

Od Redakcji

Prezentowana praca jest jedną z trzech przedstawionych w cyklu seminariów w Zakładzie Technologii Monokryształów Tlenkowych, na których omówiono wybrane zagadnienia dotyczące monokryształizacji, uwzględniające zasadnicze zjawiska zachodzące w procesie wzrostu.

Drugi artykuł, autorstwa dr K. Graczy, przedstawi zjawiska konwekcji i ich rolę w procesie wzrostu; w trzecim dr M. Berkowski omówi problemy charakterystyczne dla metody Czochralskiego (artykuł ten zamieszczony będzie na łamach Materiałów Elektronicznych w 1994 r.).

ZASTOSOWANIE TEORII PODOBIENSTWA DO PROCESÓW WZROSTU KRYSZTAŁÓW

Tadeusz Łukasiewicz^{1,2)}

W pracy przedstawiono założenia teorii podobieństwa zjawisk fizycznych, zdefiniowano pojęcie podobieństwa i pokrewieństwa, wyprowadzono podstawowe liczby kryterialne, podano przykład zastosowania w procesie wzrostu metodą Czochralskiego.

1. WSTĘP

Podjmując zadanie opracowania dowolnego procesu technologicznego konieczna jest znajomość pewnych wielkości fizycznych, których zmiany mają wpływ na jego przebieg. Odnosząc rozważania do procesu monokryształizacji, znając wykres fazowy związku, który chcemy otrzymać w postaci monokryształu, można w ogólnych zarysach przewidzieć przebieg procesu wzrostu. Jednakże opracowanie warunków krystalizacji, które gwarantowałyby właściwą jakość kryształu możliwe jest wyłącznie na drodze doświadczalnej. Wstępne doświadczenia wykonuje się zwykle w niewielkiej skali układu badawczego. W przypadku metody Czochralskiego zbudowany układ będzie zawierał możliwie mały tygiel umieszczony w niewielkiej komorze,

1) Instytut Technologii Materiałów Elektronicznych
ul. Wólczyńska 133, 01-919 Warszawa

2) Wojskowa Akademia Techniczna
ul. S. Kaliskiego, 00-908 Warszawa

czalnej. Wstępne doświadczenia wykonuje się zwykle w niewielkiej skali układu badawczego. W przypadku metody Czochralskiego zbudowany układ będzie zawierał możliwie mały tygiel umieszczony w niewielkiej komorze, ogrzewany oporowo lub indukcyjnie. Mała skala układu ułatwia wykonywanie doświadczeń bowiem operuje się niewielką ilością materiału, czas doświadczeń może być odpowiednio krótki i oczywiście uzyskuje się niewielkie próbki krystalicznego materiału. Dobra jakość tych próbek będzie świadczyć o opanowaniu procesu w skali układu doświadczalnego na co składają się odpowiednio dobre warunki cieplne uzyskane poprzez właściwy radialny i poosiowy rozkład temperatury, odpowiednia dla danego materiału szybkości wyciągania i dopasowana do tych warunków szybkości obrotów.

W większości przypadków dąży się do wytwarzania materiału w postaci możliwie dużych kryształów i w odpowiednio dużych ilościach tak by mógł on stanowić produkt handlowy co skłania do powiększenia skali procesu technologicznego. Zagadnienie to jest przedsięwzięciem trudnym, którego rozwiązanie wyłącznie na podstawie znajomości praw rządzących procesem krystalizacji, jest praktycznie niewykonalne. Proporcjonalne powiększenie wymiarów układu, zastosowanie większego tygla i powtórzenie warunków wzrostu opracowanych w mniejszej skali nie przyniesie oczekiwanych rezultatów. Wraz ze zwiększeniem komory i użyciem większego tygla, zmieniają się warunki wymiany ciepła, zmienia się charakter i kształt strumieni konwekcyjnych roztopu w tyglu a przy powiększonych wymiarach kryształu ulegną zmianie warunki odprowadzania ciepła z obszaru wzrostu.

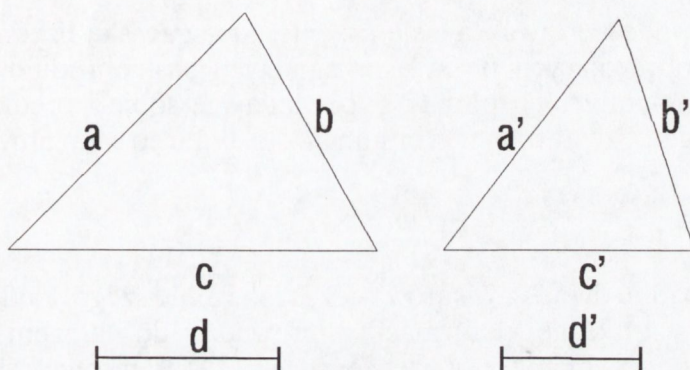
Powstawanie monokrystalicznej fazy stałej jest procesem skomplikowanym zależnym od wielu czynników. Opis zachodzących tu zjawisk w postaci równań różniczkowych przedstawiających zależności funkcyjne odpowiednich wielkości jest w zasadzie możliwy jednakże ich rozwiązanie okazuje się często niezmiernie trudne lub wręcz niemożliwe.

