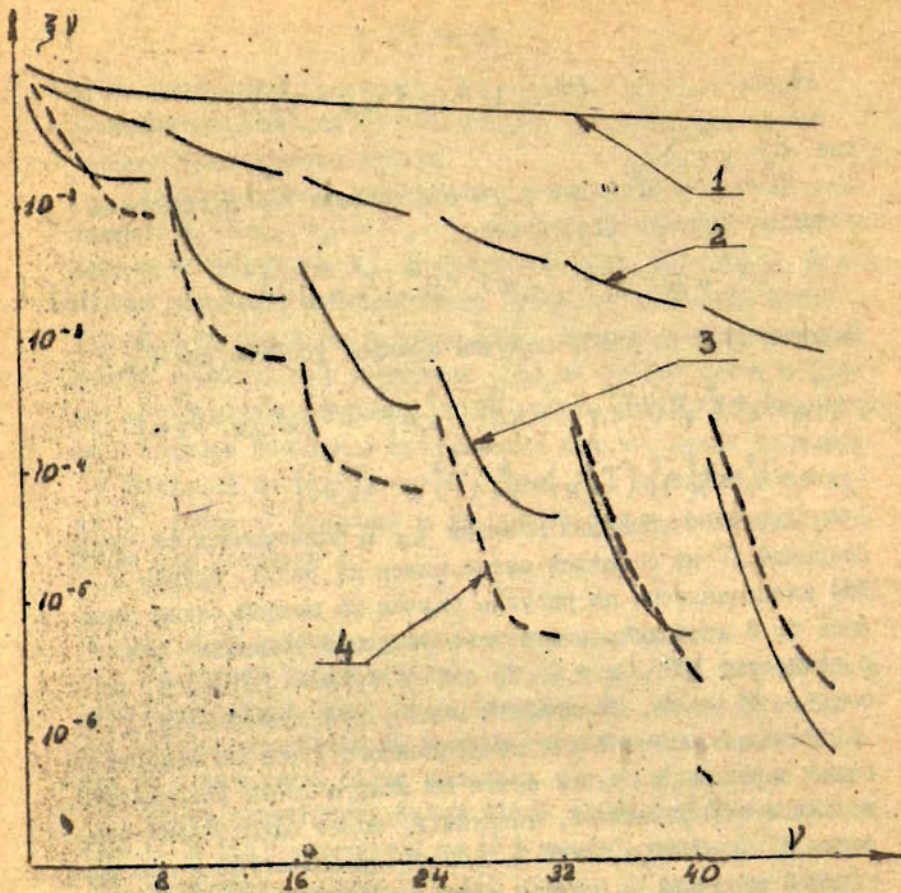


Рис.2. Зависимость максимума невязки от числа итераций на основной стенке (16x45). 1 - метод строчных итераций по Зейделя; 2 - метод Федоренко при неполном учете нелинейности; 3 - метод Федоренко; 4 - метод Федоренко для сетки 10x23.

нейный характер граничных условий. Оказалось, что корректный учет нелинейных членов в уравнениях для ϵ^y может сильно ускорить сходимость итерационного процесса, что видно из сравнения кривых 2 и 3. Хотя в случае 2 скорость сходимости существенно больше, чем в случае I, из-за неправильного расчета ϵ^y у функции ξ^y , видимо, появляются дополнительные погрешности, в частности, и низкочастотные, что уменьшает скорость сходимости по сравнению со случаем 3.

На кривой 4 приведена зависимость $\xi^y(v)$ для сетки с вдвое меньшим числом узлов по осям τ и κ . Как и следовало ожидать для метода Федоренко, скорость сходимости в обоих случаях (3 и 4) близка. Отметим лишь, что при $\xi^y \leq 10^{-5}$ для погашения высокочастотных гармоник требуется уже больше чем 8 итераций, из-за грубости сетки, на которой решается уравнение для ϵ^y .

Для достижения хорошей точности при решении реальных задач достаточным оказывается ~ 18 итераций на основной сетке и 20-40 на вспомогательной, что в сумме эквивалентно $\sim 25-30$ итерациям (по методу строчной итерации Зайделя) на основной сетке.

3. Расчет угловых коэффициентов.

Как отмечалось выше, для расчета теплообмена излучением необходимо знание угловых коэффициентов. Выведем выражения для угловых коэффициентов диффузного теплообмена между двумя круговыми полосами. Полосы предполагаются бесконечно малой ширины, коаксиальными, вырезанными из конических поверхностей, произвольно наклоненных по отношению к оси. В этом случае угловой коэффициент выражается следующим образом

$$F_{d_k-d_j} = r_j \sqrt{d\tau_j^2 + d\kappa_j^2} F_{d_k-d_j}^* \quad F_{d_k-d_j}^* = \frac{2}{\pi} \int_0^{\omega_1} \frac{\cos \varphi_k \cos \varphi_j}{S^2} d\omega,$$

где φ_k , φ_j и S имеют тот же смысл, что и в формуле (6). Предел интегрирования ω , зависит от того, в какой степени обе плоскости затенены внешними по отношению к ним телами.

Интегрирование проводится по текущему углу.

Пусть r_k и r_j - радиусы первой и второй полосы, а θ_k и θ_j - углы между радиусом и нормалью в данной точке к полосе, $x = x_j - x_k$, где x_j и x_k - высоты полос по отношению к точке отсчета. Тогда интеграл $F_{d_k-d_j}^*$ выразится следующим образом:

$$F_{d_k-d_j}^* = \frac{2}{\pi} \int_0^{\omega_1} \frac{(A+B \cos \omega)(C+D \cos \omega)}{(E+F \cos \omega)^2} d\omega, \quad (17)$$

где $A = x \sin \theta_k - r_k \cos \theta_k$, $B = r_j \cos \theta_k$,
 $C = -r_j \cos \theta_j - x \sin \theta_j$, $D = r_k \cos \theta_j$, $E = x^2 + r_j^2 + r_k^2$, $F = -2r_j r_k$.

Теперь могут быть найдены значения интеграла (17):

$$F_{d_k-d_j}^* = \frac{2}{\pi} \left\{ \frac{BD}{F^2} \omega_1 + \frac{1}{F^2(E^2-F^2)} \left[\frac{F(CF-DE)(BE-AF) \sin \omega_1}{E+F \cos \omega_1} + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{2(ACEF^2 - BDE^2 - BCF^2 - ADF^2 + 2BDEF^2)}{\sqrt{E^2-F^2}} \arctg \left(\sqrt{\frac{E-F}{E+F}} \operatorname{tg} \frac{\omega_1}{2} \right) \right] \right\}. \quad (18)$$

Для нахождения окончательного значения углового коэффициента в (18) надо поставить значение предела интегрирования ω_1 .

В рассматриваемом случае полости, образующей в сечении выпуклую фигуру, и кристалла цилиндрической формы, ω_1 имеет вид:

$$\omega_1 = \arcs \cos \frac{r_0}{r_j} + \arcs \cos \frac{r_0}{r_k}. \quad (19)$$

Поскольку угловой коэффициент $F_{d_k-d_j}$ имеет физический смысл излучения, попадающего с полосы d_k на полосу d_j , только рассмотрение угловых коэффициентов может дать представление о характере лучистого теплообмена кристалла с окружающими поверхностями. Рассмотрим ряд результатов расчетов угловых коэффициентов для модельной установки, описанной в разделе 4.

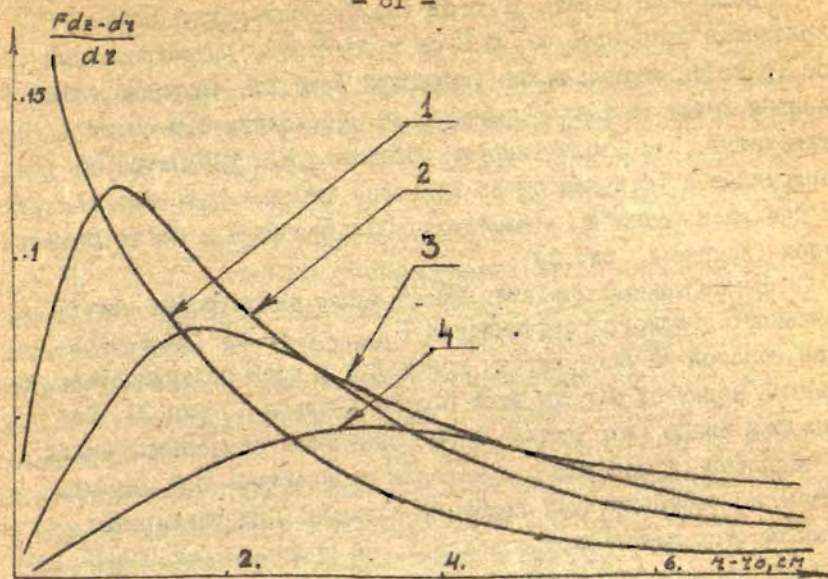


Рис.3. Приведенный угловой коэффициент $\frac{1}{dz} F dz - dz$ между полосами d_* на поверхности кристалла и d_* на расплаве в зависимости от расстояния полосы d_* до расплава. Высота полосы d_* над поверхностью расплава равна: 1 - 0.175 см; 2 - 0.8 см; 3 - 1.6 см; 4 - 3.2 см.

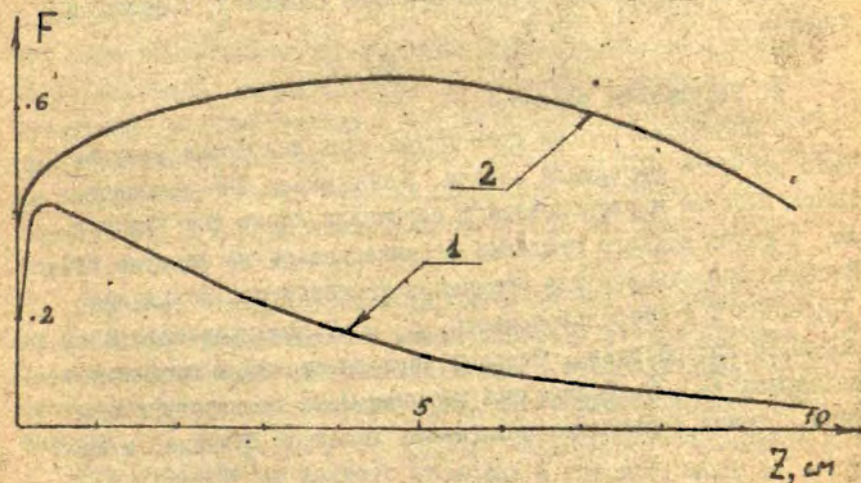


Рис.4. Угловой коэффициент между полосой d_* на поверхности кристалла и расплавом (кривая 1) или стенкой (кривая 2) в зависимости от высоты полосы.

Если рассмотреть угловой коэффициент между полосой кристалла на высоте $z_j = 0.8$ см и полосами, принадлежащими поверхности жидкой ванны (кривая 2, рис.2), то видно, что кривая имеет максимум примерно на расстоянии 0,9 см от кристалла. При увеличении z_j этот максимум удаляется от кристалла и уменьшается по величине (кривые 3,4, рис.2), а при уменьшении z_j - наоборот, приближается и увеличивается (кривая 1, рис.2).

Немонотонный характер имеет также зависимость интегрального углового коэффициента $F_{dz-сг}$ между фиксированной полосой на поверхности кристалла и всей поверхностью жидкой ванны от высоты этой полосы (кривая 1, рис.3). Из рисунка видно, что жидкая ванна оказывает наибольший вклад в тепловой баланс полос кристалла на высоте ~ 0.8 см, что примерно соответствует половине радиуса. При увеличении высоты этот вклад быстро убывает. На кривой 2 рис.3 изображен аналогичный угловой коэффициент F_{dz-ef} между фиксированной полосой на поверхности кристалла и всей поверхностью стенки. Эта кривая не имеет столь ярко выраженного максимума и значения F_{dz-ef} почти постоянны по всей высоте кристалла, за исключением областей, близких к торцам.

4. Результаты расчетов.

В настоящей работе приводятся лишь некоторые результаты расчетов модельной задачи. Здесь экран DF предполагался плоским и расположенным перпендикулярно оси кристалла, а форма жидкого столбика рассчитывалась по формуле (I). Расчеты проводились для кремния с температурой плавления $T_{пл} = 1683^\circ\text{K}$ и степенью черноты $\tilde{\epsilon}_1 = 0.7$ для кристалла и $\tilde{\epsilon}_2 = 0.18$ для расплава. Степени черноты стенки и графитового экрана $\tilde{\epsilon}_3, \tilde{\epsilon}_4$ полагались равными 0.8. Температура экрана, стенки и расплава полагалась линейной функцией и за-

давалась в точках С, Е, F, D. Здесь считалось, что на поверхности расплава $T_c = 1700^\circ\text{K}$, $T_e = 1720^\circ\text{K}$, на стенке и экране - $T_s = 1473^\circ\text{K}$, $T_f = T_D = 1273^\circ\text{K} + 1373^\circ\text{K}$. Ниже приводятся результаты расчетов для $\tau_0 = 1.75$ см, $R = 9$ см, скорости вытягивания $v = 2$ мм/мин, высоты установки $H = 2.5$ см.

На рис.5 приведено распределение температуры на поверхности кристалла. Штриховой линией изображено то же распределение, рассчитанное с учетом только однократного отражения. Видно, что различие оказывается заметным. Вариант 2 считался при отсутствии стенки и экранов, что моделировалось путем задания $\tilde{\epsilon}_3 = \tilde{\epsilon}_4 = 1$ и температуры экрана и стенки равной 300°K . Как видно из рисунка, наличие стенок и экрана сильно меняет температуру в кристалле, а ход температурной кривой становится более плавным.

Различие между результатами расчетов с учетом и без учета многократного отражения становится существенным при определении более точных характеристик, например, теплового потока с поверхности кристалла и вторых производных $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$ температуры. Производная $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$ может в известной мере характеризовать величину термоупругих напряжений [12]. Как видно из рис.6, $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$ на оси имеет максимум на расстоянии приблизительно 1 см. Производная на поверхности кристалла монотонно убывает почти всюду, кроме верхней части (здесь сказывается влияние радиационного теплообмена с экраном DF), и в горячей области больше величины производной на оси.

Отметим, что монотонный характер второй производной на поверхности кристалла и немонотонность второй производной на оси кристалла вблизи жидкого столбика имеет место при учете как однократного, так и многократного отражения.

При переходе от жидкого столбика к твердой части величина теплового потока, выходящего с внешней поверхности

ДС, изменяется скачком. Это объясняется скачкообразным изменением степени черноты $\tilde{\epsilon}_w$ (см. формулу (7)).

В заключение авторы выражают благодарность В.А. Смирнову, добезно предоставившему экспериментальные данные о распределении температуры в установках выращивания кристаллов по методу Чохральского.

Литература

1. Arizumi T., Kobayashi N. Theoretical Studies of the Temperature Distribution in a Crystal being grown by the Czochralski Method. - *J. of Crystal Growth*, 1972, т.13/14, с.615-618.
2. Шелкин Ю.Ф., Смирнов В.А., Старшинова И.В., Холодовская А.А. Расчет температурного поля расплава и кристалла при нелинейных граничных условиях. - В кн.: Науч. тр. ГИРЕДМЕТА, т.55, 1974, М., Металлургия, с.29-42.
3. Мильвидский М.Г., Смирнов В.А., Старшинова И.В., Шелкин Ю.Ф. К анализу тепловых условий выращивания монокристаллов методом Чохральского. - Известия АН СССР, Сер.Физ., 1976, т.40, № 7, с.1444-1451.
4. Федоренко Р.П. Релаксационный метод решения разностных эллиптических уравнений. - *ЖВМ и МФ*, 1961, т.1, в.5, с.922-927.
5. Федоренко Р.П. Итерационные методы решения разностных эллиптических уравнений. - *УМН*, 1973, т.28, в.2, с.121-182.
6. Зигель Р., Хауэлл Дж. Теплообмен излучения. М., 'Мир', 1975, 934 с.
7. Олейник О.А. Об одном методе решения общей задачи Стефана. - *ДАН*, 1960, т.135, в.5, с.5-8.
8. Будаг Б.Н., Соловьева Е.Н., Успенский А.Б. Разностный метод со сглаживающими коэффициентами для решения задач Стефана. - *ЖВМ и МФ*, 1965, т.5, в.5, с.828-840.

9. Недзвецкий Ю.Э., Ратников Д., Авдонин Н.А., Мартузан Б.Я. Расчет температурного поля при бестигельной зонной плавке кремния. - ИФЗ, 1967, т.13, № 2, с.225-231.
10. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. М., Наука, 1971. 552 с.
11. Вазов В., Форсайт Дж. Разностные методы решения дифференциальных уравнений в частных производных. М., ИЛ, 1963. 381 с.
12. Инденбом В.Л., Житомирский И.С., Чебанова Т.С. Внутренние напряжения, возникающие при выращивании кристаллов в стационарном режиме. - Кристаллография, 1973, т.18, в.1, с.39-48. ●

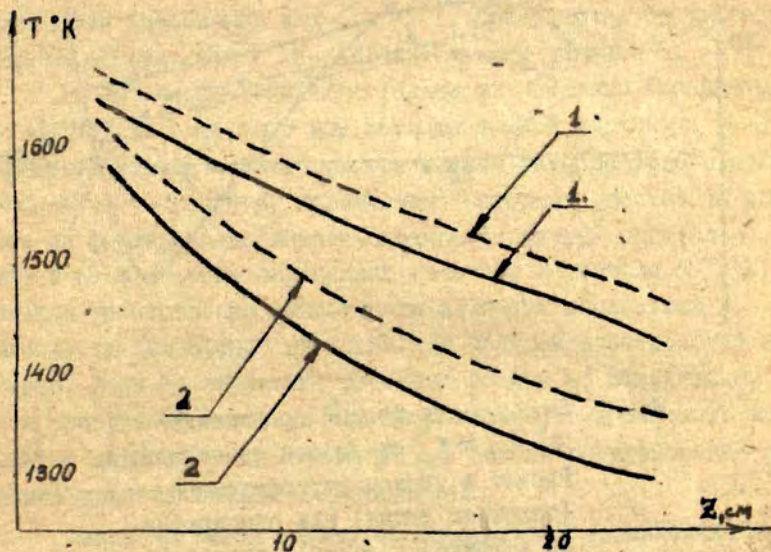


Рис.5. Температурные распределения на поверхности кристалла для системы с экраном и стенками (вариант 1) и открытой системы (вариант 2). Сплошные линии - расчет с учетом многократного отражения, штриховые - учтено только однократное отражение.