Pomocną w rozwiązywaniu zagadnień powiększania skali procesów technologicznych jest stosowana z dobrymi wynikami m.in. w inżynierii chemicznej teoria podobieństwa zjawisk wykorzystywana do badania układów równań różniczkowych opisujących zjawiska fizyczne. Posługując się tą metodą można na podstawie wyników uzyskanych w małej skali określić w sposób celowy kierunek dalszych badań, wyznaczyć wielkości fizyczne, które winny być zmierzone, sposób ich uogólnienia tak by zakres i liczbę doświadczeń ograniczyć do niezbędnego minimum. Podstawą jest fakt, że każdy układ równań różniczkowych może stanowić model matematyczny wielu zjawisk należących do tej samej klasy, w których można wyodrębnić grupy

zjawisk podobnych. Zjawiska podobne różniące się skalą są pod względem jakości jednakowe.

2. PODOBIENSTWO I POKREWIEŃSTWO

Pojęcie podobieństwa znane z geometrii w odniesieniu do dwóch trójkątów mówi, że są one podobne jeżeli odpowiednie kąty są sobie równe i równe są stosunki odpowiednich boków.



Rys. 1

Podobieństwo geometryczne dwóch trójkątów.

Dla dwóch trójkątów na rys. 1 można napisać

$$\frac{a}{a'} = \frac{b}{b'} = \frac{c}{c'} = \frac{d}{d'} = C = const$$

gdzie wielkość C nosi nazwę stałej podobieństwa.

Dla przedstawionych na rys. 1 trójkątów można także napisać:

$$\frac{a}{d} = \frac{a'}{d'} = I_1; \frac{b}{d} = \frac{b'}{d'} = I_2; \frac{c}{d} = \frac{c'}{d'} = I_3$$

Wielkości I_1, I_2, I_3 noszą nazwę inwariantów i zostały otrzymane przez podzielenie długości boków każdego z trójkątów przez długość odcinków d i d' przyjętych jako własna jednostka długości dla każdej z figur. Wynika stąd, że inwarianty odpowiednich odcinków figur podobnych są sobie równe. Łatwo zauważyć, że wszystkie układy podobne danego typu mogą być opisane jednym zbiorem inwariantów. Np. dla wszystkich okręgów inwariantem jest liczba π , wyrażająca stosunek obwodu do średnicy, która w tym przypadku

spełnia rolę własnej jednostki długości. Różnica między stałymi podobieństwa C a inwariantami I figur podobnych jest taka, że w danej figurze dla różnych odcinków mamy rozmaite inwarianty i tą samą stałą podobieństwa, natomiast dla wszystkich figur podobnych inwarianty odpowiednich odcinków są takie same a opisują je różne wartości C . Cechą figur podobnych jest to, że po umieszczeniu figury mniejszej wewnątrz większej można dokonując równomiernej deformacji figury większej doprowadzić do pokrycia się jej z figurą mniejszą. W obu figurach możemy znaleźć punkty odpowiadające sobie.

Pojęcie podobieństwa daje się przenieść na zjawiska fizyczne. W układzie dwóch obracających się kół sprzęgniętych paskiem klinowym można znaleźć w każdym z nich punkty odpowiadające sobie i prędkości w tych punktach będą pozostawały w tym samym stosunku co wyrazimy:

$$\frac{u_1}{u_1'} = \frac{u_2}{u_2'} = \frac{u_3}{u_3'} = C = const$$

W przypadku dwóch trójkątów większego i mniejszego, kiedy nie można w wyniku równomiernej deformacji doprowadzić do nałożenia się ich na siebie, mamy doczynienia z pokrewieństwem. Dobrym przykładem pokrewieństwa są dwie elipsy, w których stosunki odpowiednich pól nie są sobie równe. Oznaczając w dwóch przestrzennych układach pokrewnych np. elipsoidach dla wymiarów w kierunku osi x , y , z oraz x' , y' , z' odpowiednie stosunki:

$$\frac{x}{x'} = C_x; \frac{y}{y'} = C_y; \frac{z}{z'} = C_z$$

otrzymamy współczynniki pokrewieństwa, które dla układów pokrewnych nie są sobie równe:

$$C_x \neq C_y \neq C_z$$

3. KRYTERIA PODOBIENSTWA

3.1. Podobieństwo dynamiczne

Dążąc do zachowania podobieństwa zjawisk zachodzących w różnych układach należy zachować podobieństwo pól fizycznych wielkości, od których zależy przebieg tych zjawisk. Polem fizycznym w ogólnym przypadku nazywa się zbiór wartości określonej wielkości fizycznej w dowolnym punkcie

rozpatrywanego układu (np. pole temperatur określa temperaturę w dowolnym punkcie wyodrębnionego obszaru).