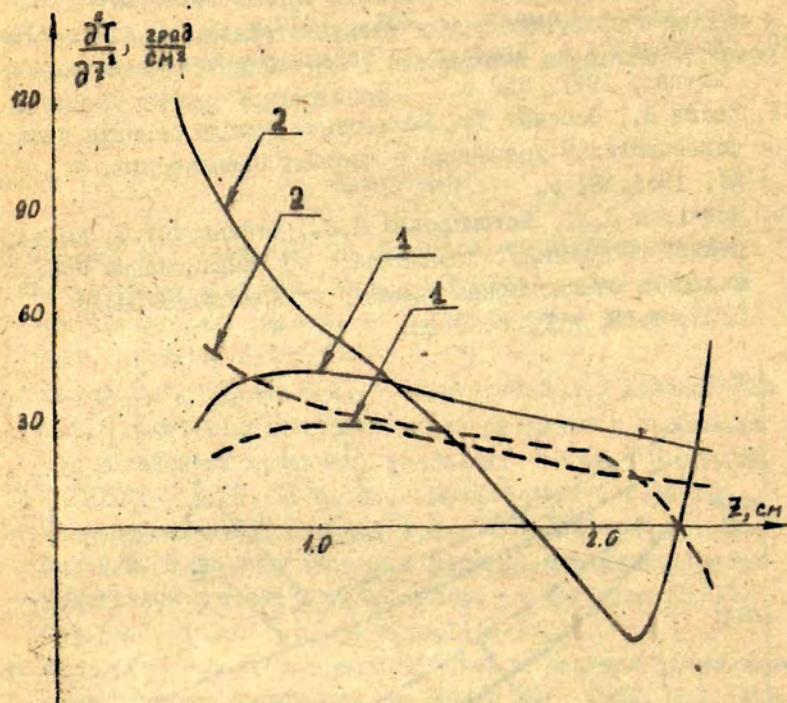


Рис. 6. Зависимость второй производной $\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$ от высоты кристалла. Расчет с учетом многократного (сплошная линия) или однократного (штриховая линия) отражения. 1 - $\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$ на оси, 2 - $\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$ на поверхности кристалла.

РАСЧЕТ ТЕРМИЧЕСКИХ НАПРЯЖЕНИЙ И ПЛОТНОСТИ
ДИСЛОКАЦИЙ В КРИСТАЛЛАХ, ВЫРАЩИВАЕМЫХ ИЗ
РАСПЛАВА

С.С.Вахрамеев, С.С.Ширин
(ВЦ ЛГУ им.П.Стучки, Рига; Гиредмет, Москва)

С целью оценки величины плотности дислокаций в кристаллах дается постановка задачи и метод расчета термических напряжений, которые возникают при кристаллизации из расплава. По рассчитанным разностным способом напряжениям рассчитывается плотность дислокаций, основанная на учете релаксации напряжений. Приводятся результаты расчетов плотности дислокаций для $GaAs$. Приведенные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными*.

I. При выращивании кристаллов из расплава (например, по методу Чохральского или методом зонной плавки) в результате неравномерного распределения температурного поля возникают термические напряжения, которые существенно влияют на формирование дислокационной структуры кристалла, что в свою очередь определяет качество материала [1, 2]. Задача установления зависимости величины напряжений и плотности дислокаций представляет большой практический интерес. Если одновременно решается задача об определении температурного поля, то это дает возможность изменять характер напряженного состояния при помощи регулирования условий кристаллизации и охлаждения.

Итак, мы имеем задачу об определении термических напряжений и плотности дислокаций в растущем кристалле, за-

* Результаты работы докладывались на IV Всесоюзной школе по механике деформируемого твердого тела, г.Куйбышев, 1977 г.

дачу, которая является упруго-пластической, поскольку образование и движение дислокаций связано с процессом пластической деформации. Для получения замкнутой системы уравнений и определения пластической деформации исходные соотношения задачи термоупругости следует дополнить определенной функциональной зависимостью, которая характеризует условия текучести. Установление свойств реологии данного материала с учетом конкретного характера температурного поля является задачей достаточно сложной и представляет самостоятельный интерес.

Известно, что в тугоплавких малопластических кристаллах, например, в кристаллах полупроводниковых материалов (Si, Ga, As, Ge), наблюдается очень узкая, по сравнению с поперечным размером, пластическая зона вблизи фронта кристаллизации, а кристаллы, как правило, обладают низкой плотностью дислокаций ($10^2 - 10^3 \text{ см}^{-2}$).

Первое допущение заключается в том, что пренебрегая пластичностью мы решаем отдельно упругую задачу для нахождения текущих напряжений, а затем по найденным напряжениям рассчитываем плотность дислокаций, если известно критическое сдвиговое напряжение образования дислокаций для данного кристалла. Таким образом расчет термоупругих напряжений служит основой для определения безопасного режима охлаждения, для анализа условий образования дислокаций, для оценки плотности дислокаций.

Второе допущение, которое является вполне естественным, заключается в том, что в нашем случае кристаллизации из расплава мы можем ограничиться случаем несвязанной квазистатической задачи термоупругости и исходная задача распадается на две самостоятельные: задачу теплопроводности и задачу термоупругости. В дальнейшем будем предполагать, что решение задачи теплопроводности известно и является разностным решением задачи Стефана.

И последнее, третье допущение, это то, что мы будем рассматривать кристалл как изотропное тело. Для монокрис-

таллов кубической симметрии с осью z (в цилиндрической системе координат с осевой симметрией) ориентированной в кристаллографическом направлении $[III]$, осредненные по угловой переменной среднеквадратические касательные напряжения τ_1, τ_2, τ_3 для девяти систем скольжения рассчитываются по формулам:

$$\tau_1 = \frac{1}{3\sqrt{2}} \sqrt{(\sigma_z - \sigma_\varphi)^2 + \frac{4}{3} (\sigma_z - \sigma_\varphi)(\sigma_z - \sigma_r) + \frac{13}{3} \sigma_{rz}^2},$$

$$\tau_2 = \frac{1}{3} \sqrt{(\sigma_z - \sigma_\varphi)^2 + \frac{1}{2} \sigma_{rz}^2}, \quad (I)$$

$$\tau_3 = \sqrt{\frac{2}{3} \tau_1^2 + \frac{1}{3} \tau_2^2},$$

где $\sigma_z, \sigma_\varphi, \sigma_r, \sigma_{rz}$ - компоненты тензора упругих напряжений. Привлечение формул (I) для осредненных напряжений позволяет рассматривать кристаллы приближенно как изотропное тело. В следующем пункте рассмотрим разностную схему расчета напряжений.

2. Рассматривается кристалл цилиндрической формы (область D , рис. I.), который выращивается из расплава (область D_1), $z^* = f(r)$ - граница раздела фаз (фронт кристаллизации). Уравнения равновесия в смещениях (3) для твердой части запишем в следующем виде:

$$(A_1 + A_2) \vec{V} = \vec{F}, \quad (2)$$

где операторы-матрицы

$$A_1 = G \begin{pmatrix} a \frac{\partial}{\partial r} & \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r & b \frac{\partial^2}{\partial r \partial z} \\ 0 & a \frac{\partial^2}{\partial z^2} \end{pmatrix}, \quad A_2 = G \begin{pmatrix} \frac{\partial^2}{\partial z^2} & 0 \\ b \frac{\partial}{\partial z} & \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} \end{pmatrix},$$

$\vec{V}(u, w), \vec{F} = G \alpha \left(\frac{\partial T}{\partial z}, \frac{\partial T}{\partial x} \right)$ — векторы упругих смещений и объемных сил,

G — модуль сдвига,

T — температура.

$$a = 2 \frac{1-\mu}{1-2\mu}, \quad b = \frac{1}{1-2\mu}, \quad d = 2 \frac{1+\mu}{1-2\mu} \alpha.$$

μ, α — коэффициенты Пуассона и термического расширения.

Граничные условия ставятся в предположении, что поверхность слитка, включая криволинейную границу раздела фаз z^* , свободна от внешних сил

$$\ell \vec{V} = \begin{cases} \sigma_z n_z + \sigma_{zx} n_x = 0, \\ \sigma_{zx} n_z + \sigma_x n_x \end{cases} = 0, \quad (3)$$

n_z, n_x — направляющие косинусы внешней нормали к граничной поверхности.

$\sigma_z, \sigma_{zx}, \sigma_x$ — напряжения, которые связаны со смещениями законом Гука, [1].

Численное решение второй краевой задачи (2), (3) разностным методом затруднительно из-за реализации граничных условий (3) на фронте кристаллизации z^* , поэтому задача решается методом фиктивной области [4]. Исходная криволинейная область D дополняется областью D_1 до прямоугольной области D_0 . Модуль сдвига G продолжается в фиктивную область D_1 следующим образом:

$$G_\varepsilon = \varepsilon G, \quad (4)$$

где ε малый параметр, $0 < \varepsilon < 1$.

В области $D_0 = [0 < z < R, 0 < x < \ell]$ ищется решение \vec{V}_ε следующей задачи:

$$\begin{aligned} (A_1 + A_2) \vec{V}_\varepsilon &= \vec{F}, \quad M \in D, \\ \varepsilon (A_1 + A_2) \vec{V}_\varepsilon &= \varepsilon \vec{F}, \quad M \in D_1, \end{aligned} \quad (5)$$

на границе раздела фаз выполняются следующие условия согласования:

$$[\vec{V}_\varepsilon]_{z^*} = 0, \quad [\ell \vec{V}_\varepsilon]_{z^*} = 0, \quad (6)$$

на границе области D_0 выполняются условия

$$\begin{aligned} \sigma_z = \sigma_{z_x} = 0, \quad \text{при } z = R, \\ \sigma_{z_x} = \sigma_z = 0, \quad \text{при } x = 0, \ell. \end{aligned} \quad (7)$$

Построение разностной схемы и ее обоснование имеется в работе [5]. Мы здесь только заметим, что для задачи (5)-(7) строится консервативная однородная разностная схема. Итерационный процесс строится на основе метода установления, и разностная схема аналогична схеме переменных направлений.

Схема имеет вид:

$$\frac{\vec{V}^{k+1/2} - \vec{V}^k}{\tau/2} = A_2^h \vec{V}^{k+1/2} + A_1^h \vec{V}^k - \vec{F},$$

$$\frac{\vec{V}^{k+1} - \vec{V}^{k+1/2}}{\tau/2} = A_2^h \vec{V}^{k+1/2} + A_1^h \vec{V}^{k+1/2} - \vec{F}, \quad (8)$$

при начальном условии $\vec{V}^0 = 0$.

A_1^h, A_2^h - разностные положительно определенные операторы. Структура их такова, что счет можно вести при помощи последовательных трехточечных прогонок для определения компонент вектора \vec{V}^k .

Схема имеет второй порядок аппроксимации и устойчива.

3. Рассмотрим методику определения плотности дислокаций и результаты расчетов.

Методика расчетов распределения плотности дислокаций в кристаллах полупроводников в процессе выращивания из расплава основана на учете релаксации сдвиговых термических напряжений в результате пластической деформации ϵ , [6].

Не рассматривая в отдельности поведение каждой дислокации, выразим скорость пластической деформации $\dot{\epsilon}$ через среднюю скорость V движения дислокаций в поле напряжений и плотность дислокаций N_D соотношением Орована:

$$\dot{\epsilon} = \epsilon N_D V, \quad (9)$$

где ϵ - величина смещения от дислокации (вектор Бергерса), величина этого смещения постоянна для данного материала.

Скорость \dot{V} определяется следующим образом:

$$V = V_0 \tau_{эф}^n \exp\left(-\frac{u}{kT}\right), \quad (10)$$

V_0 , n - константы, $\exp\left(-\frac{u}{kT}\right)$ - распределение Больцмана, $\tau_{эф}$ - эффективное напряжение, действующее на дислокации в кристалле.

$$\tau_{эф} = \tau - A\sqrt{N_D}, \quad (11)$$

где τ - соответствует релаксированным термическим напряжениям и выражается в виде

$$\tau = \tau_1 - G\epsilon. \quad (12)$$

τ_1 - исходное касательное напряжение, рассчитанное по первой из формул (1). Плотность дислокаций связана с пластической деформацией следующим образом:

$$N_D = C\epsilon^m, \quad (13)$$

C , m - константы.

Таким образом, вместо уравнения (9), учитывая условия (10)-(13), получим следующее обыкновенное нелинейное дифференциальное уравнение относительно ϵ :

$$\dot{\epsilon} = b V_0 C \epsilon^m \left[\tau_1 - G\epsilon - A C^{1/2} \epsilon^{m/2} \right] \exp\left(\frac{u}{kT}\right) \quad (14)$$

с заданным начальным условием ϵ^0 . Если известно критическое сдвиговое напряжение $\tau_{кр}$ для данного материала и $\tau_{кр} \leq \tau_1$, то, решая уравнение (14), найдем N_D из уравнения (13).

Приведем величины физических констант, которые использовались при расчете N_D для кристаллов GaAs:

$b = 4 \cdot 10^7$ мм, $V_0 = 10^5$ мм/сек, $C = 2,5 \cdot 10^6$ мм⁻², $A = 4 \cdot 10^{-4}$ кг мм⁻², $u = 1,1$ эв, $k = 0,86 \cdot 10^{-4}$ эв град⁻¹, $n = 1,5$, $m = 0,75$, $G = 3400$ кг мм⁻², $\alpha = 0,64 \cdot 10^{-5}$ град⁻¹, $\mu = 1/3$.

$\tau_{кр}$ для GaAs принималось равным 10-15 г/мм².

Программа для расчета термических напряжений и плотности дислокаций составлена на языке FORTRAN для ЭВМ

GE-415. Для прямоугольной области на сетке с количеством точек 1000-1500 требовалось 300-400 итераций.

Рассмотрим два примера расчета, которые представлены на рис.2 и 3. На рис.2 даны величины сдвиговых напряжений τ , для кристаллов GaAs. Прерывистая линия на графике соответствует случаю выращивания кристалла при открытом расплаве, сплошная линия соответствует выращиванию кристалла из расплава с системой экранов. Как и следовало ожидать, напряжения τ , больше для первого случая. Температура в этом месте близка к температуре плавления GaAs. На рис.3 соответственно показано распределение плотности дислокаций в этих кристаллах. В первом случае плотность дислокаций существенно больше, чем во втором.

В заключение отметим, что по изложенной методике была рассчитана плотность дислокаций для серии вариантов. При этом характер радиального распределения плотности дислокаций, ее абсолютная величина хорошо согласуется с экспериментальными данными.

Литература

1. Хонникомб Р. Пластическая деформация металлов. М., Мир, 1972.
2. Инденбом В.Д. К теории образования напряжений и дислокаций при росте кристаллов.- Кристаллография, 1964, т.9, с.74-83.
3. Боли В., Уэйнер Дж. Теория температурных напряжений. М., Мир, 1964.
4. Бутров А.Н., Коновалов А.Н., Шербак В.А. Метод фиктивных областей в плоских статических задачах теории упругости.- Числ.методы мех.спл.среды, 1974, т.5, № 1, с.20-29.
5. Вахрамеев С.С. Расчет термических напряжений, связанных с процессом выращивания монокристаллов из расплава.- Числ.методы мех.спл.среды, 1977, т.8, № 5, с.23-35.

6. Вахрамеев С.С., Освенский В.Б., Шифрин С.С. Расчет распределения плотности дислокаций на основе полей термических напряжений в реальных монокристаллах полупроводников, выращиваемых из расплава.-В кн.: Выращивание кристаллов и их структура, П, Тбилиси, 1977, с.230-231.

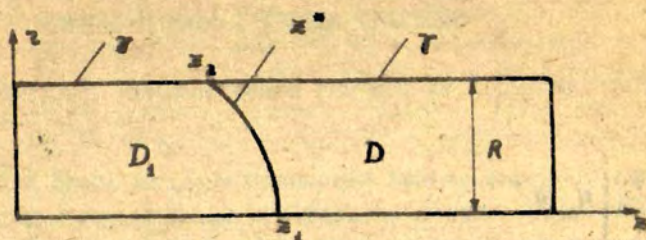


Рис.1. Схема кристаллизации из расплава.

D, D_1 - области твердой и жидкой фаз,
 $z^n = f(r)$ - фронт кристаллизации.

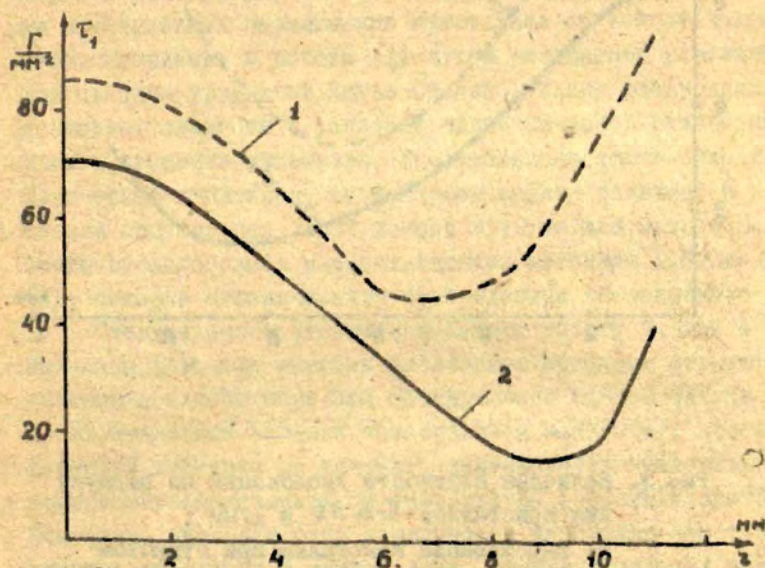


Рис.2. Величины сдвиговых напряжений по радиусу для кристаллов GaAs в $\frac{g}{mm^2}$ при температуре, близкой к температуре плавления у фронта кристаллизации.

1 - выращивание кристалла при открытом расплаве.
 2 - выращивание с системой экранов.

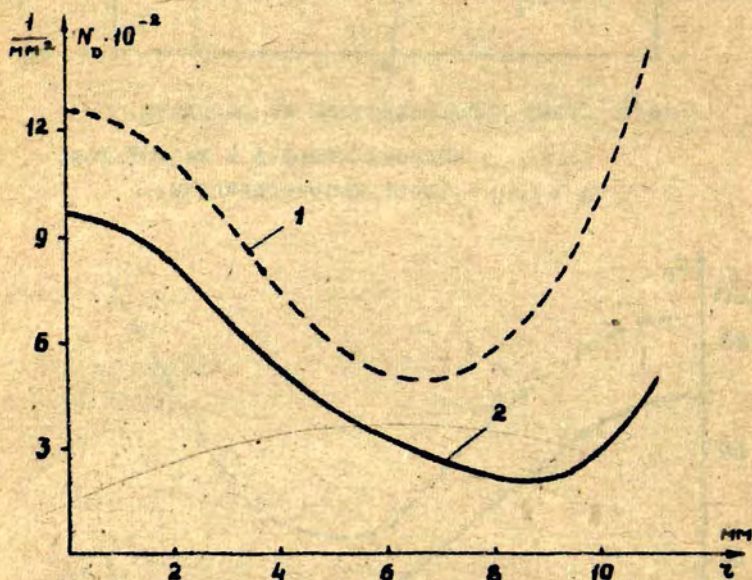


Рис. 3. Величина плотности дислокаций по радиусу для кристаллов GaAs в $1/\text{мм}^2$.

1- выращивание кристалла при открытом расплаве.

2- выращивание с системой экранов.

РАСЧЕТ ТЕЧЕНИЯ В ЖИДКОЙ ЗОНЕ ПРИ БЕСТИГЕЛЬНОЙ ЗОННОЙ ПЛАВКЕ С УЧЕТОМ ВРАЩЕНИЯ

Б.Я.Мартузан, Э.Н.Мартузана (ВЦ ЛГУ им.П.Стучки, г.Рига)

Для более полного понимания процессов, протекающих в установках выращивания кристаллов, большое значение имеет знание особенностей потоков в расплаве. Кроме экспериментальных методов исследования этих потоков, весьма перспективными являются также численные методы, получившие широкое развитие в последнее время. Так японские ученые Т.Аридзуми и Н.Кобаяши усиленно изучают гидродинамические потоки в установках выращивания кристаллов по методу Чохральского. Например, в работе [1] путем численного решения полной системы уравнений Навье-Стокса найдены распределения компонент скорости в условиях цилиндрической симметрии с учетом вращения кристалла. Исследовалось также влияние естественной конвекции, но тепловая задача решалась в упрощенной постановке. Ранее потоки в тигле для метода Чохральского исследовались математическими методами Ю.П.Конаковым [2], который ограничивался приближением пограничного слоя.

Следует особо отметить недавнюю работу Ч.Чэня и В. Вилкокса [3], где впервые численными методами изучаются течения в жидкой зоне при бестигельной зонной плавке. Кроме исследования влияния естественной конвекции, здесь обращается внимание на течения, вызванные зависимостью поверхностного натяжения от температуры (эффект Марангони). Показано, что учет этой зависимости оказывает заметное влияние на потоки в жидкой зоне. Вращение твердых частей не учитывалось.

Настоящая работа посвящена численному исследованию потоков в жидкой зоне в процессе бестигельной зонной плавки с учетом вращения твердых частей слитка. Учитывается также естественная конвекция при нагреве слитка токами высокой частоты.

В качестве модели жидкой зоны выбиралась цилиндрическая область заданной высоты H и радиуса R , аналогично

работе [3] или модели Д.Г.Ратникова [4], т.е. делались предположения, что внешняя конфигурация жидкой зоны не отличается от цилиндрической, а изотермические поверхности фазового перехода являются плоскими. Очевидно, что такая схематизация рассматриваемой области является весьма приближенной и может способствовать только качественному изучению влияния отдельных физических явлений на движение жидкости.

Рассматривался также случай, когда вращающаяся верхняя твердая часть слитка имеет радиус b , меньший, чем радиус R жидкой зоны, а на остальной части верхней плоскости имеется свободная поверхность жидкости. Это делается с целью приближенного описания случая зонной плавки с радиусом верхнего цилиндра, меньшим радиуса нижнего цилиндра. Кроме того, такое описание области применяется для случаев зонной плавки слитков большого радиуса, когда верхняя часть слитка оплавляється, и оплавившийся материал стекает вниз в жидкую зону, которая в этом случае имеет конфигурацию, близкую к конфигурации жидкой капли, размещенной между цилиндрами разных радиусов.

Исследования проводились как для стационарного, так и для нестационарного процесса.

Гидродинамика этих процессов описывается системой уравнений Навье-Стокса для вязкой несжимаемой жидкости в цилиндрической системе координат с учетом осевой симметрии для безразмерных радиальной, осевой и вращательной компонент скорости u_r , u_z и u_φ [5]. Для перехода к безразмерным величинам пространственные координаты отнесены к радиусу слитка R , компоненты скорости - к $R\omega_0$, где ω_0 - частота вращения верхней грани слитка, а давление отнесено к величине $\rho R^2 \omega_0^2$, где ρ - плотность жидкости.

Таким образом, система уравнений примет следующий вид:

$$\frac{1}{\omega_0} \frac{\partial u_r}{\partial t} + u_z \frac{\partial u_r}{\partial z} + u_z \frac{\partial u_r}{\partial z} - \frac{u_\varphi^2}{r} = -\frac{\partial p}{\partial r} + \text{Eк} \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r u_r) \right) + \frac{\partial^2 u_r}{\partial z^2} \right); \quad (1)$$

$$\frac{1}{\omega_0} \frac{\partial u_z}{\partial t} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial z} + E_k \left(\frac{1}{z} \frac{\partial}{\partial z} \left(z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right) + G_z \cdot E_k^2 (T-1); \quad (2)$$

$$\frac{1}{\omega_0} \frac{\partial u_\varphi}{\partial t} + u_z \frac{\partial u_\varphi}{\partial z} + u_z \frac{\partial u_\varphi}{\partial z} + \frac{u_z u_\varphi}{z} = E_k \left(\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{z} \frac{\partial}{\partial z} (z u_\varphi) \right) + \frac{\partial^2 u_\varphi}{\partial z^2} \right); \quad (3)$$

$$\frac{1}{z} \frac{\partial}{\partial z} (z u_z) + \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0; \quad (4)$$

$$0 < z < 1; \quad 0 < z < H/R,$$

где $E_k = \frac{\nu}{R^2 \omega_0}$ - число Экмана;

ν - кинематическая вязкость;

$G_z = \frac{\beta g T_{пл} R^3}{\nu^2}$ - число Грасгофа;

β - коэффициент термического расширения;

$T_{пл}$ - температура плавления;

Краевые условия для компонент скорости имеют следующий вид. На твердых стенках - обычные условия прилипания:

$$\begin{aligned} u_z = u_\varphi = 0; \quad 0 < z < 1, \quad z = 0; \\ 0 < z < \ell/R, \quad z = H/R, \end{aligned} \quad (5)$$

где ℓ либо совпадает с радиусом жидкой зоны R , либо меньше его и равен ℓ .

Для вращательной компоненты на твердых стенках - заданная скорость вращения:

$$u_{\varphi} = 2\pi z, \quad 0 < z < \ell/R, \quad z = H/R; \quad (6)$$

$$u_{\varphi} = 2\pi\omega_n z/\omega_B, \quad 0 < z < 1, \quad z = 0,$$

где ω_n - частота вращения нижней части слитка.

На верхней части свободной поверхности выполняются следующие условия:

$$u_z = \frac{\partial u_z}{\partial z} = \frac{\partial u_{\varphi}}{\partial z} = 0, \quad \ell/R < z < 1, \quad z = H/R. \quad (7)$$

На свободной поверхности $z=1$ выполняются условия:

$$\frac{\partial u_z}{\partial z} = u_z = 0; \quad \frac{\partial u_{\varphi}}{\partial z} = \frac{u_{\varphi}}{R}, \quad (8)$$

полученные из условия равенства нулю касательных напряжений без учета эффекта Марангони. На оси $r=0$:

$$u_z = u_{\varphi} = 0; \quad \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0. \quad (9)$$

В таком виде краевая задача для системы Навье-Стокса, описывающей движение жидкости в жидкой зоне, аналогична краевой задаче для движения жидкости в тигле для метода Чохральского и отличается только краевым условием на боковой поверхности (8).

Задача о распределении тепла рассматривается для случая, когда на верхнем торце имеется сплошной вращающийся цилиндр. Уравнение теплопроводности имеет обычный вид:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda(T)}{c\rho} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{z} \frac{\partial T}{\partial z} \right) - \left(u_z \frac{\partial T}{\partial z} + u_r \frac{\partial T}{\partial r} \right). \quad (10)$$

Краевые условия на торцах следующие:

$$T|_{z=0} = T|_{z=H/R} = T_{n\lambda}, \quad (11)$$

а на оси задается условие симметрии:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=0} = 0. \quad (12)$$

Краевое условие на боковой поверхности задано так, чтобы приближенно описать нагрев высокочастотным индуктором:

$$-\lambda(T) \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=1} = \epsilon \sigma_0 (T^4 - T_n^4) = \Phi(z). \quad (13)$$

Здесь ϵ - степень черноты расплава, C - теплоемкость, σ_0 - константа Стефана-Больцмана, $\lambda(T)$ - теплопроводность, T_n - температура окружающей среды.

Работу плавильного индуктора описывает функция $\Phi(z)$. В нашем случае была избрана наиболее простая формула:

$$\Phi(z) = \frac{P d^3}{\pi^2 R \left(\left(z - \frac{H}{2R} \right)^2 + d^2 \right)^{3/2}}. \quad (14)$$

Это выражение использовалось ранее [6] для описания действия высокочастотного индуктора и получено при допущениях бесконечно большого радиуса цилиндра и нулевого радиуса сечения витка индуктора. d - расстояние между цилиндром и индуктором.

При уже сделанных при постановке гидродинамической задачи предположениях нет необходимости пользоваться более точными формулами. Постоянная P , имеющая смысл мощности, подаваемой на индуктор, определялась из краевого условия

(13) в точках $x = H/R$ и $x = 0$. Здесь, в силу уже сделанного допущения о горизонтальности изотерм фазового перехода, имеем: $\frac{\partial T}{\partial z} = 0$ и $T = T_{пл}$. Подставляя эти соотношения в (13) и используя (14), получаем выражение для P :

$$P = \frac{\pi^2 R \epsilon \sigma_0 (T_{пл}^4 - T_n^4) (H^2/R^2 + d^2)^2}{d^3} \quad (15)$$

Уравнение неразрывности позволяет ввести функцию тока Ψ , связанную с компонентами скорости соотношениями:

$$u_x = \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial z}; \quad u_z = -\frac{1}{r} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial x} \quad (16)$$

и функцию вихря

$$\zeta = \frac{\partial u_z}{\partial x} - \frac{\partial u_x}{\partial z}, \quad (17)$$

что исключает из рассмотрения давление.
Переходя к новым переменным

$$\xi = \frac{\zeta}{r}; \quad W = r u_\varphi, \quad (18)$$

получим следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\omega_0} \frac{\partial \xi}{\partial t} + u_z \frac{\partial \xi}{\partial z} + u_x \frac{\partial \xi}{\partial x} - \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial W^2}{\partial x} = \\ & = E_k \cdot \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial z} (r^2 \xi) \right) + \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} \right) - G_2 \cdot E_k \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial z}; \end{aligned} \quad (19)$$

$$\frac{1}{\omega_b} \frac{\partial W}{\partial t} + u_z \frac{\partial W}{\partial z} + u_r \frac{\partial W}{\partial r} = E_K \left(r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial W}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 W}{\partial z^2} \right); \quad (20)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} + r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) + r^2 \xi; \quad (21)$$

$$\varphi|_{z=0} = \varphi|_{z=H/R} = \varphi|_{r=0} = \varphi|_{r=1}; \quad (22)$$

$$\left. \frac{\partial \xi}{\partial r} \right|_{r=0} = \xi \Big|_{r=1} = 0,$$

$$\xi \Big|_{z=0} = \xi \Big|_{z=H/R} = -\frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2}, \quad \xi \Big|_{z=H/R} = 0; \quad (23)$$

$$0 < r < \ell/R \qquad \ell/R < r < 1$$

$$\left. \frac{\partial W}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial W}{\partial r} \right|_{r=1} = \frac{2W}{r}, \quad W \Big|_{z=0} = r^2, \quad (24)$$

$$W \Big|_{z=H/R} = \frac{\omega_H}{\omega_b} r^2, \quad \left. \frac{\partial W}{\partial z} \right|_{z=H/R} = 0.$$

$$0 < r < \ell/R \qquad \ell/R < r < 1$$

Для численного решения поставленной задачи были использованы два метода. Первый из них, ориентированный на решение только стационарной задачи, основан на итерациях методом верхней релаксации и разработан Госменом и др. [7]. Дифференциальные уравнения (19)-(21) без производных по времени аппроксимируются разностной схемой первого порядка точности с применением односторонних разностей против потока для конвективных членов.

Уравнение для вращательной компоненты, в отличие от [7], решалось методом переменных направлений. При проведении итерационного процесса сначала вычислялись функции вих-

ря и тока при заданной величине вращательной компоненты скорости W , а затем по известным остальным функциям определялось W . Процесс продолжался до тех пор, пока максимум модуля относительной невязки функции вихря достигал величины, меньшей 10^{-4} .

Другой метод получен путем использования разностной схемы, примененной В.И.Полежаевым [8] для задач численного расчета естественной конвекции без вращения. Уравнения (19)-(21) аппроксимируются монотонной разностной схемой второго порядка точности, предложенной А.А.Самарским [9], для уравнений второго порядка с младшей производной.

Система дифференциальных уравнений (19)-(21) заменяется следующей системой разностных уравнений:

$$\begin{aligned} & \frac{\xi_{ij}^{n+1/2} - \xi_{ij}^n}{0,5\tau\omega_b} + \frac{u_z - |u_z|}{2} \cdot \frac{\xi_{i+1,j}^{n+1/2} - \xi_{ij}^{n+1/2}}{h} + \frac{u_z + |u_z|}{2} \cdot \frac{\xi_{ij}^{n+1/2} - \xi_{i-1,j}^{n+1/2}}{h} + \\ & + \frac{u_z - |u_z|}{2} \cdot \frac{\xi_{ij}^{n+1} - \xi_{ij}^n}{g} + \frac{u_z + |u_z|}{2} \cdot \frac{\xi_{ij}^n - \xi_{ij}^{n-1}}{g} = \\ & = Ek \left(\frac{1}{1 + \frac{|u_z|h}{2}} \cdot \frac{1}{z_j g} \left(\frac{1}{z_{j+1/2}} \cdot \frac{z_{j+1}^2 \xi_{ij+1}^n - z_j^2 \xi_{ij}^n}{g} - \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{1}{z_{j-1/2}} \cdot \frac{z_j^2 \xi_{ij}^n - z_{j-1}^2 \xi_{ij-1}^n}{g} \right) + \frac{\xi_{i+1,j} - 2\xi_{ij} + \xi_{i-1,j}}{h^2} \right) \\ & + \frac{1}{1 + \frac{|u_z|h}{2}} + \frac{1}{z_j} \cdot \frac{(W_{i+1,j}^n)^2 - (W_{i-1,j}^n)^2}{2h} - Gr Ek \frac{1}{z_j} \frac{T_{ij+1}^n - T_{ij-1}^n}{2g}; \quad (25) \\ & W_{i,j}^{n+1/2} = W_{i,j}^n \cdot \frac{u_z + |u_z|}{2} \cdot \frac{W_{i+1,j}^{n+1/2} - W_{ij}^{n+1/2}}{h} + \frac{u_z - |u_z|}{2} \cdot \frac{W_{ij}^{n+1/2} - W_{i-1,j}^{n+1/2}}{h} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{u_z - |u_z|}{2} \cdot \frac{W_{ij+1}^n - W_{ij}^n}{g} + \frac{u_z + |u_z|}{2} \cdot \frac{W_{ij}^n - W_{ij-1}^n}{g} = \\
 & = E_k \left(\frac{z_j}{\left(1 + \frac{|u_z|g}{2}\right) g^2} \left(\frac{1}{z_{j+1/2}} (W_{ij+1}^n - W_{ij}^n) - \frac{1}{z_{j-1/2}} (W_{ij}^n - W_{ij-1}^n) \right) + \right. \\
 & \left. + \frac{1}{\left(1 + \frac{|u_z|h}{2}\right) h^2} \left(W_{i+1}^{n+1/2} - 2W_{ij}^{n+1/2} + W_{i-j}^{n+1/2} \right) \right); \quad (26)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\varphi_{ij}^{s+1/2, n+1} - \varphi_{ij}^{s, n+1}}{0,5 \tau \omega_B} & = \frac{z_j}{g} \left(\frac{1}{z_{j+1/2}} \cdot \frac{\varphi_{ij+1}^{s, n+1} - \varphi_{ij}^{s, n+1}}{g} - \right. \\
 & - \frac{1}{z_{j-1/2}} \cdot \frac{\varphi_{ij}^{s, n+1} - \varphi_{i, j-1}^{s, n+1}}{g} \left. \right) + \frac{\varphi_{i+1}^{s+1/2, n+1} - 2\varphi_{ij}^{s+1/2, n+1} - \varphi_{i-1}^{s+1/2, n+1}}{h^2} + (27) \\
 & + z_j^2 \xi_{ij}^{n+1},
 \end{aligned}$$

где h, g - шаги сетки по x и z , τ - шаг по времени.

На втором временном полушаге уравнения расщепляются аналогичным образом. На каждом временном полушаге уравнения решаются одномерными прогонками в соответствующих направлениях.

Как обычно, на каждом временном шаге решается уравнение типа Пуассона (27) для функции тока методом переменных направлений. В качестве начального приближения берется значение функции тока на предыдущем временном слое. Было предусмотрено, что количество итераций при счете функции тока не должно превысить 20. В практическом счете этот предел не достигался.

Для счета функции тока с относительной точностью 10^{-3} необходимое количество итераций для начальных моментов времени было 10-15, а вблизи стационарного состояния - 1-3.

Переходим к рассмотрению полученных результатов. Зада-

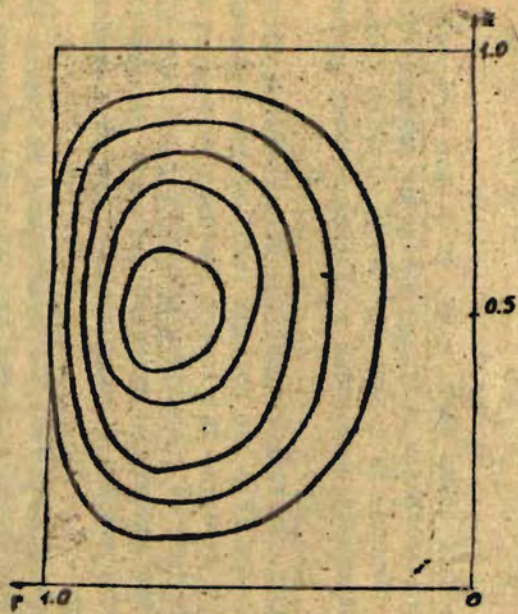


Рис.1. Линии тока для
 $\omega_B = 0.05$ об/сек; $\omega_H = 0$.

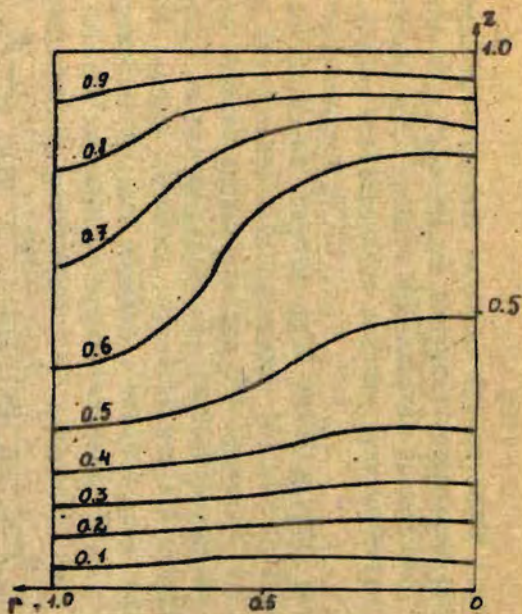


Рис.2. Изолинии угловой скорости вращения
 для $\omega_B = 0.05$ об/сек; $\omega_H = 0$.