W procesach krystalizacji, np. metodą Czochralskiego, zawsze mamy doczynienia z ruchem masy i wymianą ciepła. Wymiana ciepła dokonuje się przy określonych i niezbędnych dla procesu wzrostu kryształu gradientach temperatury. Istnieje więc pewne pole temperatur a gradienty temperatury są przyczyną wystąpienia różnic gęstości masy co wywołuje jej ruch z określoną prędkością.

Przepływ cieczy w ogólnym przypadku opisuje równanie ciągłości strumienia i równanie Naviera-Stokesa. Zakładając dla uproszczenia rachunków nieściśliwość cieczy i ruch wyłącznie w kierunku osi x napiszemy:

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0$$

$$\rho \frac{\partial u_x}{\partial t} + \rho \left(u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) = \rho g_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \Delta u_x$$

gdzie u oznacza prędkość liniową, x, y, z - współrzędne przestrzenne, ρ - gęstość cieczy, t - czas, g - przyspieszenie ziemskie, μ - dynamiczny współczynnik lepkości.

Przyjmijmy, że istnieje inny przepływ opisany tym samym równaniem ale przy innych wartościach zmiennych $u', x', y', z', \rho', t', g', \mu'$.

Zapiszemy

$$\frac{\partial u_x'}{\partial x'} + \frac{\partial u_y'}{\partial y'} + \frac{\partial u_z'}{\partial z'} = 0$$

$$\rho' \frac{\partial u_x'}{\partial t'} + \rho' \left(u_x' \frac{\partial u_x'}{\partial x'} + u_y' \frac{\partial u_y'}{\partial y'} + u_z' \frac{\partial u_z'}{\partial z'} \right) = \rho' g_x' - \frac{\partial p'}{\partial x'} + \mu' \Delta u_x'$$

Zakładając podobieństwo obu przepływów współczynniki pokrewieństwa parametrów wywierających wpływ na przepływ wyrazimy następująco:

$$\frac{x'}{x} = \frac{y'}{y} = \frac{z'}{z} = \frac{t'}{t} = C_l - \text{współczynnik pokrewieństwa wymiaru}$$

$$\frac{t'}{t} = C_t; \frac{u'}{u} = C_u; \frac{\rho'}{\rho} = C_\rho; \frac{g'}{g} = C_g; \frac{p'}{p} = C_p; \frac{\mu'}{\mu} = C_\mu$$

gdzie $C_t, C_u, C_\rho, C_g, C_p, C_\mu$ są współczynnikami pokrewieństwa odpowiednio: czasu, prędkości liniowej, gęstości, przyspieszenia ziemskiego, lepkości dynamicznej.

Wykorzystując współczynniki pokrewieństwa, zmienne drugiego przepływu możemy wyrazić:

$$l' = C_l \cdot l; t' = C_t \cdot t; u' = C_u \cdot u$$

$$\rho' = C_\rho \cdot \rho; g' = C_g \cdot g; p' = C_p \cdot p; \mu' = C_\mu \cdot \mu$$

i równania dla tego przypadku przyjmą postać:

$$\frac{C_u}{C_l} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) = 0$$

$$\begin{aligned} \frac{C_\rho \cdot C_u}{C_l} \cdot \rho \frac{\partial u_x}{\partial t} + \rho \frac{C_\rho \cdot C_u^2}{C_l} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) = \\ = C_\rho \cdot C_g \cdot \rho \cdot g_x - \frac{C_p}{C_l} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{C_\mu \cdot C_u}{C_l^2} \mu \Delta u_x \end{aligned}$$

Równania dla obu przypadków będą takie same jeżeli

$$\frac{C_\rho \cdot C_u}{C_l} = \frac{C_\rho \cdot C_u^2}{C_l} = C_\rho \cdot C_g = \frac{C_p}{C_l} = \frac{C_\mu \cdot C_u}{C_l^2}$$