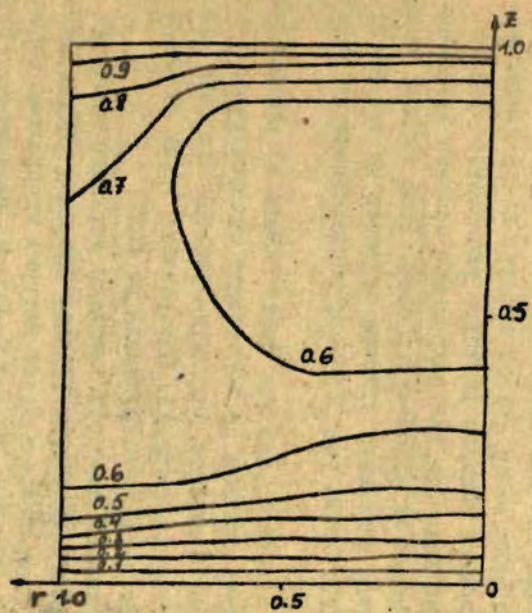


Рис.3. Изолинии угловой скорости вращения для $\omega_B = 0.2$ об/сек; $\omega_H = 0$.

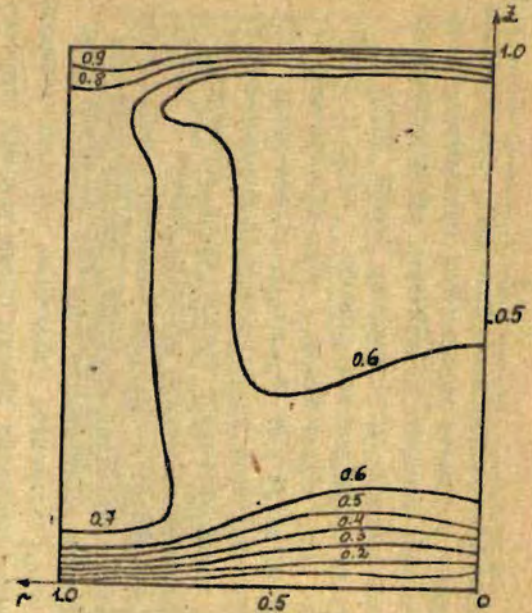


Рис.4. Изолинии угловой скорости вращения для $\omega_B = 0.6$ об/сек; $\omega_H = 0$.

ча решалась для кремния с $\rho = 2.54 \text{ г/см}^3$ и $\nu = 0.007 \text{ см}^2/\text{сек}$ [10] при значениях параметров $R = 1,0 \text{ см}$ и $H = 1.0 \text{ см}$.

Была использована разностная сетка 9x11. При вращении верхнего цилиндра в движение вовлекаются прилегающие слои жидкости, на которые начинает действовать центробежная сила, отбрасывающая жидкость к периферии. Отсюда поток устремляется вдоль свободной поверхности к нижнему цилиндру и, достигнув его, поворачивает к оси, образуя вихрь. Конфигурацию этого вихря для $\omega_{\text{в}} = 0.05 \text{ об/сек}$ представляет рис.1. При течении вниз вдоль свободной боковой поверхности жидкость почти не теряет вращательную компоненту скорости и продолжает вращаться довольно быстро и тогда, когда поток поворачивает к оси. Это видно из рис.2, представляющего изолинии угловой скорости вращения жидкости для того же варианта. Характерно, что эти изолинии имеют подъем вблизи оси. Дальнейшее увеличение скорости вращения верхнего цилиндра усиливает эффект сноса угловой скорости вниз. Это видно из рис.3, где изображены изолинии угловой скорости вращения для значения $\omega_{\text{в}} = 0.2 \text{ об/сек}$. Кроме того, на этом рисунке виден другой эффект. Из-за движения потока к оси вблизи нижнего цилиндра уменьшается радиус вращения частиц жидкости, для сохранения момента вращения должна увеличиться их угловая скорость. Этим вызвано появление локального максимума угловой скорости на оси вращения в месте достижения оси потоком, направленным от поверхности.

Следует отметить, что при счете первым из примененных методов, ориентированным на нахождение стационарного решения, появление локального максимума угловой скорости приводило к расходимости итераций. При расчете таких вариантов вторым методом никаких затруднений не было.

При увеличении скорости вращения верхнего цилиндра величина локального максимума угловой скорости растет. Иллюстрацию этому дает рис.4 и 5, на которых изображены изолинии для $\omega_{\text{в}} = 0.6 \text{ об/сек}$ и $\omega_{\text{в}} = 1.0 \text{ об/сек}$. На этих рисунках

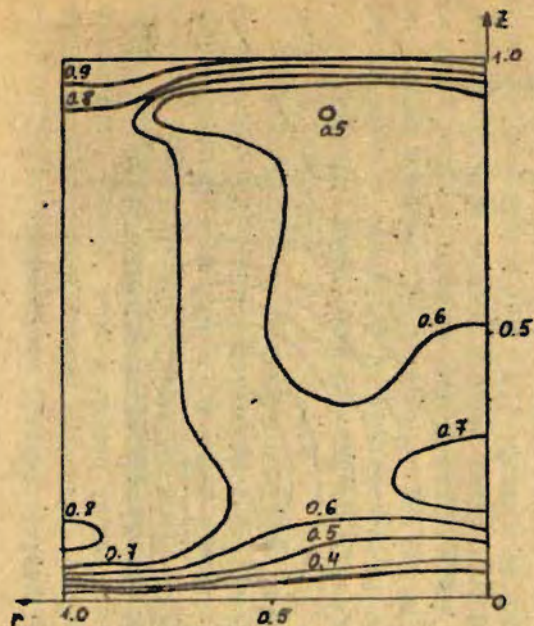


Рис.5. Изолинии угловой скорости вращения
 для $\omega_s = 1$ об/сек; $\omega_n = 0$.

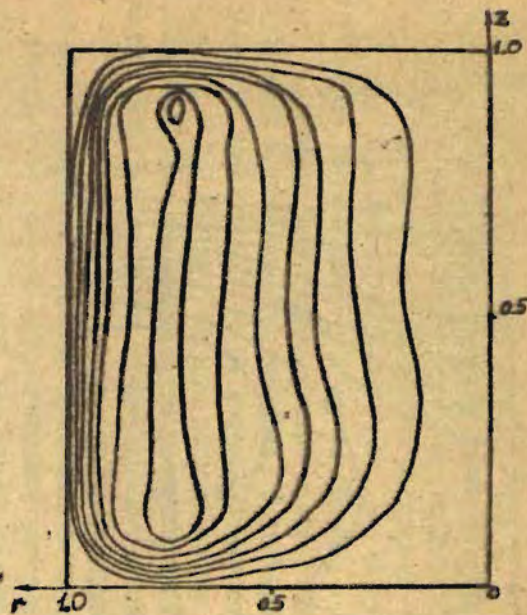


Рис.6. Линии тока для
 $\omega_s = 1$ об/сек; $\omega_n = 0$.

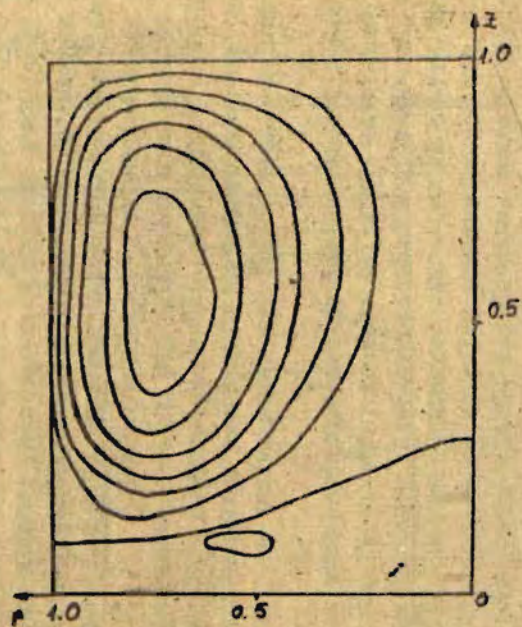


Рис.7. Линии тока для $\omega_B = 0.2$ об/сек;
 $\omega_M = 0.15$ об/сек.

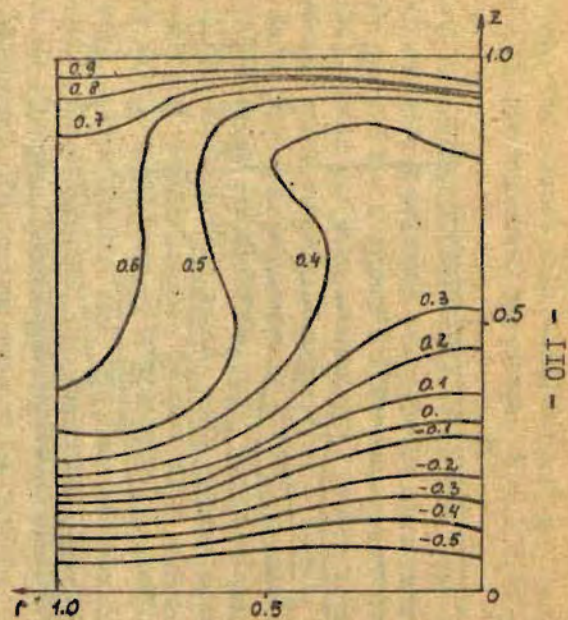


Рис.8. Изолинии угловой скорости вращения
 для $\omega_B = 0.2$ об/сек; $\omega_M = -0.15$ об/сек.

заметен также эффект, в каком-то смысле противоположный вышеописанному. При устремлении потока от оси вдоль верхнего цилиндра к периферии происходит потеря угловой скорости, что приведет к образованию характерного выступа у изолиний вблизи места выхода потока к боковой поверхности.

Что касается вида линий тока, то они существенного изменения не претерпевают. При увеличении скорости вращения происходит растягивание вихря и образование в нем двух локальных максимумов функции тока. Представление об этом процессе дает рисунок 6, на котором изображены линии тока для $\omega_{\text{в}} = 1.0$ об/сек. Расчеты со значениями $\omega_{\text{в}}$, большими 1.0 об/сек, не проводились, поскольку в технологии полупроводникового производства такие скорости не применяются.

В практике зонной плавки довольно часто используются режимы с вращением верхнего и нижнего цилиндров в разные стороны. Такие случаи для одинаковых значений радиусов обоих цилиндров невозможно рассчитать первым из вышеизложенных методов. Второй же метод опять имеет преимущество и дает возможность рассчитать и такие варианты.

Пример таких расчетов представлен на рисунках 7 и 8, где изображены линии тока и изолинии угловой скорости при вращении цилиндров с $\omega_{\text{в}} = 0.2$ об/сек и $\omega_{\text{н}} = -0.15$ об/сек. При рассмотрении рисунка 8 также заметен эффект поднятия изолиний угловой скорости вблизи оси. Расчет вариантов со скоростями вращения $\omega_{\text{н}} = -\omega_{\text{в}}$ дал результаты, зависящие от способа выхода на стационарное состояние. На рисунке 9 изображены линии тока для случая $\omega_{\text{в}} = 0.2$ об/сек и $\omega_{\text{н}} = -0.2$ об/сек.

Это стационарное состояние получено следующим образом: сначала было достигнуто стационарное состояние с вращением только верхнего цилиндра с $\omega_{\text{в}} = 0.2$ об/сек, а затем было включено вращение нижнего цилиндра с $\omega_{\text{н}} = -0.2$ об/сек. Как видно, ожидаемая симметрия относительно средней плоскости отсутствует. Однако, если с самого начала процесса оба цилиндра вращать с надлежющими скоростями ($\omega_{\text{в}} = -\omega_{\text{н}} = 0.2$ об/сек), стационарное решение получается симметричным.

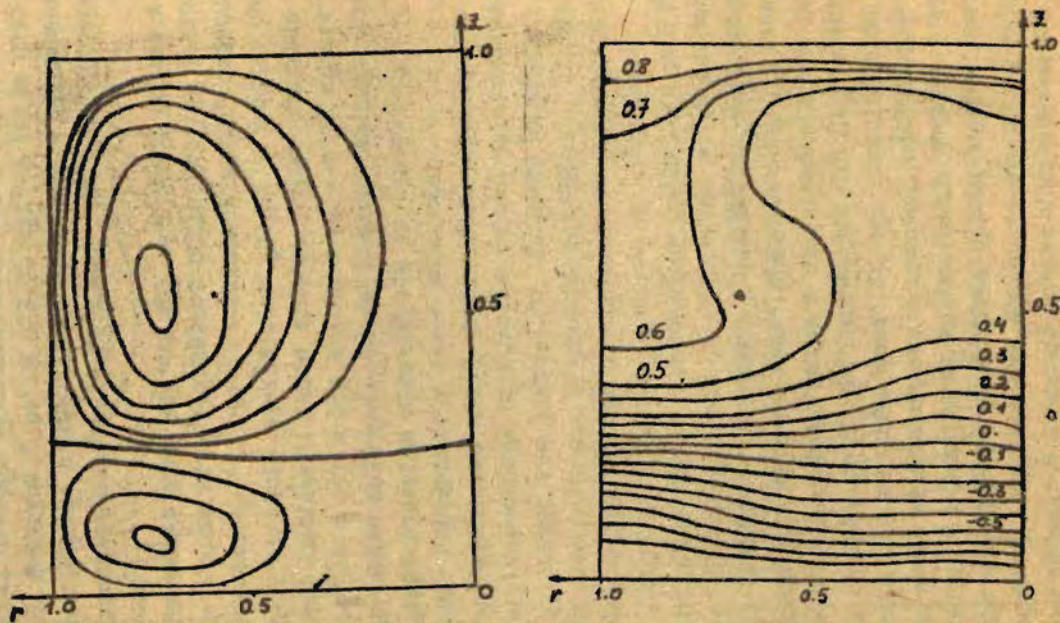


Рис.9. Линии тока и изолинии угловой скорости вращения для $\omega_B = 0.2$ об/сек; $\omega_H = -0.2$ об/сек.

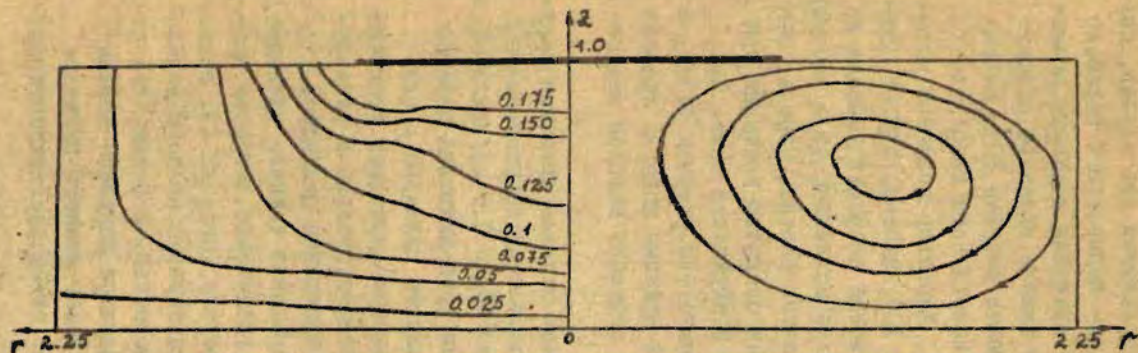


Рис.10. Изолинии угловой скорости вращения и линии тока
 для $\omega_B = 0.1$ об/сек; $\omega_H = 0$ об/сек.

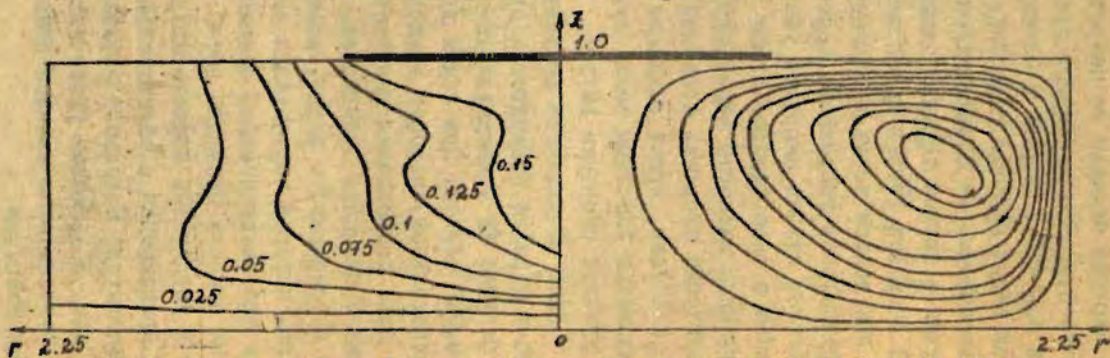


Рис.11. Изолинии угловой скорости вращения и линии тока для
 $\omega_B = 0.3$ об/сек; $\omega_H = 0$.

Далее рассматривается ряд результатов для случая, когда верхний цилиндр не покрывает зону полностью и параметр $\xi/R = 0,4$. При небольшой скорости вращения верхнего цилиндра $\omega_a = 0,1$ об/сек и покоящемся нижнем цилиндре образуется вихрь функции тока (правая часть рисунка 10), ничем существенным не отличающийся от аналогичного вихря для случая с полным верхним цилиндром. Характер изолиний угловой скорости (левая часть рисунка 10), однако, другой. Если при полном верхнем цилиндре угловая скорость убывала по вертикальной координате сравнительно медленно, то в рассматриваемом случае скорость убывает очень быстро. Правда, остается в силе явление сноса угловой скорости вращения при опускании жидкости вдоль наружной поверхности вниз. При увеличении скорости вращения цилиндра (см. рисунок 11) $\omega_a = 0,3$ об/сек, кроме усиления вихря функции тока на графике становится заметным также явление переноса потоком жидкости угловой скорости внутрь.

Ниже обсуждаются результаты для случаев вращения верхнего и нижнего цилиндров в противоположных направлениях. На рисунке 12 приводятся данные для $\omega_a = 0,3$ об/сек и $\omega_n = -0,025$ об/сек. При таком вращении явно выявился перенос отрицательной скорости вращения нижнего цилиндра к оси. При этом соотношении скоростей вращения цилиндров вращение нижнего цилиндра проявилось, в основном, только в уменьшении интенсивности вихря, вызванного верхним цилиндром. Вихрь, который образовался из-за вращения нижнего цилиндра, пока еще незначителен. Дальнейшее увеличение скорости вращения нижнего цилиндра до $-0,033$ об/сек (рисунок 13) приводит к увеличению нижнего вихря и расширению области жидкости, вращающейся с отрицательной скоростью. Отметим, что результаты для неполного верхнего цилиндра получены первым методом. Дальнейшее увеличение вращения нижнего цилиндра при решении этим методом невозможно из-за расходимости процесса итераций.

В качестве примера расчетов с учетом естественной конвекции приведем только один вариант расчета при $d = 2,25$ см.

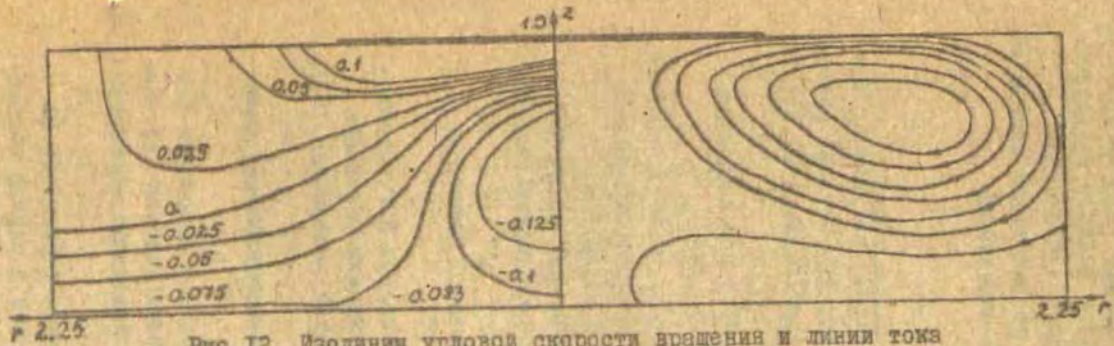


Рис.12. Изолинии угловой скорости вращения и линии тока для $\omega_a = 0.3$ об/сек; $\omega_b = -0.025$ об/сек.

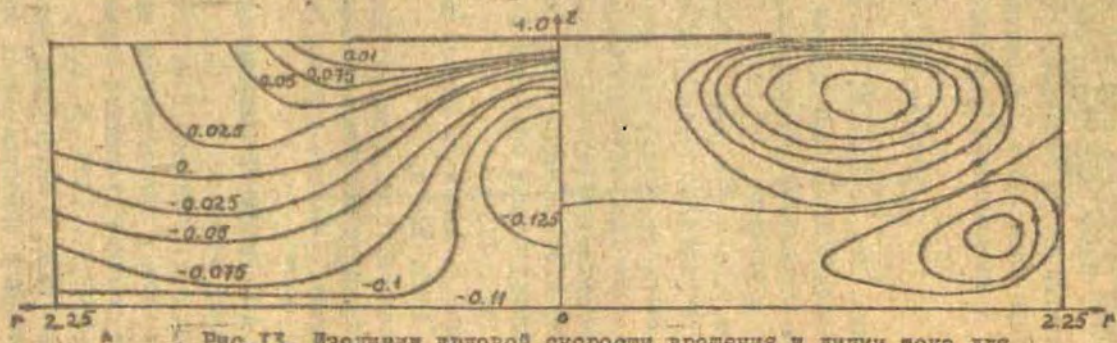


Рис.13. Изолинии угловой скорости вращения и линии тока для $\omega_a = 0.3$ об/сек; $\omega_b = -0.033$ об/сек.

без вращения. Функции тока для этого случая приведены на рисунке 14. Более подробному обсуждению влияния естественной конвекции будут посвящены следующие публикации.

Авторы благодарят Е.В.Люмкина, прочитавшего статью в рукописи и высказавшего ряд полезных замечаний.

Литература

1. Kobayashi N., Arizumi T. The Numerical Analysis of the Solid-Liquid Interface Shapes during the Crystal Growth by the Chochralski Method. Jap.J.Appl.Phys., 1970, vol.9, No. 4, p.361-367.
2. Конаков П.К. и др. Тепло- и массообмен при получении монокристаллов. М., Металлургия, 1971, 283 с.
3. Chang Chong E., Wilcox W.R. Analysis of surface tension driven flow in floating Zone melting. Int.J.Heat and mass transfer, 1976, vol.19. No. 4, p.355-366.
4. Башенко В.В., Дюнской А.В., Ратников Д.Г. Электротермия зонной плавки металлов и полупроводников. М., Энергия, 1965. 115 с.
5. Слезкин Н.А. Динамика вязкой несжимаемой жидкости. М., ГИИТЛ, 1955. 519 с.
6. Добровольская В.И., Мартуван Б.Я., Ратников Д.Г. Определение мощности бестигельной зонной плавки различных материалов. - Физика и химия обработки материалов, 1973, № 5, с. 72-77.
7. Госмен А.Д. и др. Численные методы исследования течений вязкой жидкости. М., Мир, 1972. 320 с.
8. Грязнов В.Д., Полежаев В.И. Исследование некоторых разностных схем и аппроксимации граничных условий для численного решения уравнений тепловой конвекции. - Препринт ИПМ АН СССР, М., 1974, 70 с.
9. Самарский А.А. О монотонных разностных схемах для эллиптических и параболических уравнений в случае несамосопряженного оператора. - ЖВМ и МФ, 1965, № 3, с.548-551.

Ю. Глазов В.М., Чижевская С.Н., Глаголева Н.Н. Жидкие полупроводники. М., Наука, 1967. 324 с.

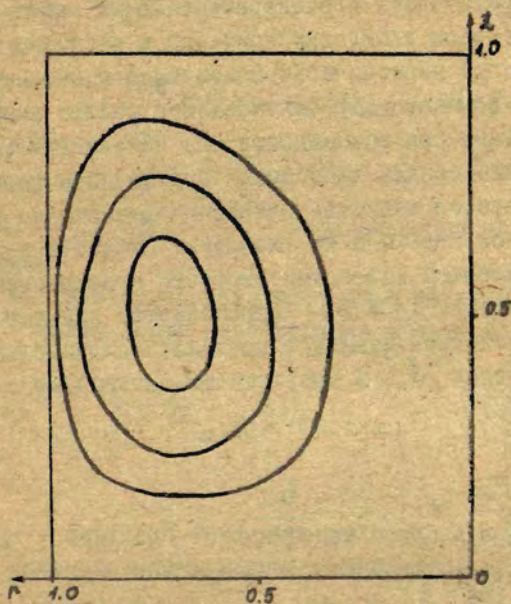


Рис.14. Линии тока при тепловой конвекции.

ВЛИЯНИЕ СКАЧКА ПЛОТНОСТЕЙ ПРИ ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ НА
ЭФФЕКТИВНЫЙ КОЭФФИЦИЕНТ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ
ПРИМЕСЕЙ

Б.Я.Мартузан, Э.Н.Мартузане (ВЦ ЛГУ им.П.Стучки,
г.Рига)

В ряде теоретических и экспериментальных работ [1-5] исследовались вопросы вхождения примесей в растущие из расплава кристаллы при периодически изменяющейся скорости кристаллизации. В работе [5] был проведен расчет вхождения примесей в кристалл при возможности его оплавления во время роста без учета скачка плотностей при фазовом переходе. В настоящей работе исследуется влияние учета скачка плотностей при фазовом переходе на вхождение примесей в кристалл при периодическом колебании скорости кристаллизации. Концентрация примеси $c(x, t)$ определяется как решение одномерной диффузионной задачи в пределах концентрационного пограничного слоя δ в координатах, связанных с границей раздела фаз:

$$D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\rho_{мб}}{\rho_{ж}} v(t) \frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial c}{\partial t}, \quad (1)$$

$$0 < x < \delta, \quad t > 0,$$

где D - коэффициент диффузии в расплаве;

$\rho_{мб}$ - плотность твердой части;

$\rho_{ж}$ - плотность жидкой части;

$v(t)$ - скорость кристаллизации;

$$v(t) = v_0 (1 + A \sin 2\pi f(t)), \quad (2)$$

где v_0 - средняя скорость кристаллизации;

A - отношение амплитуды колебания скорости кристал-

лизации к средней скорости;

f - частота колебания фронта кристаллизации.

На границе раздела фаз выполняется условие материального баланса:

$$D \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=0+} = - \frac{\rho_{мб}}{\rho_{ж}} v(t)c + m v(t)c, \quad v(t) \geq 0, \quad (3)$$

$$D \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=0+} = - \frac{\rho_{мб}}{\rho_{ж}} v(t)c + v(t)c_{мб}, \quad v(t) < 0, \quad (4)$$

где $m = c_{мб} / c_{ж}$ - равновесный коэффициент распределения.

$c_{мб}$ - равновесная концентрация в твердой части;

$c_{ж}$ - равновесная концентрация в жидкой части.

$$c|_{x=\delta} = c_0, \quad (5)$$

где c_0 - заданная концентрация примеси в ядре расплава.

В установившемся режиме выполняется условие периодичности:

$$c(x, t) = c(x, t + T_{пер}), \quad (6)$$

где $T_{пер} = 1/f$ - период колебаний.

В качестве начального приближения при $t = 0$ берется точное решение этой задачи при постоянной скорости кристаллизации, равной средней скорости движения фронта кристаллизации v_0 :

$$c(x) = \left(\frac{m}{\alpha} + \exp\left(-\frac{\rho_{мб}}{\rho_{ж}} \frac{v_0}{D} x\right) \right) \frac{c_0}{\frac{m}{\alpha} + \exp\left(-\frac{\rho_{мб}}{\rho_{ж}} \frac{v_0}{D} \delta\right)}, \quad (7)$$

где $a = \frac{\rho_{m6}}{\rho_{ж}} - m$.

Решение (7) дает возможность определить величину диффузионного слоя δ , если известен эффективный коэффициент распределения примеси $m^* = \frac{C_{m6}}{C_0}$:

$$\delta = \frac{D}{v_0} \frac{\rho_{ж}}{\rho_{m6}} \ln \frac{am^*}{m \left(\frac{\rho_{m6}}{\rho_{ж}} - m \right)} \quad (8)$$

Величина эффективного коэффициента распределения примеси m^* , которая зависит от средней скорости кристаллизации, берется из экспериментальных данных [6].

Целью расчетов является определение интегрального коэффициента распределения как функции от A , рассматривая его как отношение средней за период концентрации примеси в кристалле к концентрации примеси в ядре расплава

$$K_{инт} = \frac{\int_t^{t+T_{пер}} C_{m6} v(\xi) d\xi}{C_0 T_{пер} v_0} \quad (9)$$

При этом предполагается, что величина δ -слоя не меняется при изменении скорости кристаллизации; концентрация в ядре расплава считается постоянной, равной C_0 ; эффективный коэффициент распределения примеси на фронте кристаллизации m^* зависит от средней скорости кристаллизации v_0 и остается постоянным при изменении скорости $v(t)$.

Диффузионная задача решалась численно на ЭВМ ДЖИИ-415. Уравнение (I) аппроксимировалось обычной неявной схемой [7]. В процессе счета соблюдалось условие материального баланса

$$-\int_t^{t+T_{пер}} C_{m6} v(\tau) d\tau + \int_t^{t+T_{пер}} D \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{\delta} d\tau + \frac{\rho_{m6}}{\rho_{ж}} C_0 v_0 T_{пер} = 0. \quad (10)$$

Расчеты были произведены для случаев легирования кремния фосфором и алюминием, для которых $m < 1$. Величины равновесных коэффициентов и зависимости эффективных коэффициентов распределения от средней скорости взяты из [6]. Для фосфора $m = 0.32$; $m^* = 0.4$ при $v_0 = 3$ мм/мин; $m^* = 0.5$ при $v_0 = 5$ мм/мин; для алюминия $m = 0.002$; $m^* = 0.003$ при $v_0 = 2$ мм/мин. Значения коэффициентов диффузии фосфора и алюминия в расплавленном кремнии соответственно приняты равными: $2.7 \cdot 10^{-4}$ и $8 \cdot 10^{-4}$ см²/сек, [8]. Отношение плотностей твердой и жидкой фаз брались равным 0.91 и 1.

Из рис.1 видно, что учет скачка плотностей при фазовом переходе существенно влияет на картину зависимости интегрального коэффициента распределения от отношения амплитуды скорости кристаллизации к средней скорости. Приведенные расчеты с учетом скачка плотностей твердой и жидкой фаз подтверждают выводы, сделанные в [5]. Дополнительная очистка материала при его оплавлении во время роста и последующей кристаллизации может возникать при наличии примесей с $m < 1$. Для случая легирования кремния алюминием дополнительная очистка возникает при $A < 7$, рис.1, кривая 6.

Для случая легирования кремния фосфором из кривой 2 видно, что дополнительная очистка возникает при $A < 2$ и соответствующем технологическом режиме (кривая 2).

Авторы пользуются случаем поблагодарить Авдомина Н.А. за обсуждение полученных результатов.

Литература

1. Morizane K., Witt A.F., Gatow H.C. Impurity Distribution in Single Crystals. - J. Electrochem. Soc., 1967, vol.114, No.8, p.738-742.
2. Херл Д. Колебания температуры в расплавленных металлах и их связь со слоистым распределением примесей в кристаллах, выращенных из расплава. - В кн.: Проблемы роста кристаллов. М., Мир, 1968, с.209-215.

3. Шашков Ю.М., Силкин В.Б. Влияние колебаний фронта кристаллизации на вхождение примесей в растущие из расплава кристаллы. - Изв. АН СССР. Неорганические материалы, 1972, т.8, № 3, с.433-438.
4. Авдонин Н.А., Лукин А.А., Смирнов В.А., Титюник Л.Н. Исследование колебаний фронта кристаллизации и примесей в термодиффузионной задаче о кристаллизации слитков. - В кн.: Тепло- и массоперенос. Минск, 1972, Наука и техника, т.8, с.239-243.
5. Авдонин Н.А., Мартузани Э.Н., Ратников Д.Г., Горюшин Г.А. Влияние колебаний фронта кристаллизации на вхождение примесей в растущие из расплава кристаллы. - Изв. АН СССР, Неорганические материалы, 1977, т.13, № 7, с. 1159-1162.
6. Воронков В.В., Гришин В.П., Шашков Ю.М. Зависимость эффективного коэффициента распределения примесей от скорости выращивания монокристаллов. - Изв. АН СССР, Неорганические материалы, 1967, т.3, № 12, с.2139 - 2143.
7. Рихтмайер Р., Мортон К. Разностные методы решения краевых задач. М., Мир, 1972. 427 с.
8. Шашков Ю.М., Гуревич В.М. Диффузия примесей в расплавленном кремнии. - Журнал физической химии, 1968, т. 42, вып.8, с.2058-2060.

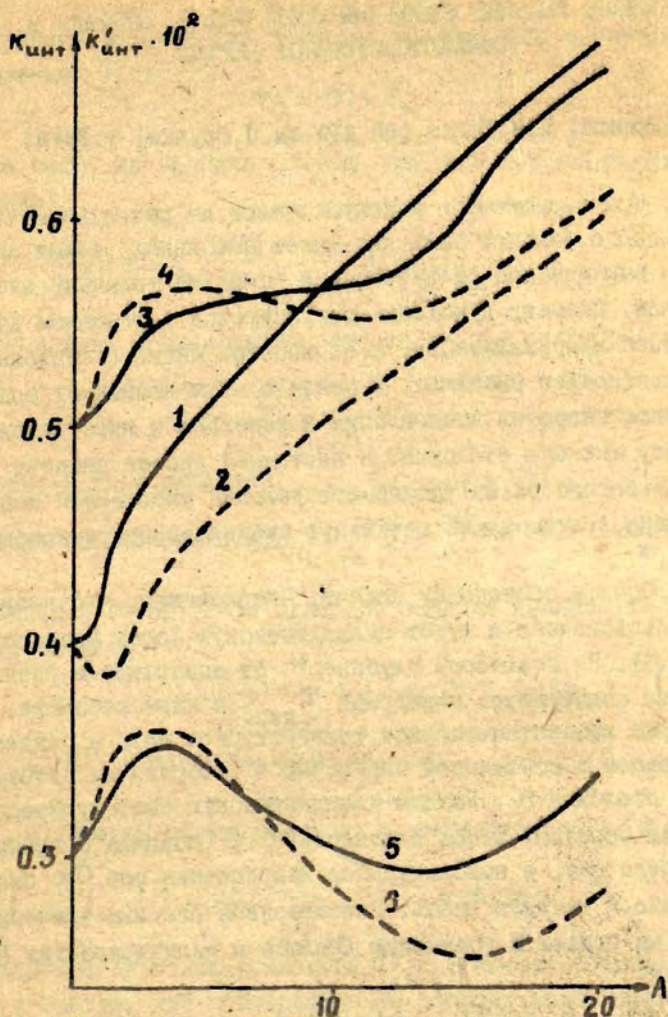


Рис. 1. Зависимость интегрального коэффициента распределения фосфора (1-4) и алюминия (5,6) в кремний от амплитуды A :

— $\rho_{\text{тв}}/\rho_{\text{ж}} = 1$; - - - $\rho_{\text{тв}}/\rho_{\text{ж}} = 0,91$
 1-2 - $v_0 = 3$ мм/мин; $f = 1/3$ об/сек;
 3-4 - $v_0 = 5$ мм/мин; $f = 1$ об/сек;
 5-6 - $v_0 = 2$ мм/мин; $f = 0,1$ об/сек.

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ОДНОЙ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ СТЕФАНА В КВАЗИСТАЦИОНАРНОМ СЛУЧАЕ

М.В.Кояло, М.И.Коган (ВЦ ЛГУ им.П.Стучки, г.Рига)

1. При выращивании монокристаллов из расплава методом Чохральского большое значение имеет начальная стадия процесса — выращивание от затравки и выход на заданный диаметр кристалла. Диаметр кристалла регулируется в основном высотой фронта кристаллизации, т.е. высотой жидкого столбика над поверхностью расплава. В связи с этим возникает вопрос: как влияют скорость вытягивания и перегрев в ядре расплава на высоту жидкого столбика? В настоящей работе найдена указанная зависимость из численного решения упрощенной тепловой задачи, описывающей начальную стадию процесса кристаллизации.*

2. Опишем постановку задачи. Предположим, что затравка полубесконечная и имеет цилиндрическую форму радиуса R_0 (см.рис.1). На некоторой глубине H от поверхности расплава задана температура перегрева $T_{пер}$ в ядре расплава. Рассмотрим квазистационарное температурное поле в слитке, вытягиваемом с постоянной скоростью v . Обозначим высоту жидкого столбика h . Введем цилиндрическую систему координат таким образом, чтобы плоскость $x=0$ совпала с границей раздела фаз, а положительное направление оси Ox было направлено в твердую часть. Рассматривая осесимметрическую задачу, мы приходим к уравнению Лапласа в цилиндрических координатах:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) - c \rho v \frac{\partial T}{\partial x} = 0; \quad 0 < r < R_0, \\ -(H+h) < x < \infty. \quad (I)$$

* Задача поставлена по инициативе А.И.Погодина (ИХМЗ), который предоставил значения исходных параметров.