Z dwóch pierwszych wyrazów otrzymamy

$$\frac{C_u \cdot C_l}{C_l} = 1$$

a po uwzględnieniu, że $C_u = \frac{u'}{u}$; $C_l = \frac{t'}{t}$; $C_l = \frac{l'}{l}$;

zapiszemy

$$\frac{u' \cdot t'}{x'} = \frac{u \cdot t}{x} = \frac{u \cdot t}{l} = S$$

Z kolejnych zależności

$$\frac{C_\rho \cdot C_u^2}{C_l} = C_\rho \cdot C_g; \frac{C_\rho \cdot C_u^2}{C_l} = \frac{C_p}{C_l}; \frac{C_\rho \cdot C_u^2}{C_l} = \frac{C_\mu \cdot C_u}{C_l^2}$$

w taki sam sposób uzyskamy:

$$\frac{g \cdot l}{u^2} = Fr ; \quad \frac{\Delta p}{\rho \cdot u^2} = Eu ; \quad \frac{u \cdot l \cdot \rho}{\mu} = Re$$

Te cztery wyrażenia, zestawione z fizycznych parametrów, decydujących o charakterze zjawiska, stanowią kryteria lub moduły podobieństwa, których równość w dwóch przypadkach wskazuje na ich podobieństwo pod pewnym względem.

Mamy:

- S - liczba Strouhala charakteryzuje nieustalony charakter przepływu,
- Fr - liczba Froude'a wyraża podobieństwo przepływu pod działaniem sił ciężkości,
- Eu - liczba Eulera określa podobieństwo przepływu pod działaniem różnicy ciśnienia p,
- Re - liczba Reynoldsa określa podobieństwo przepływu pod działaniem sił bezwładności i sił tarcia wewnętrznego.

Liczba Reynoldsa jest jedną z najczęściej spotykanych w literaturze liczb kryterialnych. Wartość jej zależy od szybkości liniowej płynu, wymiaru liniowego np. średnicy strumienia, gęstości płynu i współczynnika lepkości. Dla wartości Re poniżej 2100 występuje ruch laminarny, w którym obserwuje się warstwowy przepływ bez mieszania w obrębie strumienia. Wartości Re ponad 2100 do ok. 2700 opisują przejściowy charakter przepływu, w którym pojawiają się i zanikają zawirowania w pewnych miejscach wewnątrz przemieszczającego się płynu. Wartości Re ponad 2700 charakteryzują burzliwy lub inaczej turbulentny przepływ z całkowitym mieszaniem się w całym obszarze strumienia. Równość liczb Re jako jednoimiennych kryteriów dla dwóch różnych strumieni i różnych płynów wskazuje na podobieństwo przepływu lub, że zjawiska zachodzące w obu przepływach są takie same.

Pierwsze twierdzenie podobieństwa mówi, że **jednoimiennie kryteria podobieństwa zjawisk podobnych są sobie równe.**

Wyprowadzone liczby kryterialne są wielkościami bezwymiarowymi wyrażone parametrami fizycznymi mającymi wpływ na przebieg rozpatrywanego zjawiska. Zamiast opisującego przepływ równania różniczkowego, którego rozwiązanie może okazać się trudne lub w pewnych przypadkach niemożliwe możemy posłużyć się funkcją $\Phi(S, Fr, Eu, Re)$. Nie jest przy tym konieczne by wszystkie cztery liczby kryterialne były sobie równe. Jeżeli

równe są liczby, które w danym przypadku decydują o charakterze zjawiska zachodzi podobieństwo dla dwóch rozpatrywanych przypadków.

Drugie twierdzenie podobieństwa głosi, że **układ równań opisujących zjawisko fizyczne można przedstawić za pomocą związku funkcjonalnego między bezwymiarowymi kryteriami podobieństwa.**

Wprowadzone liczby kryterialne dotyczące przepływu nie wyczerpują wszystkich przypadków ruchu płynu. W pewnych sytuacjach można posłużyć się innymi liczbami otrzymanymi w wyniku pomnożenia lub podzielenia przez siebie liczb znamionnych. Ruch płynu pod działaniem sił ciężkości i sił tarcia wewnętrznego można przedstawić liczbą Galileusza, którą otrzymuje się mnożąc liczbę Froude'a przez kwadrat liczby Reynoldsa:

$$Ga = \frac{g \cdot l^3}{\nu^2}$$

gdzie $\nu = \frac{\mu}{\rho}$ jest kinematycznym współczynnikiem lepkości.

W wyrażeniu na liczbę Ga nie występuje prędkość liniowa, której pomiar mógłby okazać się trudny.