На границе раздела фаз температура известна - температура плавления T_n :

$$T(r, 0) = T_n. \quad (2)$$

Кроме того, на границе раздела фаз выполняется условие Стефана:

$$-\rho v = \lambda_{\text{тл}} \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=0+} - \lambda_{\text{ж}} \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=0-}. \quad (3)$$

Рассматривая ограниченные решения на оси цилиндра получим

$$\left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=0} = 0. \quad (4)$$

Условие в ядре расплава: $T|_{x=-(h+h)} = T_{\text{пер}}. \quad (5)$

Условие на бесконечности: $\lim_{x \rightarrow \infty} \lambda_{\text{тл}} \frac{\partial T}{\partial x} = -a = \text{const}. \quad (6)$

На боковой поверхности цилиндра зададим нелинейный закон теплообмена:

$$-\lambda \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=R_0} = f[x, T, T_0(x)], \quad (7)$$

где $T_0(x)$ - заданная функция.

3. Введем осредненную по r температуру $u(x)$:

$$u(x) = \frac{2}{R_0^2} \int_0^{R_0} r T(r, x) dr.$$

Проведем осреднение уравнения (1), учитывая условия (4) и (7) и считая, что температура по радиусу мало меняется, получим следующую задачу:

$$\frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{du}{dx} \right) - c\rho v \frac{du}{dx} - \frac{2}{R_0} f[x, u, T_0(x)] = 0, \quad (8)$$

$$u(0) = T_n. \quad (9)$$

$$-\gamma \rho v = \lambda_{\tau 6} \left. \frac{du}{dx} \right|_{x=0+} - \lambda_{жс} \left. \frac{du}{dx} \right|_{x=0-}, \quad (10)$$

$$u[-(H+h)] = T_{\text{пер}}, \quad (11)$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \lambda_{\tau 6} \frac{du}{dx} = -a. \quad (12)$$

4. Предполагая известным h , будем определять из (8)-(12) скорость вытягивания v . Задача такого сорта является обратной задачей Стефана. Конкретный вид функции f возьмем из физических соображений:

$$f[x, u, T_0(x)] = \begin{cases} \epsilon \sigma [(u+273)^4 - (T_0+273)^4], & -h < x < \infty \\ 0, & -(H+h) < x < -h \end{cases}, \quad (13)$$

что соответствует излучению с поверхности по закону Стефана-Больцмана в окружающую среду температуры T_0 над поверхностью расплава. Считая, что ядро расплава сильно перемешивается, принимаем условие равенства нулю потока при $r = R_0$ внутри расплава.

При заданном h задача (8)-(12) решалась методом последовательных приближений. Предполагая известным значение $v = v_n$ решаем задачу (8), (9), (11), (12), которая полностью определяет температурное поле $u(x; v_n)$, затем из условия (10) определяем v_{n+1} :

$$v_{n+1} = -\frac{1}{\gamma \rho} \left(\lambda_{\tau 6} \left. \frac{du(x; v_n)}{dx} \right|_{x=0+} - \lambda_{жс} \left. \frac{du(x; v_n)}{dx} \right|_{x=0-} \right). \quad (14)$$

Задача (8), (9), (11), (12) для каждого v_n решалась численно методом конечных разностей введением "фиктивного" времени:

$$\lambda \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - c\rho v_n \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{R_0} f[x, u, T_0(x)] = c\rho \frac{\partial u}{\partial t} \quad (15)$$

Очевидно, что $u(x, t) \rightarrow u(x)$ при $t \rightarrow \infty$, т.к. функции, входящие в граничные условия, явно не зависят от времени t . Уравнение (15) аппроксимировалось разностями следующим образом:

$$\lambda \frac{u_{i+1}^{\kappa+1} - 2u_i^{\kappa+1} + u_{i-1}^{\kappa+1}}{\ell^2} - c\rho v_n \frac{u_{i+1}^{\kappa+1} - u_{i-1}^{\kappa+1}}{2\tau} - \frac{2}{R_0} \varepsilon \delta [(u_{i-}^{\kappa} + 273)^3 (u_i^{\kappa+1} + 273) - (T_0 + 273)^4] = c\rho \frac{u_i^{\kappa+1} - u_i^{\kappa}}{\tau}, \quad (16)$$

где ℓ - шаг по x , τ - шаг по времени, κ - номер временно-го слоя.

Система полученных алгебраических уравнений решалась методом прогонки.

6. В заключение остановимся на возможности аналитического подхода к решению нашей задачи. Предположим, что $f[x, u, T_0(x)] = \alpha(u - Ax - B)$, где α - коэффициент теплообмена, A и B - заданные константы. Тогда обыкновенное дифференциальное уравнение (8) будет линейным неоднородным, аналитическое решение которого легко выписывается. Корни характеристического уравнения будут действительными, т.к. $(c\rho v)^2 + 4\lambda\alpha > 0$. Обозначая решение краевой задачи для уравнения (8) в $[-(H+h), 0]$ $u_1(x; v)$, а в интервале $[0, \infty)$ - $u_2(x; v)$, и подставляя эти решения в условие (10), получим уравнение для неизвестной скорости v :

$$\gamma\rho v = \lambda_{\tau v} \left. \frac{du_2(x; v)}{dx} \right|_{x=0+} - \lambda_{\kappa} \left. \frac{du_1(x; v)}{dx} \right|_{x=0-} \quad (17)$$

Нелинейное уравнение (17) можно решить методом итераций, причем для нахождения точного значения v требуется всего 3-4 итерации. Более того, для выяснения качественного ха-

рактера зависимости v от h можно решить уравнение (8), пренебрегая конвективным членом. (В диапазоне технологических скоростей 0,5-3 мм/мин это не приведет к большой погрешности). Если положить $A = -\kappa_1$, $B = T_{\text{пер}}$, то решение $u_1(x)$, $u_2(x)$ будет иметь вид:

$$u_1(x) = T_{\text{пер}} - \kappa_1 x + (T_n - T_{\text{пер}} + \kappa_1 h) \frac{e^{\sqrt{\beta_2} x} - e^{-\sqrt{\beta_2} x}}{e^{\sqrt{\beta_2} h} - e^{-\sqrt{\beta_2} h}}, \quad (18)$$

$$-(h+h) < x < 0,$$

$$u_2(x) = T_{\text{пер}} - \kappa_1 x + (T_n - T_{\text{пер}} + \kappa_1 h) e^{-\sqrt{\beta_1} (x-h)}, \quad x > 0. \quad (19)$$

Здесь $\beta_1 = \frac{2\alpha_1}{R_0 \lambda_1}$, $\beta_2 = \frac{2\alpha_2}{R_0 \lambda_2}$.

Подставляя найденные значения $u_1(x)$, $u_2(x)$ в условие (10), найдем явную зависимость v от h и от $T_{\text{пер}}$:

$$v = \frac{1}{\gamma \rho} \left\{ (\lambda_1 - \lambda_2) \kappa_1 + [T_n - T_{\text{пер}} + \kappa_1 h] \left(\lambda_1 \sqrt{\beta_1} + \lambda_2 \sqrt{\beta_2} \frac{1 + e^{-2\sqrt{\beta_2} h}}{1 - e^{-2\sqrt{\beta_2} h}} \right) \right\}. \quad (20)$$

Приведем расчетные данные зависимости v от h и от $T_{\text{пер}}$, полученные разностным методом v_0 и по формуле (20) - v_1 .

В таблице 1 приведена зависимость v от h при постоянном значении $T_{\text{пер}} = 1420^\circ\text{C}$. В таблице 2 приведена зависимость v от $T_{\text{пер}}$ при постоянном значении выноса фронта $h = 0,003$ м.

$T_{\text{пер}} = 1420^\circ\text{C}$

Таблица 1.

h мм	0,5	1	1,5	2,0	2,5	3,0	3,5	4,0	4,5	5,0
v_0 мм/мин	0	1,0	1,5	2,0	2,5	3,0	3,6	4,2	4,6	3,4
v_1 мм/мин	0	0	0,25	1,0	1,8	2,7	3,5	4,3	5,0	5,8

Таблица 2

$h = 0.003$ м

$T_{пер} \text{ } ^\circ\text{C}$	I420	I425	I430	I435	I440
мм/мин	3,0	2,0	1,0	0	0
мм/мин	2,4	1,5	0,5	0	0

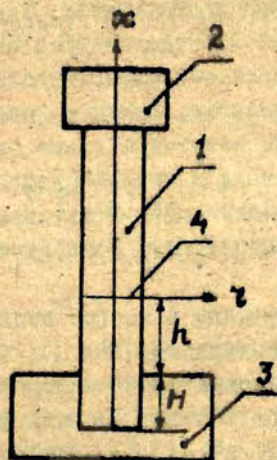


Рис.1. Схема вытягивания затравки.

1 - слиток (затравка), 2 - графитовый держатель, 3 - расплав, 4 - граница раздела фаз.

**РАВНОСТНЫЕ СХЕМЫ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ
ПРИ КРАЕВЫХ УСЛОВИЯХ ТИПА СОСРЕДОТОЧЕННОЙ
ЕМКОСТИ**

А.А.Буйкио (ЛГУ им.П.Стучки, г.Рига)

В статье приводятся конечно-разностные аппроксимации двух начально-краевых задач для одномерного уравнения теплопроводности при двумерных краевых условиях на одной из границ, содержащих производные искомым функций в касательном и нормальном к области направлениях. Такие постановки с краевыми условиями типа сосредоточенной емкости часто встречаются в задачах подземной термогидродинамики (температурные поля нефтяных пластов, ореды с двойной пористостью). Подобные постановки возникают также при анализе процессов распространения тепла в анизотропных составных системах, в процессах кристаллизации, в химической технологии и при исследовании нестационарного теплообмена в аппаратах тепловой энергетики.

Терминология, обозначения и многие подходы в статье следуют монографии А.А.Самарского [1].

Первая из рассматриваемых задач - широко известная в подземной термогидродинамике постановка Ловерье [2]. В ней требуется найти функцию $u(x_1, x_2, t)$, исходя из условий:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2}, \quad x_1 > 0, \quad x_2 > 0, \quad t > 0, \quad (1)$$

$$(1) \quad \frac{\partial u}{\partial t} = \beta \frac{\partial u}{\partial x_1} - w \frac{\partial u}{\partial x_2}, \quad x_1 = 0, \quad x_2 > 0, \quad t > 0, \quad (2)$$

$$u|_{t=0} = u_0(x_1, x_2), \quad u|_{x_1=x_2=0} = \mu(t), \quad |u|_{x_1^2+x_2^2 \rightarrow \infty} < \infty. \quad (3)$$

Задача (1) записана в независимых переменных, нормирующих к единице только коэффициент температуропроводности основного уравнения. Хорошо известное при $u_0=0, \mu(t)=1$ решение этой задачи - формула Ловерье - имеет вид:

$$u(x_1, x_2, t) = \left[1 - \Phi \left(\frac{x_1 + \frac{\beta}{w} x_2}{\sqrt{t - \frac{x_2^2}{w}}} \right) \right] \eta \left(t - \frac{x_2}{w} \right), \quad (4)$$

где $\Phi(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\xi^2} d\xi$ - интеграл ошибок или интеграл вероятности.

Вторая начально-краевая задача возникает из предыдущей при учете различия между температурой $u(x_1, x_2, t)$ окружающих пород и скелета пласта ($x_1 = 0$) и температурой $v(x_2, t)$ жидкости, фильтрующейся со скоростью w по поровому пространству пласта:

$$\left(\text{II} \right) \begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2}, \quad x_1 > 0, x_2 > 0, t > 0, \end{cases} \quad (5)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \beta \frac{\partial u}{\partial x_1} + \alpha(v - u), \quad x_1 = 0, x_2 > 0, t > 0, \quad (6)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \beta_0 \frac{\partial u}{\partial x_1} - w \frac{\partial v}{\partial x_2} + \alpha_0(u - v), \quad x_1 = 0, x_2 > 0, t > 0, \quad (7)$$

$$u|_{t=0} = u_0(x_1, x_2), \quad v|_{t=0} = v_0(x_2), \quad v|_{x_2=0} = \mu(t), \quad (8)$$

$$|u|_{x_1^2 + x_2^2 \rightarrow \infty} < \infty, \quad |v|_{x_2 \rightarrow \infty} < \infty.$$

В нашей работе [3] дан подробный анализ постановки (II) для $\beta_0 = 0$ (что соответствует теплообмену по Ньютону между жидкостью пласта и окружающими породами) и точное замкнутое решение задачи (5)-(8) при $u_0 = v_0 = 0, \mu(t) = 1$ в независимых переменных

$$\xi_1 = \beta x_1, \quad \xi_2 = \frac{\alpha_0}{w} x_2, \quad \tau = \beta^2 \left(t - \frac{x_2}{w} \right).$$

Решение имеет вид:

$$u(\xi_1, \xi_2, \tau) = \alpha_2 e^{-\xi_2 \tau} \int_0^\tau e^{-\alpha_2 \tau_1} J_0(2\sqrt{\alpha_2 \xi_2 \tau_1}) \left[1 - \Phi \left(\frac{\xi_1 + \tau_1}{2\sqrt{\tau - \tau_1}} \right) \right] d\tau_1, \quad (9)$$

$$v(\xi_2, \tau) = e^{-\xi_2 \tau + \sqrt{\alpha_2 \xi_2} \tau} \int_0^\tau e^{-\alpha_2 \tau_1} J_1(2\sqrt{\alpha_2 \xi_2 \tau_1}) \left[1 - \Phi \left(\frac{\tau_1}{2\sqrt{\tau - \tau_1}} \right) \right] \frac{d\tau_1}{\sqrt{\tau_1}}, \quad (10)$$

где $\alpha_2 = \frac{\alpha}{\beta^2}$, $J_n(x)$ - модифицированная функция Бесселя первого рода порядка n .

Знание точных решений задач (I) и (II) делает их очень удобными в качестве тестовых задач при проверке качества и эффективности различных возможных разностных аппроксимаций дифференциальных задач подобного типа.

В этой работе мы рассматриваем некоторые возможные неявные двухслойные схемы с весами для задач (I) и (II), являющиеся эконоичными в смысле определений монографии [I], исследуем порядок аппроксимации этих схем и их устойчивость в равномерной метрике - дискретном аналоге метрики пространства C .

Отметим две известные нам работы по построению и анализу разностных схем для уравнения теплопроводности с краевым условием, содержащим осредоточенную теплоемкость. В [I] для чисто одномерной задачи при переменном коэффициенте теплопроводности внутри области, с краевым условием

$$c_0 = \frac{\partial u}{\partial t} = \kappa \frac{\partial u}{\partial x}$$

на левом конце и краевым условием первого рода на правом конце построена неявная разностная схема с весами, исследован ее порядок аппроксимации и устойчивость в дискретной норме пространства L_2 в зависимости от веса двухслойной схемы. В [4] для задачи (I) с дополнительным членом $\alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ в краевом условии (2) построена разностная схема, условно аппроксимирующая исходную задачу: она имеет первый порядок аппроксимации по всем переменным, если временной шаг τ имеет порядок h_1^2 (h_1 - пространственный шаг схемы в направлении x_1) и аппроксимирует уравнение (2) с дополнительным членом $\beta \gamma \frac{\partial u}{\partial t}$, если $\frac{\tau}{h_1} = \text{const} = \gamma$.

Введем необходимые для дальнейшего обозначения, следуя при этом монографии [I].

Пусть $x_1^* = L_1, x_2^* = L_2$ такие, что за рассматриваемый промежуток времени $0 < t \leq T$ на этих отрезках прямых можно предположить невозмущение начального состоя-

ния. Пусть далее, N, N_1, N_2 - количество узловых точек сеточной функции по t, x_1 и x_2 соответственно. Тогда шаги сетки по этим направлениям обозначим через

$$\tau = \frac{T}{N}, \quad h_1 = \frac{L_1}{N_1}, \quad h_2 = \frac{L_2}{N_2}.$$

Сеточная область представляется в виде

$$\bar{\omega}_{h\tau} = \omega_{h\tau} + \gamma_{h\tau}, \quad (II)$$

где $\omega_{h\tau} = \omega_h \times \omega_\tau$, $\omega_h = \omega_{h_1} \times \omega_{h_2}$,

а $\omega_{h_1} = \{x_1^i = ih_1, i=1, \dots, N_1-1\}$, $\bar{\omega}_{h_1} = \{x_1^i = ih_1, i=0, 1, \dots, N_1\}$,

$$\omega_{h_2} = \bar{\omega}_{h_2} = \{x_2^j = jh_2, j=1, \dots, N_2\},$$

$$\omega_\tau = \{t^k = k\tau, k=1, \dots, N\}, \quad \bar{\omega}_\tau = \{t^k = k\tau, k=0, 1, \dots, N\}.$$

Таким образом,

$$\omega_{h\tau} = \{(ih_1, jh_2, k\tau), i=1, \dots, N_1-1, j=1, \dots, N_2, k=1, \dots, N\}. \quad (I2)$$

Далее,

$$\gamma_{h\tau} = \gamma_h \times \gamma_\tau, \quad \gamma_h = \gamma_0^0 + \gamma_{h_1}^0 + \gamma_{h_2}^1,$$

где

$$\gamma_\tau = \{(x_1, x_2) \in \bar{\omega}_h, t=0\}, \quad \gamma_0^0 = \{x_1=x_2=0, t \in \bar{\omega}_\tau\},$$

$$\gamma_{h_1}^0 = \{x_1=0, (x_2, t) \in \omega_{h_2} \times \omega_\tau\}, \quad \gamma_{h_2}^1 = \{x_1=L_1, (x_2, t) \in \omega_{h_2} \times \omega_\tau\}.$$

Некоторая громоздкость и нестандартность обозначений связана со спецификой рассматриваемых задач. Так как основное уравнение ((I) для задачи (I) и (5) для задачи (II)) вырождено по направлению x_2 , на линии $x_2=0$ при $x_1 > 0$ не должны задаваться дополнительные условия, а на линии

$x_2 = L_2$ при $x_1 > 0$ выполняется само основное уравнение, в точке $x_1 = 0$, $x_2 = L_2$ выполняются уравнения с сосредоточенной емкостью ((2) для задачи (I) и (6), (7) для (II)). Наконец, в точке $x_1 = x_2 = 0$ должно выполняться краевое условие (второе из условий (3), третье из условий (8)) для того уравнения с сосредоточенной емкостью, которое содержит конвективный член в положительном направлении оси x_2 (уравнение (2), соответственно (7)).