Ruch cieczy wywołany różnicą gęstości charakteryzuje liczba Archimedes, będąca iloczynem liczby Galileusza i współczynnika gęstości:

$$Ar = Ga \cdot \frac{\rho - \rho_0}{\rho}$$

W przypadku gdy różnica gęstości spowodowana jest różnicą temperatur bezwymiarowy współczynnik $\frac{\rho - \rho_0}{\rho}$ można zastąpić współczynnikiem rozszerzalności objętościowej

$$\frac{\rho - \rho_0}{\rho} = \beta \Delta T$$

Otrzymamy wówczas liczbę Grashofa

$$Gr = Ga \cdot \beta \Delta T$$

$$Gr = g l^3 \beta \Delta T \nu^{-2}$$

Te trzy liczby: Galileusza, Archimedes i Grashofa określają podobieństwo ruchu cieczy, wywołanego różnicą gęstości.

3.2. PODOBIENSTWO CIEPLNE

W dowolnym układzie występuje przepływ ciepła opisywany równaniem przenikania ciepła

$$\frac{\alpha}{\lambda} = -\frac{\partial T}{\partial y} \cdot \frac{1}{\Delta T}$$

i równaniem przewodzenia ciepła

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u_x \frac{\partial T}{\partial x} + u_y \frac{\partial T}{\partial y} + u_z \frac{\partial T}{\partial z} = a \Delta T$$

gdzie α oznacza współczynnik przenikania ciepła, $a = \frac{\lambda}{C_p \cdot \gamma}$ lub dyfuzyjność cieplną, λ - współczynnik przewodzenia ciepła, C_p - ciepło właściwe, γ - ciężar właściwy.

Takie same równania z innymi wartościami α' , T' , t' , u'_x , u'_y , u'_z , a' opisują drugi przypadek przepływu ciepła. Zakładamy, że zachowane jest podobieństwo geometryczne i hydrodynamiczne.

Zmienne w równaniach dla drugiego przypadku przepływu ciepła wyrazimy za pomocą współczynników pokrewieństwa

$$\alpha' = C_\alpha \alpha; T' = C_T T; t' = C_t t; u' = C_u u;$$

$$a' = C_a a; \lambda' = C_\lambda \lambda; x' = C_x x; y' = C_y y; z' = C_z z$$

$$\text{gdzie: } C_\alpha \neq C_T \neq C_t \neq C_u \neq C_a \neq C_\lambda \neq C_1$$

i równania dla drugiego przypadku zapiszemy następująco:

$$\frac{C_\alpha \alpha}{C_\lambda \lambda} = -\frac{\partial T}{C_1 \partial y} \cdot \frac{1}{\Delta T}$$

$$\frac{C_T}{C_t} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{C_u \cdot C_t}{C_1} \left(u_x \frac{\partial T}{\partial x} + u_y \frac{\partial T}{\partial y} + u_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) = \frac{C_a \cdot C_t}{C_1^2} a \Delta T$$

Identyczność równań dla obu przypadków wystąpi gdy skrócą się wyrażenia zawierające stałe pokrewieństwa to znaczy gdy:

$$\frac{C_T}{C_t} = \frac{C_u \cdot C_t}{C_1} = \frac{C_a \cdot C_t}{C_1^2} \text{ oraz } C_\alpha = \frac{C_\lambda}{C_1}$$

Porównując pierwsze dwie grupy współczynników otrzymamy:

$$\frac{C_T}{C_t} = \frac{C_u C_T}{C_1} ; \frac{C_u C_t}{C_1} = 1$$

a porównując pierwszą grupę i trzecią będziemy mieli

$$\frac{C_T}{C_t} = \frac{C_a C_T}{C_1^2} ; \frac{C_a C_t}{C_1^2} = 1$$

Z porównania grupy drugiej i trzeciej otrzymamy

$$\frac{C_u C_T}{C_t} = \frac{C_a C_T}{C_1^2} ; \frac{C_u C_1}{C_1^2} = 1$$

a z równości ostatniej

$$\frac{C_a C_1}{C_\lambda} = 1$$

Podstawiając

$$C_a = \frac{\alpha'}{\alpha} ; C_T = \frac{T'}{T} ; C_t = \frac{t'}{t} ; C_u = \frac{u'}{u} ; C_a = \frac{a'}{a} ; C_\lambda = \frac{\lambda'}{\lambda}$$

otrzymamy następujące kryteria podobieństwa:

$\frac{u \cdot t}{l} = S$ - liczba Strouhala (otrzymana wcześniej przy omawianiu podobieństwa przepływu) charakteryzuje nieustalony charakter przepływu.

$\frac{a \cdot t}{l^2} = Fo$ - liczba Fouriera charakteryzuje podobieństwo pól temperaturowych układów przy nieustalonej wymianie ciepła.

$\frac{u \cdot l}{a} = Pe$ - liczba Pécleta określa udział przewodnictwa i konwekcji w procesie wymiany ciepła.

$\frac{\alpha \cdot l}{\lambda} = Nu$ - liczba Nusselta wyraża podobieństwo przenikania ciepła.

Podstawiając w wyrażeniu na liczbę Pecleta wartość dyfuzyjności cieplnej $a = \frac{\lambda}{C_p \gamma}$ i mnożąc licznik i mianownik przez iloczyn μg otrzymamy

$$Pe = \frac{u l}{a} = \frac{u l C_p \gamma}{\lambda} \cdot \frac{\mu g}{\mu g} = \left(\frac{u l \gamma}{\mu g} \right) \left(\frac{C_p \mu g}{\lambda} \right)$$

Pierwszy wyraz iloczynu jest wyprowadzoną wcześniej liczbą Reynoldsa

$$Re = \frac{u l \gamma}{\mu g}$$

drugi wyraz przedstawia wartość liczby Prandtla

$$Pr = \frac{C_p \mu g}{\lambda} = \frac{\nu}{a}$$

opisującej własności fizyczne płynu w procesie wymiany ciepła.

Monożąc otrzymaną wcześniej liczbę Grashofa przez liczbę Prandtla otrzymuje się liczbę Rayleigha

$$Ra = Gr \cdot Pr$$

opisującą ruch cieczy spowodowany różnicą gęstości. Liczba Ra uwzględnia własności fizyczne cieczy w procesie wymiany ciepła wywołujący różnicę gęstości.

Wprowadzając do wyrażenia na liczbę Pécleta w miejsce dyfuzyjności cieplnej współczynnik dyfuzji D otrzymuje się dyfuzyjną liczbę Pécleta

$$Pe_{\text{dyf}} = \frac{u l}{D}$$

charakteryzującą podobieństwo procesów dyfuzji w kontakcie strumienia płynu z fazą stałą.

Warunki wymiany ciepła ciało stałe - otoczenie (np. stygnąca płyta o dużej grubości $2S$ przy stałej temperaturze ośrodka) przedstawia liczba Biota, wyrażająca stosunek oporu wnikania ciepła do oporu przewodzenia:

$$Bi = \frac{\alpha s}{\lambda}$$

gdzie s jest wymiarem poprzecznym (dotyczy ciała stałego).

Rosnący kryształ w układzie Czochralskiego odprowadza ciepło z frontu krystalizacji na drodze przewodnictwa, które następnie oddaje przez boczne

ścianki do otoczenia. Mała wartość liczby Biota (wówczas $S = R$ - promień kryształu) wskazuje, że ciepło z frontu krystalizacji jest odprowadzane na drodze przewodnictwa i temperatura w strefie chłodnego końca kryształu jak i jego długość wywierają wpływ na warunki cieplne w obszarze wzrostu. Większa wartość liczby Biota zwykle ponad 0,20, wskazuje, że ciepło jest z łatwością oddawane z bocznych powierzchni kryształu i jego długość nie wpływa w istotny sposób na wymianę ciepła w pobliżu powierzchni międzyfazowej.

Dla metali wartości liczby Bi są rzędu $10^{-3} - 10^{-2}$ np. dla germanu $Bi = 8 \times 10^{-3}$, dla materiałów tlenkowych wartości Bi są rzędu jedności.

Podobieństwo procesów przenikania masy charakteryzują liczby:

$$\frac{k_c \cdot l}{D} = Sh \quad - \text{liczba Sherwooda określa podobieństwo}$$

przenikania masy w pobliżu granicy faz, wyrażona stosunkiem iloczynu współczynnika przenikania masy k_c [$\text{m} \cdot \text{godz}^{-1}$], odniesionego do stężenia i wymiaru liniowego, do wartości współczynnika dyfuzji D [$\text{m}^2 \cdot \text{godz}^{-1}$],

$$\frac{\mu}{\rho \cdot D} = \frac{\nu}{D} = Sc \quad - \text{liczba Schmidta opisuje podobieństwo własności}$$

fizycznych czynników w procesie wymiany masy będąca odpowiednikiem liczby Prandtla w procesie wymiany ciepła i oznaczona czasem jako Pr_{dyf} ,

$$\frac{a}{C_p \rho u} = Mo = Co \quad - \text{liczba Margulesa lub Colborna opisuje podobieństwo zjawisk wymiany ciepła w kierunku prostopadłym do kierunku przepływu.}$$

Liczbę Margulesa można przedstawić jako:

$$Mo = \frac{Nu}{Re \cdot Pr} = \frac{Nu}{Pe}$$

$$\frac{a}{D} = Le \quad - \text{liczba Lewisa wyraża stosunek dyfuzyjności cieplnej do współczynnika dyfuzji i opisuje jednoczesne przenoszenie ciepła i masy. Dla większości układów gaz-ciecz Le jest rzędu jedności, tj. od 0,5 do 3.}$$

Przedstawiono powyżej tylko najczęściej spotykane liczby kryterialne pomijając te, które na ogół nie znajdują zastosowania w procesach monokryształizacji.