Аппроксимацию решения $u(x_1, x_2, t)$ дифференциальной задачи (I) - сеточную функцию - обозначим через $y(x_1^i, x_2^j, t^k) = y_{i,j}^k$. Аппроксимацию второй функции $v(x_2, t)$ для задачи (II) будем обозначать через $\vartheta(x_2^j, t^k) = \vartheta_j^k$. Когда это не будет приводить к недоразумениям, будем также пользоваться более краткими обозначениями:

$$y_{i,j}^k = y, \quad \vartheta_j^k = \vartheta, \quad y_{i,j}^{k+1} = \hat{y}, \quad \vartheta_j^{k+1} = \hat{\vartheta}, \quad y_{0,j}^k = y_0, \quad (I3)$$

$$y_{i,j}^{k+1} = \hat{y}_1, \quad y_{i\pm 1,j}^k = y_{(\pm 1)}, \quad y_{i,j}^{k\pm 1} = y^{(\pm 1)}, \quad \vartheta_{j\pm 1}^k = \hat{\vartheta}^{(\pm 1)}.$$

В принятых обозначениях первую разностную схему для аппроксимации задачи (I) можно записать в виде:

$$y_t = \Lambda_1 [\sigma_1 \hat{y} + (1 - \sigma_1) y], \quad (x_1, x_2, t) \in \omega_{h,t}, \quad (I4)$$

$$y_t = \beta \Lambda_1^+ [\sigma_1 \hat{y} + (1 - \sigma_1) y] - w \Lambda_2^- [\sigma_2 \hat{y} + (1 - \sigma_2) y], \quad (x_1, x_2, t) \in \gamma_{h,t}^0, \quad (I5)$$

$$y = u_0(x_1, x_2), \quad (x_1, x_2, t) \in \gamma_\tau + \gamma_{h,t}^1, \quad (I6)$$

$$y = \mu(t), \quad (x_1, x_2, t) \in \gamma_\tau^0. \quad (I7)$$

Здесь приняты стандартные символы для разностных опе-

раторов (см. [I]):

$$y_t = \frac{\hat{y}_t - y}{\tau}, \quad \Lambda_1 y = y \bar{x}_1, \quad x_1 = \frac{y^{(+1)} - 2y + y^{(-1)}}{h_1^2},$$

$$\Lambda_1^+ y = y x_1 = \frac{y^{(+1)} - y}{h_1}, \quad \Lambda_2^- y = y \bar{x}_2 = \frac{y - y^{(-1)}}{h_2}.$$

Численная реализация предложенной разностной схемы проста и экономична. Для подтверждения оказанного запишем уравнение (I4) в стандартном для разностного уравнения второго порядка виде:

$$A \hat{y}_{(-1)} - C \hat{y} + B \hat{y}_{(+1)} = -F. \quad (18)$$

В нашем случае

$$A = B = \sigma_1 \frac{\tau}{h_1^2}, \quad C = \left(1 + 2\sigma_1 \frac{\tau}{h_1^2}\right), \quad F = \left[1 - 2(1 - \sigma_1) \frac{\tau}{h_1^2}\right] y + (1 - \sigma_1) \frac{\tau}{h_1^2} (y^{(-1)} + y^{(+1)}). \quad (19)$$

В (18) и (19) опущены индексы i, j , ибо выражения коэффициентов для всех $i=1, \dots, N_1-1, j=1, \dots, N_2$ одинаковы.

Далее, уравнение (15) преобразуем в стандартной для краевого условия 3-го рода форме:

$$\hat{y}_0 = \alpha_1 \hat{y}_1 + \mu_1, \quad (20)$$

где α_1 и μ_1 для нашей задачи таковы:

$$\alpha_1 = \frac{\beta \tau \sigma_1}{h_1 + \beta \tau \sigma_1 + \omega \tau \sigma_2 \frac{h_1}{h_2}}, \quad (21)$$

$$\mu_1 = \frac{\left[h_1 - \beta \tau (1 - \sigma_1) - \omega \tau (1 - \sigma_2) \frac{h_1}{h_2}\right] y_0 + \omega \tau \frac{h_1}{h_2} \left[\sigma_2 \hat{y}_0^{(+1)} + (1 - \sigma_2) y_0^{(+1)}\right] + \beta \tau (1 - \sigma_1) y_1}{h_1 + \beta \tau \sigma_1 + \omega \tau \sigma_2 \frac{h_1}{h_2}} \quad (22)$$

Заметим сразу, что для $\forall \tau, h_1, h_2 > 0$ и $0 < \sigma_1 \leq 1$, $0 \leq \sigma_2 \leq 1$ имеем $0 < \alpha_1 < 1$.

После записи основного разностного уравнения (4) в форме (18) и уравнения (15) в форме краевого условия (20) алгоритм реализации (счета) разностной схемы (14)-(17) очевиден: он состоит в проведении N_2 прогонок по i для (18) с краевым условием (20) на левом конце и краевым условием первого рода

$$\hat{y}_{N_1, j} = u_0(L_1, x_2^j) \quad (23)$$

на правом конце. Прогонки должны выполняться последовательно для $j=1, j=2, \dots, j=N_2$, так как в выражение (22) для μ_1 входит значение сеточной функции на верхнем слое: $\hat{y}_{0, j-1}^{(k+1)}$. При указанном порядке выполнения прогонок все входящие в μ_1 величины определены. Действительно: при $j=1$ имеем $\hat{y}_{0, 0}^{(k+1)} = \mu(t^{k+1})$, при проведении прогонок для $j=2$ величина $\hat{y}_{0, 1}^{(k+1)}$ уже известна - как результат уже проведенной прогонок при $j=1$ и т.д. Наконец, процесс последовательных прогонок устойчив; если краевое условие (23) записать в виде

$$\hat{y}_{N_1, j} = \alpha_2 \hat{y}_{N_1-1, j} + \mu_2,$$

где $\alpha_2 = 0$, $\mu_2 = u_0(L_1, x_2^j)$,

то видно, что выполнены достаточные условия устойчивости метода прогонок [1]:

$$|C_i| \geq |A_i| + |B_i|, \quad i=1, \dots, N_1-1; \quad (24)$$

$$|\alpha_2| \leq 1, \quad \alpha = 1, 2; \quad |\alpha_1| + |\alpha_2| < 2.$$

Заметим, что устойчивость метода прогонок обеспечена и тогда, когда на правом конце имеется краевое условие 2-го рода

$$\hat{y}_{k_1, j} = \hat{y}_{k_1-1, j} + h \frac{\partial}{\partial x_1} u_0(L_1, x_2^j). \quad (23')$$

Перейдем к рассмотрению порядка аппроксимации разностной схемы (I4)-(I7) на решении $u(x_1, x_2, t)$ исходной задачи. С учетом непрерывности $u(x_1, x_2, t)$ (кроме точки $x_1 = x_2 = t = 0$, если $\mu(0) \neq u_0(0, 0)$) в качестве проекции решения $P_h u = u_h$ на сеточное пространство $H_h = \{(x_1, x_2, t) \in \bar{\omega}_{h\tau}\}$ возьмем значение решения в сеточном узле: $P_h u|_{(x_1^i, x_2^j, t^k)} = (x_1^i, x_2^j, t^k)$. Для краткости в дальнейшем вместо u_h будем писать просто u .

Пусть $\varepsilon = y - u$ — погрешность разностной схемы. Разностная схема (I4)-(I7) относительно ε имеет вид:

$$\varepsilon_t = \Lambda_1 [\sigma_1 \hat{\varepsilon} + (1 - \sigma_1) \varepsilon] + \psi, \quad (x_1, x_2, t) \in \omega_{h\tau}, \quad (I4')$$

$$\varepsilon_t = \beta \Lambda_1^+ [\sigma_1 \hat{\varepsilon} + (1 - \sigma_1) \varepsilon] - \omega \Lambda_2^- [\sigma_2 \hat{\varepsilon} + (1 - \sigma_2) \varepsilon] + \psi_0, \quad (I5')$$

$$(x_1, x_2, t) \in \mathcal{T}_{h,1}^0,$$

$$\varepsilon = 0, \quad (x_1, x_2, t) \in \mathcal{T}_\tau + \mathcal{T}_{h,1}^1, \quad (I6')$$

$$\varepsilon = 0, \quad (x_1, x_2, t) \in \mathcal{T}_0^0, \quad (I7')$$

где погрешности аппроксимации ψ, ψ_0 выглядят так:

$$\psi = \Lambda_1 [\sigma_1 \hat{u} + (1 - \sigma_1) u] - u_t, \quad (25)$$

$$\psi_0 = \beta \Lambda_1^+ [\sigma_1 \hat{u} + (1 - \sigma_1) u] - \omega \Lambda_2^- [\sigma_2 \hat{u} + (1 - \sigma_2) u] - u_t. \quad (26)$$

Для вычисления порядка аппроксимации разностной схемы (I4)-(I7) воспользуемся хорошо известными (см. [1]) формулами:

$$\sigma \hat{u} + (1 - \sigma) u = 0,5 (\hat{u} + u) + (\sigma - 0,5) \tau u_t, \quad (27)$$

$$\hat{u} = \bar{u} + \frac{\tau}{2} \bar{u}' + O(\tau^2), u = \bar{u} - \frac{\tau}{2} \bar{u}' + O(\tau^2), u_t = \bar{u}' + O(\tau^2), \quad (28)$$

$$\Lambda_1 u = u'' + O(h_1^2), \Lambda_1^+ u = u' + \frac{h_1}{2} u'' + O(h_1^2), \Lambda_2^- u = \dot{u} - \frac{h_2}{2} \dot{u}' + O(h_2^2). \quad (29)$$

Вдесь $\dot{u} = \frac{\partial u}{\partial t}$, $u' = \frac{\partial u}{\partial x_1}$, $\dot{u}' = \frac{\partial u}{\partial x_2}$, $\bar{u} = u(x_1^i, x_2^j, t^{k+1/2})$.

Имеем (см. [I], гл.У):

$$\psi = (\sigma_1 - 0,5)\tau \bar{u}'' + O(\tau^2 + h_1^2). \quad (30)$$

Выражение для

$$\psi_0 = \rho \cdot 0,5 \Lambda_1^+ (\hat{u} + u) - w \cdot 0,5 \Lambda_2^- (\hat{u} + u) - u_t + \beta (\sigma_1 - 0,5)\tau \Lambda_1^+ u_t - w (\sigma_2 - 0,5)\tau \Lambda_2^- u_t$$

после несложных преобразований (с учетом уравнения (2)) принимает вид:

$$\psi_0 = \beta \frac{h_1}{2} \bar{u}'' + w \frac{h_2}{2} \bar{u}'' + \beta (\sigma_1 - 0,5)\tau \left[\bar{u}' + \frac{h_1}{2} \bar{u}'' \right] - w (\sigma_2 - 0,5)\tau \left[\bar{u}' - \frac{h_2}{2} \bar{u}'' \right] + O(\tau^2 + h_1^2 + h_2^2). \quad (31)$$

Формулы (30), (31) показывают, что разностная схема (I4)-(I7) обладает первым порядком аппроксимации на решении задачи (\bar{I}) по всем переменным при произвольных $\sigma_1 \neq 0,5$ и $\sigma_2 \neq 0,5$. При $\sigma_1 = \sigma_2 = 0,5$ имеем первый порядок аппроксимации по x_1 и x_2 и второй по переменной τ .

Заметим, что основное уравнение (I4) имеет второй порядок аппроксимации по x_1 при любом σ_1 . Поэтому воспользуемся методом использования основного уравнения на границе [I] для повышения до второго порядка аппроксимации разностной схемы (I4)-(I7) по x_1 . Эта разностная схема, имеющая порядок аппроксимации $O(\tau + h_1^2 + h_2)$ при $\sigma_1 \neq 0,5$, $\sigma_2 = 0,5$ и порядок $O(\tau^2 + h_1^2 + h_2)$ при

$\sigma_1 = \sigma_2 = 0,5$, отличается от схемы (I4)-(I7) только видом уравнения (I5), которое выглядит следующим образом:

$$\left(1 + \beta \frac{h_1}{2}\right) y_t = \beta \Lambda_1^+ [\sigma_1 \hat{y} + (1 - \sigma_1) y] - w \Lambda_2^- [\sigma_2 \hat{y} + (1 - \sigma_2) y], \quad (I5_1)$$

$$(x_1, x_2, t) \in \mathcal{T}_{h_1}^0.$$

Уравнение (I5') относительно z :

$$\left(1 + \beta \frac{h_1}{2}\right) z_t = \beta \Lambda_1^+ [\sigma_1 \hat{z} + (1 - \sigma_1) z] - w \Lambda_2^- [\sigma_2 \hat{z} + (1 - \sigma_2) z] + \psi_0^1, \quad (I5'_1)$$

где ψ_0^1 с учетом уравнений (I) и (2) окончательно записывается так:

$$\psi_0^1 = w \frac{h_2}{2} \bar{u}'' + \beta (\sigma_1 - 0,5) \tau \left[\bar{u}' + \frac{h_1}{2} \bar{u}'' \right] -$$

$$- w (\sigma_2 - 0,5) \tau \left[\bar{u}' - \frac{h_2}{2} \bar{u}'' \right] + O(\tau^2 + h_1^2 + h_2^2). \quad (3I_1)$$

Рассмотрим теперь конечно-разностные аппроксимации второй дифференциальной задачи. Первая разностная схема для задачи (II) записывается в виде (она аналогична разностной схеме (I4)-(I7) для задачи (I1)):

$$y_t = \Lambda_1 [\sigma_1 \hat{y} + (1 - \sigma_1) y], \quad (x_1, x_2, t) \in \omega_{h\tau}, \quad (32)$$

$$y_t = \beta \Lambda_1^+ [\sigma_1 \hat{y} + (1 - \sigma_1) y] + \alpha [\sigma (\hat{v} - \hat{y}) + (1 - \sigma)(\hat{v} - y)], \quad (x_1, x_2, t) \in \mathcal{T}_{h_1}^0, \quad (33)$$

$$\hat{v}_t = \beta_0 \Lambda_1^+ [\sigma_1 \hat{y} + (1 - \sigma_1) y] - w \Lambda_2^- [\sigma_2 \hat{v} + (1 - \sigma_2) \hat{v}] +$$

$$+ \alpha_0 [\sigma_0 (\hat{y} - \hat{v}) + (1 - \sigma_0)(y - \hat{v})], \quad (x_1, x_2, t) \in \mathcal{T}_{h_1}^0, \quad (34)$$

$$y = u_0(x_1, x_2), \quad (x_1, x_2, t) \in \mathcal{T}_\tau, \quad y = u_0(x_1, x_2), \quad (x_1, x_2, t) \in \mathcal{T}_{h_1}^1, \quad (35)$$

$$\hat{v} = v_0(x_2), \quad (x_1, x_2, t) \in \mathcal{T}_\tau, \quad \hat{v} = \mu(t), \quad (x_1, x_2, t) \in \mathcal{T}_0^0. \quad (36)$$

Вдесь $\gamma_{\tau}^0 = \{(x_1, x_2, t), x_1 = 0, x_2 = jh_2, j=1, \dots, N_2, t=0\}$.

Иследуем порядок аппроксимации этой разностной схемы относительно решения $u(x_1, x_2, t), v(x_2, t)$ задачи (II). Погрешность аппроксимации уравнения (32) Ψ остается прежней (см. выше формулы (25), (30)). Погрешность аппроксимации уравнения (33) Ψ_{01} , имеющую вид

$$\Psi_{01} = \beta \Lambda_1^+ [\sigma_1 \hat{u} + (1 - \sigma_1)u] + \alpha [\sigma(\hat{v} - \hat{u}) + (1 - \sigma)(v - u)] - u_+,$$

можно преобразовать к форме

$$\Psi_{01} = \beta \frac{h_1}{2} \bar{u}'' + \beta(\sigma_1 - 0,5)\tau [\bar{u}' + \frac{h_1}{2} \bar{u}''] + \alpha(\sigma - 0,5)\tau(\bar{v} - \bar{u}) + O(\tau^2 + h_1^2), \quad (37)$$

Погрешность аппроксимации уравнения (34) Ψ_{00} можно представить в такой форме:

$$\begin{aligned} \Psi_{00} = & \beta_0 \frac{h_1}{2} \bar{u}'' + \beta_0(\sigma_1 - 0,5)\tau [\bar{u}' + \frac{h_1}{2} \bar{u}''] + w \frac{h_2}{2} \bar{v}'' - \\ & - w(\sigma_2 - 0,5)\tau [\bar{v}' - \frac{h_2}{2} \bar{v}''] + \alpha_0(\sigma_0 - 0,5)\tau(\bar{u} - \bar{v}) + O(\tau^2 + h_1^2 + h_2^2). \end{aligned} \quad (38)$$

Значит, разностная схема (32)-(34) имеет всегда первый порядок аппроксимации по x_1 и x_2 , второй порядок по t при весах $\sigma = \sigma_0 = \sigma_1 = \sigma_2 = 0,5$ и первый порядок по t для остальных величин весов.

Если уравнение (33) заменить на

$$(1 + \beta \frac{h_1}{2}) y_t = \beta \Lambda_1^+ [\sigma_1 \hat{y} + (1 - \sigma_1)y] + \alpha [\sigma(\hat{v} - \hat{y}) + (1 - \sigma)(v - y)], \quad (33_1)$$

а (34) - на

$$\begin{aligned} \bar{v}_t + \beta_0 \frac{h_1}{2} y_t = & \beta_0 \Lambda_1^+ [\sigma_1 \hat{y} + (1 - \sigma_1)y] - w \Lambda_2^- [\sigma_2 \hat{v} + \\ & + (1 - \sigma_2)\bar{v}] + \alpha_0 [\sigma_0(\hat{y} - \hat{v}) + (1 - \sigma_0)(y - \bar{v})], \end{aligned} \quad (34_1)$$

то разностная схема (32), (33), (34), (35), (36) будет иметь второй порядок аппроксимации по x_2 . Невязка (погрешность аппроксимации) уравнения (33) выглядит так:

$$\psi_{01}^1 = \beta(\sigma_1 - 0,5)\tau \left[\bar{u}' + \frac{h_1}{2} \bar{u}'' \right] + \alpha(\sigma - 0,5)\tau(\bar{v} - \bar{u}) + O(\tau^2 + h_1^2), \quad (37_1)$$

а уравнения (34) -

$$\begin{aligned} \psi_{00}^1 = & \beta_0(\sigma_1 - 0,5)\tau \left[\bar{u}' + \frac{h_1}{2} \bar{u}'' \right] + w \frac{h_2}{2} \bar{v}'' - w(\sigma_2 - 0,5)\tau \times \\ & \times \left[\bar{v}' - \frac{h_2}{2} \bar{v}'' \right] + \alpha_0(\sigma_0 - 0,5)\tau(\bar{u} - \bar{v}) + O(\tau^2 + h_1^2 + h_2^2). \end{aligned} \quad (38_1)$$

Напомним, что повышение порядка аппроксимации по x_1 до второго требует выполнения основного уравнения при $x_1 = 0$. Если посмотреть на явные представления решений задач (I) и (II) при частных значениях входных данных (формулы (4) и (9), (10)), то легко проверить, что они этому требованию удовлетворяют, хотя для общего случая у нас нет строгого доказательства этого свойства решений исходных задач.