4. ELEMENTY PODOBIENSTWA W UKŁADZIE WZROSTU METODĄ CZOCHRALSKIEGO

Powiększenie skali procesu wzrostu metodą Czochralskiego w celu wytwarzania kryształów większych wiąże się z koniecznością zastosowania większego tygla. Pociąga to za sobą przebudowę całego układu cieplnego. Zmieniają się warunki wymiany ciepła, zmienia się charakter ruchu masy w tyglu. Inaczej formują się strumienie konwekcyjne roztopu, odmiennie kształtuje się pole temperatur na jego powierzchni, zmienia się rozkład temperatury w obszarze nad tygłem. Przy zwiększonej masie kryształu powstającej w jednostce czasu, w obszarze wzrostu wydziela się większa ilość ciepła, która musi być odprowadzona przez kryształ i oddana z jego powierzchni do otoczenia.

Wymienione czynniki będą wpływały na przebieg zjawisk zachodzących na froncie krystalizacji podczas gdy odpowiednie dla danego materiału fizykochemiczne warunki tworzenia się monokryształicznej fazy stałej muszą być zachowane niezależnie od skali procesu.

Kierunek przepływu ciepła od ścianek tygla w głąb roztopu występuje przy określonym spadku temperatury. Tworzy się pewien poziomy gradient temperatury wywołujący ruch roztopu do góry i dalej po powierzchni w kierunku środka gdzie następuje opadanie. Obraz taki jest pewnym uproszczeniem, w którym pomija się wpływ wymiarów tygla wyrażanych zwykle stosunkiem wysokości H do średnicy D . Przy zachowaniu odpowiedniego stosunku H/D przedstawiony zarys konwekcji naturalnej jest bliski rzeczywistości.

Charakter naturalnego ruchu konwekcyjnego roztopu w tyglu, spowodowany różnicą temperatur przy ścianie i w części środkowej, można opisać liczbą Grashofa, która w tym przypadku przyjmie postać

$$Gr = g \Delta T \beta R^3 \nu^{-2}$$

gdzie g oznacza przyspieszenie ziemskie, T - różnicę temperatur przy ścianie tygla i punkcie środkowym na powierzchni roztopu, R - promień tygla, β - współczynnik rozszerzalności objętościowej roztopu, ν - kinematyczny współczynnik lepkości.

Dążąc do utrzymania podobieństwa przepływu roztopu w mniejszym i większym tyglu należy zachować równość liczb Gr dla obu przypadków. Wówczas otrzymamy:

$$\Delta T_d = \Delta T_m \cdot \frac{R_m^3}{R_d^3}$$

gdzie T_d jest odpowiednią różnicą temperatur w większym tyglu, T_m - odpowiednią różnicą temperatur w mniejszym tyglu, R_m , R_d - promieniami odpowiednio tygla mniejszego i większego.

Znając ΔT_m z bezpośredniego pomiaru w małym tyglu można określić ΔT_d . Odpowiednia różnica temperatur winna być mniejsza i fakt ten należy uwzględnić przy konstruowaniu układu cieplnego w większej skali.

Modelem kryształu obracającego się podczas wzrostu jest wirujący w cieczy dysk. Warstwa cieczy w pobliżu dysku, a w metodzie Czochralskiego warstwa roztopu przenoszona jest równolegle po powierzchni siłami tarcia i odrzucana na zewnątrz pod działaniem siły odśrodkowej. W osi wirującego kryształu występuje ruch roztopu skierowany prostopadłe na płaszczyznę, a więc przeciwnie do kierunku konwekcji naturalnej. Ruch roztopu wywołany obrotami kryształu nosi nazwę konwekcji wymuszonej. Intensywność tego ruchu charakteryzuje liczba Reynoldsa, którą dla tego przypadku można wyrazić

$$Re = \frac{\pi d^2 \omega}{\nu}$$

gdzie d oznacza średnicę kryształu, ω - szybkość obr./min, ν - kinematyczny współczynnik lepkości.

W celu zachowania zbliżonych warunków przepływu roztopu wymuszonego obrotami kryształu należy zachować równość liczb Re. Znając ustalone doświadczalnie w mniejszej skali optymalne obroty dla kryształu o mniejszej średnicy, można z dobrym przybliżeniem przewidzieć właściwe obroty dla kryształu o większym przekroju.

Przewaga konwekcji naturalnej nad konwekcją wymuszoną sprawia, że podczas wzrostu tworzy się w kierunku roztopu wypukły front krystalizacji. Przewaga konwekcji wymuszonej jest przyczyną formowania się frontu wklęsłego. W zdecydowanej większości przypadków wzrostu obie sytuacje z punktu widzenia jakości kryształów są niewskazane. Zachowanie równości $Re^2 = Gr$ sprzyja tworzeniu się płaskiej powierzchni rozdziału faz.

Z szybkością wzrostu wiąże się, wspomniana wcześniej ilość wydzielającego się ciepła krystalizacji, oraz pewna ilość wydzielającego się ciepła wynikająca z obniżenia się temperatury roztopu do temperatury krystalizacji w trakcie tworzenia się fazy stałej. Ilość wydzielanego ciepła jest proporcjonalna do powstającej w jednostce czasu masy, która jest proporcjonalna do iloczynu $R^2 \cdot f$ (f - szybkość wyciągania). Powierzchnia wymiany ciepła z otoczeniem jest proporcjonalna do $R \cdot f$. Obciążenie cieplne jednostki powierzchni kryształu o większym promieniu przy zachowaniu tej samej szybkości wyciągania byłoby większe. Jest to zjawisko niekorzystne mogące prowadzić do wzrostu naprężeń wewnątrz kryształu. Konieczność obniżenia szybkości wyciągania a tym samym szybkości wzrostu jest więc oczywista.

Wielkość powstających naprężeń jest proporcjonalna do iloczynu współczynnika rozszerzalności β , promienia kryształu R i różnicy temperatury kryształu i otoczenia $T_k - T_o$

$$\varepsilon \approx \beta R (T_k - T_o)$$

Obniżenie naprężeń przy założonym promieniu kryształu może polegać jedynie na zmniejszeniu różnicy $T_k - T_o$ a więc na podwyższeniu T_o co także prowadzi do obniżenia szybkości wzrostu ale także do innego ukształtowania rozkładu temperatury w przestrzeni otaczającej kryształ.

Z wymianą ciepła wiąże się szybkość chłodzenia kryształu po zakończeniu krystalizacji. Ilość ciepła, którą należy odprowadzić jest proporcjonalna do masy kryształu. Pamiętając o niekorzystnym stosunku powierzchni zewnętrznej do masy, w przypadku kryształów większych szybkość chłodzenia winna być odpowiednio wolniejsza.

5. PODSUMOWANIE

Przedstawione w ograniczonej formie założenia teorii podobieństwa zjawisk stanowią podstawę uogólniania wniosków wynikających z doświadczeń. Na podstawie praw podobieństwa, znając warunki realizacji procesu technologicznego w małej skali układu doświadczalnego można z dobrym przybliżeniem przewidzieć sposób jego realizacji w większym wymiarze. Zmiany skali bez stosowania teorii podobieństwa są zdecydowanie trudniejsze, wiążą się z ryzykiem popełniania poważnych błędów, przedłużają czas badań i zwiększają koszty.

Stosowanie zasad podobieństwa może się w praktyce okazać trudne, choćby ze względu na brak potrzebnych parametrów, których uzyskanie może być kłopotliwe, a czasem wręcz niewykonalne.

Na przykład, określenie rzeczywistego rozkładu temperatury podczas wzrostu kryształu metodą Czochralskiego, wyznaczenie wartości współczynnika lepkości, określenie zmian lepkości w funkcji temperatury materiałów wysokotopliwych, może stanowić bardzo poważny problem. Także zachowanie równości odpowiednich dla danego procesu wszystkich liczb kryterialnych w porównywalnych układach nie zawsze jest możliwe, co sprawia, że stopień dokładności wyników jest obniżony. Mimo to korzyści, jakie daje stosowanie zasad podobieństwa w pracach technologicznych, są bezsporne.

6. BIBLIOGRAFIA

- [1] Bretsznajder S.: Matematyczne i matematyczno-fizyczne metody projektowania. Warszawa PWT 1956
- [2] Bennet C. O., J. E. Myers: Przenoszenie Pędu Ciepła i Masy. Warszawa: WNT 1967
- [3] Carruthers J. R.: Flow transitions and interface shapes in the Czochralski growth of oxide crystals. *J. Cryst. Growth* 36, 1976, 2, 212
- [4] Carruthers J. R.: Origins of convective temperature oscillations in crystal growth melts. *J. Cryst. Growth* 32, 1976, 1, 13
- [5] Takagi K., Fukazawa T., Ishii M.: Inversion of the direction of the solid-liquid interface on the Czochralski growth of GGG crystals. *J. Cryst. Growth* 32, 1976, 1, 89
- [6] Berkowski M., Iliev K., Nikolov V., Peshev P., Piekarczyk W.: On the conditions of information of a flat crystal/melt interface during Czochralski growth of single crystals. *J. Cryst. Growth* 83, 1987, 4, 507
- [7] Brice J.C.: Analysis of the temperature distribution in pulled crystals. *J. Cryst. Growth* 2, 1968, 395