Численная реализация разностной схемы (32)-(36) (или второй схемы) проводится по такому же алгоритму, как для схемы (14)-(17). Для этого необходимо только предварительно исключить из уравнений (33), (34) (или (33), (34)) величину \hat{v} . На самом деле, умножим (33), записанное в форме

$$\begin{aligned} (1 + \beta\sigma_1 \frac{\tau}{h_1} + \alpha\sigma\tau) \hat{y}_0 = & \beta\sigma_1 \frac{\tau}{h_1} \hat{y}_1 + \beta(1 - \sigma_1) \frac{\tau}{h_1} y_1 + \\ + [1 - \beta(1 - \sigma_1) \frac{\tau}{h_1} - \alpha(1 - \sigma)\tau] y_0 + & \alpha\tau(1 - \sigma) \hat{v} + \alpha\tau\sigma \hat{v}, \end{aligned} \quad (39)$$

на $(1 + w\sigma_2 \frac{\tau}{h_2} + \alpha_0\sigma_0\tau)$, а (34), записанное в форме

$$\begin{aligned} (\beta_0\sigma_1 \frac{\tau}{h_1} - \alpha_0\sigma_0\tau) \hat{y}_0 = & \beta_0\sigma_1 \frac{\tau}{h_1} \hat{y}_1 + \beta_0(1 - \sigma_1) \frac{\tau}{h_1} y_1 + \\ + [-\beta_0(1 - \sigma_1) \frac{\tau}{h_1} + \alpha_0(1 - \sigma_0)\tau] y_0 + & [1 - w(1 - \sigma_2) \frac{\tau}{h_2} - \alpha_0(1 - \sigma_0)\tau] \hat{v} + \end{aligned}$$

$$+ w \sigma_2 \frac{\tau}{h_2} \hat{y}^{(-1)} + w(1-\sigma_2) \frac{\tau}{h_2} \hat{y}^{(-1)} - (1 + w \sigma_2 \frac{\tau}{h_2} + \alpha_0 \sigma_0 \tau) \hat{y}, \quad (40)$$

на $\alpha \tau \beta$ и сложим. После деления левой и правой частей на коэффициент при \hat{y}_0 мы получим прежнее краевое условие 3-го рода (20) с

$$ze_1 = \frac{\sigma_1 \frac{\tau}{h_1} [\beta(1 + w \frac{\tau}{h_2} + \alpha_0 \sigma_0 \tau) + \beta_0 \alpha \sigma \tau]}{c}$$

и μ_1 , имеющих вид:

$$\mu_1 = \frac{a_0 y_0 + a_1 y_1 + b \hat{y} + b_1 \hat{y}^{(-1)} + \hat{b}_1 \hat{y}^{(-1)}}{c},$$

где

$$a_0 = [1 - \beta(1 - \sigma_1) \frac{\tau}{h_1} - \alpha(1 - \sigma) \tau] (1 + w \sigma_2 \frac{\tau}{h_2} + \alpha_0 \sigma_0 \tau) + [-\beta_0(1 - \sigma_1) \frac{\tau}{h_1} + \alpha_0(1 - \sigma_0) \tau] \alpha \sigma \tau,$$

$$a_1 = \beta(1 - \sigma_1) \frac{\tau}{h_1} (1 + w \sigma_2 \frac{\tau}{h_2} + \alpha_0 \sigma_0 \tau) + \beta_0(1 - \sigma_1) \frac{\tau}{h_1} \alpha \sigma \tau,$$

$$b = (1 + w \sigma_2 \frac{\tau}{h_2} + \alpha_0 \sigma_0 \tau) \alpha(1 - \sigma) \tau + [1 - w(1 - \sigma_2) \frac{\tau}{h_2} - \alpha_0(1 - \sigma_0) \tau] \alpha \sigma \tau,$$

$$b_1 = w(1 - \sigma_2) \frac{\tau}{h_2} \alpha \sigma \tau, \quad \hat{b}_1 = w \sigma_2 \frac{\tau}{h_2} \alpha \sigma \tau,$$

$$c = (1 + \beta \sigma_1 \frac{\tau}{h_1}) (1 + w \sigma_2 \frac{\tau}{h_2} + \alpha_0 \sigma_0 \tau) + (1 + \beta_0 \sigma_1 \frac{\tau}{h_1} + w \sigma_2 \frac{\tau}{h_2}) \alpha \sigma \tau.$$

Для схемы второго порядка по x_1 (уравнения (33₁), (34₁)) коэффициенты c , a_0 заменяются на c' , a'_0 , где

$$c' = (1 + \beta \frac{h_1}{2} + \beta \sigma_1 \frac{\tau}{h_1}) (1 + w \sigma_2 \frac{\tau}{h_2} + \alpha_0 \sigma_0 \tau) + (1 + \beta_0 \frac{h_1}{2} + \beta_0 \sigma_1 \frac{\tau}{h_1} + w \sigma_2 \frac{\tau}{h_2}) \alpha \sigma \tau,$$

$$a'_0 = [1 + \beta \frac{h_1}{2} - \beta(1 - \sigma_1) \frac{\tau}{h_1} - \alpha(1 - \sigma) \tau] (1 + w \sigma_2 \frac{\tau}{h_2} + \alpha_0 \sigma_0 \tau) +$$

$$+ \left[\beta_0 \frac{h_1}{2} - \beta_0 (1 - \sigma_1) \frac{\tau}{h_1} + \alpha_0 (1 - \sigma_0) \tau \right] \alpha \beta \tau.$$

Как и выше, для разностных схем, аппроксимирующих задачу (I), имеем при $\forall \tau, h_1, h_2 > 0$ $0 < \varepsilon_1 < 1$, если $0 < \sigma_1 \leq 1$, $0 \leq \sigma_0, \sigma_2 \leq 1$.

После проведения прогонки для $y_{i,j}^{k+1}$ на j -той линии, т.е. вычисления \hat{y}_j , включая \hat{y}_0 , по уравнению (40) (или 39), при $\beta \neq 0$) находится \hat{y}_j .

Теперь остановимся кратко на устойчивости предлагаемых разностных схем. Условия устойчивости в равномерной метрике, когда норма сеточной функции определяется как

$$\|y\|_C = \max_{1 \leq j \leq N_2} \max_{0 \leq i \leq N_1} |y_{i,j}^k|$$

получаются на основе принципа максимума с некоторой модификацией теорем из [1]. Для разностной схемы (14)-(17) достаточное условие устойчивости можно записать в виде:

$$\tau \leq \min \left\{ \frac{h_1^2}{2(1-\sigma_1)}, \frac{1}{\frac{\beta}{h_1}(1-\sigma_1) + \frac{w}{h_2}(1-\sigma_2)} \right\}, \quad (41)$$

если вместо уравнения (15) берем (15₁), то условие (41) заменяется на условие

$$\tau \leq \min \left\{ \frac{h_1^2}{2(1-\sigma_1)}, \frac{1 + \beta \frac{h_1}{2}}{\frac{\beta}{h_1}(1-\sigma_1) + \frac{w}{h_2}(1-\sigma_2)} \right\}, \quad (41_1)$$

При чисто неявной аппроксимации основного уравнения (14) условия (41), (41₁) упрощаются:

$$\tau \leq \frac{h_2}{w(1-\sigma_2)}, \quad (42)$$

соответственно

$$\tau \leq \frac{h_2 + \beta \frac{h_1 h_2}{2}}{w(1 - \sigma_2)} \quad (42_1)$$

Условие (42) есть просто условие Куранта для классического уравнения переноса.

Наконец, при $\sigma_1 = \sigma_2 = 1$ разностные схемы для задачи (I) являются, безусловно, устойчивыми.

Получение незавышенных достаточных условий устойчивости более сложно для аппроксимирующей задачу (II) разностных схем. Очевидно, что при чисто неявной аппроксимации ($\sigma = \sigma_0 = \sigma_1 = \sigma_2 = 1$) предложенные схемы являются, безусловно, устойчивыми. В общем случае можно указать следующее условие относительно временного шага τ в зависимости от весов схем и шагов по пространству:

$$\tau \leq \min \left\{ \frac{h_1^2}{2(1-\sigma_1)}, \frac{1}{\beta/h_1(1-\sigma_1) + \alpha}, \frac{1}{\beta_0/h_1(1-\sigma_1) - \alpha_0 - \frac{w}{h_2}\sigma_2}, \frac{1}{\frac{w}{h_2}(\sigma - \sigma_2) + \alpha_0(\sigma - \sigma_0)} \right\} \quad (43)$$

для схемы (32)-(36) и

$$\tau \leq \min \left\{ \frac{h_1^2}{2(1-\sigma_1)}, \frac{1 + \beta \frac{h_1}{2}}{\beta/h_1(1-\sigma_1) + \alpha}, \frac{1 + \beta_0 \frac{h_1}{2}}{\beta_0/h_1(1-\sigma_1) - \alpha_0 - \frac{w}{h_2}\sigma_2}, \frac{1}{\frac{w}{h_2}(\sigma - \sigma_2) + \alpha_0(\sigma - \sigma_0)} \right\} \quad (43_1)$$

для схемы (32), (33), (34), (35), (36). При этом, если знаменатель третьего или четвертого члена в фигурных скобках обращается в нуль или отрицателен, то соответствующий член из условия устойчивости выпадает.

Заметим, наконец, что первое слагаемое во всех условиях устойчивости есть классическое условие устойчивости в пространстве S при аппроксимации уравнения теплопроводности неявной схемой с весом σ_1 (см., напр., [1]).

Значит, можно заключить, что при выполнении условия

устойчивости (42), (или (42)-(43,)) разностной схемы она сходится к решению соответствующей дифференциальной задачи и ее порядок точности совпадает с порядком аппроксимации.

Литература.

1. Самарский А.А. Теория разностных схем. М., Наука, 1977, 656с.
2. Lauwerier H.A. The transport of heat in an oil layer caused by the injection of hot fluid.- Applied Scientific Research, Section A, 1955, vol.5, No.2,3, p.145-150.
3. Буйкис А.А. Двухтемпературное поле в гетерогенной среде в приближении сосредоточенной емкости.- В кн.: Прикладные задачи теоретической и математической физики, I. Рига, ЛГУ им.П.Стучки, 1977, с.74-83.
4. Авдонин Н.А., Белоглазов К.С. Приближенный расчет температурного поля пласта при переменной скорости фильтрации.- Ученые записки ЛГУ им.П.Стучки, 1970, т.123, с.24-32.

РЕФЕРАТЫ

УДК 536.42+536.421

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТЕЙ И РОСТА КРИСТАЛЛОВ. Ван ден Эрден, И., Беннема П., Черепанова Т.А. Прикладные задачи теоретической и математической физики, 1978.

Представлен обзор современного состояния исследований механизма и кинетики кристаллизации методом статистического моделирования. Дан анализ результатов моделирования нормального механизма роста путем двумерного зарожде-ния на винтовых дислокациях. Проведено их сравнение с ре-зультатами аналитических расчетов.

Библиография (51), рис. II.

УДК 548.52

ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА ФАЗ И КИНЕТИКИ РОСТА БИНАРНОГО ПЦК КРИСТАЛЛА, РАСТУЩЕГО ИЗ РАСПЛАВА. Трунов Н.Н. Прикладные задачи теоретической и математической физики, 1978.

Методом Монте-Карло исследуется рост бинарного ПЦК кристалла $Ag - Al$, представляющего собой твердый рас-твор замещения, растущего из расплава в направлениях $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$. Приведены результаты для концентрации примеси в расплаве, равной 10 и 19 ат.%. В качестве при-меси рассматривается как Ag , так и Al . Изучен диапа-зон скоростей роста $\leq 3,0$ см/сек. Изменение концентрации примеси на фронте кристаллизации в процессе роста не учи-тывалось. Результаты показывают, что выполняется нормаль-ный механизмы роста, кинетический коэффициент близок к 10 см/сек-град. С увеличением скорости роста коэффициент распределения примеси в твердой фазе и шероховатость фа-зовой границы возрастают.

Библиография (8), рис.4.

УДК 518.61+536.33 +
+ 621.315.592

РАСЧЕТ ТЕМПЕРАТУРЫ В РАСТУЩЕМ КРИСТАЛЛЕ С УЧЕТОМ РАДИАЦИОННОГО ТЕПЛООБМЕНА С ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДОЙ В УСЛОВИЯХ ПРОЦЕССА ЧОХРАЛЬСКОГО. Ломкис В.Д., Мартузан Б.Я. Прикладные задачи теоретической и математической физики, 1978.

Приводится постановка и описывается методика расчета тепловых полей в кристаллах, выращиваемых по методу Чох - ральского, с учетом радиационного теплообмена с окружающей средой. Поверхности, участвующие в теплообмене, предполагаются диффузно серыми. Даны выражения для расчета угловых коэффициентов для осесимметричных систем. Для расчета излучения использовался метод сальдо, что позволило учесть многократное отражение. Для одного из вариантов проводится сравнение с расчетом, учитывающим лишь однократное отражение.

Задача теплопроводности в кристалле решалась релаксационным методом Федоренко. Проводится анализ скорости сходимости этого итерационного процесса для рассмотренной нелинейной задачи.

Библиография (12), рис.6.

УДК 518.61/539.377

РАСЧЕТ ТЕРМИЧЕСКИХ НАПРЯЖЕНИЙ И ПЛОТНОСТИ ДИСЛОКАЦИЙ В КРИСТАЛЛАХ, ВЫРАЩИВАЕМЫХ ИЗ РАСПЛАВА. Вахрамеев С.С., Ширрин С.С. Прикладные задачи теоретической и математической физики; 1978.

По разработанной ранее автором методике проводятся расчеты температурных напряжений. Расчеты используются для оценки плотности дислокаций в кристаллах. Для релаксации напряжений используется полуэмпирическая формула. Приводятся результаты расчетов плотности дислокаций для кристалла

арсенида геллия.

Библиография (7), рис.3.

УДК 532.516.5 + 621.315.592

РАСЧЕТ ТЕЧЕНИЯ В ЖИДКОЙ ЗОНЕ ПРИ БЕСИГНЕЛЬНОЙ
ЗОННОЙ ПЛАВКЕ С УЧЕТОМ ВРАЩЕНИЯ. Мартузан Б.Я.,
Мартузани Э.Н. Прикладные задачи теоретической
и математической физики, 1978.

Численно изучаются потоки в жидкой зоне при бестигельной зонной плавке. Рассматривается зона цилиндрической формы, заключенная между цилиндрами различных диаметров, вращающихся с различными угловыми скоростями. Решается система нестационарных уравнений Навье-Стокса вязкой, несжимаемой жидкости в цилиндрической системе координат для функции тока, функции вихря и вращательной компоненты скорости. Излагается метод решения, основанный на расщеплении уравнений.

Обсуждаются особенности потоков при различной скорости вращения цилиндров. Обнаружена зависимость стационарного состояния от режима раскрутки цилиндров при их вращении в разные стороны.

Библиография (10), рис.14.

УДК 536.421.4 + 621.315.592

ВЛИЯНИЕ СКАЧКА ПЛОТНОСТЕЙ ПРИ ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ
НА ЭФФЕКТИВНЫЙ КОЭФФИЦИЕНТ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПРИ
МЕСЕЙ. Мартузан Б.Я., Мартузани Э.Н. Прикладные задачи теоретической и математической физики, 1978.

В работе изучается поле концентраций в пределах пограничного слоя при периодически изменяющейся скорости кристаллизации с учетом оплавления и скачка плотностей при фазовом переходе путем численного решения одномерной диф-

фузионной задачи. Исследована зависимость интегрального коэффициента распределения от отношения амплитуды колебания скорости кристаллизации к средней скорости. Сделан вывод о том, что учет скачка плотностей при фазовом переходе существенно влияет на эту зависимость.

Библиография (8), рис.1.

УДК 536.421.4 + 536.421.1

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ОДНОЙ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ СТЕФАНА В КВАЗИСТАЦИОНАРНОМ СЛУЧАЕ. Кояло М.В., Коган М.И.

Прикладные задачи теоретической и математической физики, 1978.

Решается задача определения температурного поля и скорости кристаллизации тонкого цилиндрического слитка при заданном положении (выносе) границы раздела фаз. Решена одномерная квазистационарная задача при нелинейном источнике. Решение разностным методом сопоставляется с найденным приближенным аналитическим решением. Получена зависимость скорости кристаллизации от положения фронта и перегрева расплава.

Рис. 1, табл.2.

УДК 518:517.944/ 947:532.546

РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ПРИ КРАЕВЫХ УСЛОВИЯХ ТИПА СОСРЕДОТОЧЕННОЙ ЕМКОСТИ. Буйкис А.А. Прикладные задачи теоретической и математической физики, 1978.

Предлагаются некоторые экономичные разностные схемы для двумерного уравнения теплопроводности при вырождении его по одной переменной, когда на одной из границ дано одно или два краевых условия с сосредоточенной теплоемкостью, конвективным теплопереносом вдоль границы и меж-

фазным теплообменом. Исследуется численная реализация предлагаемых разностных схем, их порядок аппроксимации и устойчивость в равномерной метрике.

Библиография (4).

СОДЕРЖАНИЕ

Ван ден Эрден И., Беннема П., Черепанова Т.А. Моделирование методом Монте-Карло кристаллических поверхностей и роста кристаллов	3
Трунов Н.Н. Изучение структуры границы раздела фаз и кинетики роста бинарного ГЦК кристалла, растущего из расплава	58
Лямкис Е.Д., Мартузан Б.Я. Расчет температу- ры в растущем кристалле с учетом радиационного теплообмена с окружаю- щей средой в условиях процесса Чохральского	70
Вахрамеев С.С., Шифрин С.С. Расчет термических напряжений и плотности дислокаций в кристаллах, выращиваемых из расплава.....	87
Мартузан Б.Я., Мартузани Э.Н. Расчет течения в жидкой зоне при бестигельной зонной плавке с учетом вращения	97
Мартузан Б.Я., Мартузани Э.Н. Влияние скачка плотностей при фазовом переходе на эффективный коэффициент распределения примесей	118
Кояло М.В., Коган М.И. Численное решение одной обратной задачи Стефана в квазиста- ционарном случае	124
Буйкис А.А. Разностные схемы для уравнения теплопроводности при краевых условиях типа сосредоточенной емкости	130
РЕФЕРАТЫ	146

ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
Межведомственный сборник научных трудов

Редакторы: Н. Авдонин, Т. Фадеева
Технический редактор К. Судник
Корректор К. Судник

Подписано к печати 25.05.1978. ЯТ 12137. Ф/б 60x84/16.
Бумага №1. 9,8 физ. печ. л., 6,8 уч.-изд. л. Тираж 450 экз.
Зак. № 858. Цена 68 к.

Латвийский государственный университет им. П. Стучки
Рига 226098, б. Райниса, 19
Отпечатано на ротапринтере, Рига 226050, ул. Вейденбаума, 5
Латвийский государственный университет им. П. Стучки