

## Разработка методики расчета температурных и термоупругих полей в процессе роста сапфира

*Ю.В. Клуникова*

*Южный федеральный университет,  
Институт нанотехнологий, электроники и приборостроения, Таганрог*

**Аннотация:** В статье представлена методика расчета температурных и термоупругих полей в процессе роста кристаллов сапфира методом горизонтальной направленной кристаллизации. Реализация предложенной методики позволяет с помощью вычислительного эксперимента провести анализ изменений температурных и термоупругих полей в кристалле, зависящих от пространственных и геометрических характеристик нагревателей, и на основании анализа провести перераспределение дефектов в сапфире, тем самым повысив качество выращиваемых кристаллов.

**Ключевые слова:** сапфир, температурные поля, термоупругие напряжения, метод горизонтальной направленной кристаллизации, методика, вычислительный эксперимент.

Одним из важных факторов, влияющих на качество кристаллов и производительность процесса выращивания из расплава, является распределение температуры в кристаллах в процессе их выращивания. Метод горизонтальной направленной кристаллизации (ГНК) позволяет получать кристаллы сапфира большого сечения. В случае выращивания кристаллов сапфира методом ГНК возникают дополнительные трудности из-за сложной геометрии тепловой зоны и возросшей роли излучения в переносе тепла внутри кристалла сапфира. Уровень термонапряжений и концентрацию дислокаций в кристаллах можно снизить на 10 – 15 % путем изменения конфигурации и температуры тепловой зоны. Следовательно, проблема управления температурными и термоупругими полями в кристаллах сапфира в настоящее время является актуальной.

Для проектирования и оптимизации ростовой установки для выращивания монокристаллов сапфира может быть использован метод вычислительного эксперимента с целью анализа температурных и термоупругих полей в кристалле сапфира. Расчеты по проектированию нагревателей установки для роста сапфира должны быть выполнены с учетом

полей деформаций, перемещений и напряжений в кристалле. Таким образом, математическое моделирование и расчеты должны проводиться для всех уравнений, входящих в систему (уравнения теплопроводности и термоупругости).

Уравнения термоупругости и теплопроводности [1-15] для учета влияния температур в процессе роста кристаллов сапфира на уровень термоупругих напряжений в кристалле записываются в виде:

$$\begin{cases} \mu\Delta u + (\lambda + \mu) \frac{\partial \delta}{\partial x} = -\frac{\partial(\alpha T)}{\partial x} - F_x, \\ \mu\Delta u + (\lambda + \mu) \frac{\partial \delta}{\partial y} = -\frac{\partial(\alpha T)}{\partial y} - F_y, \\ \mu\Delta u + (\lambda + \mu) \frac{\partial \delta}{\partial z} = -\frac{\partial(\alpha T)}{\partial z} - F_z, \\ \operatorname{div}(a_i \operatorname{grad} T_i(x, y, z)) = 0, \end{cases} \quad (1)$$

где  $u, v, w$  – компоненты перемещения;  $\alpha$  – коэффициент объемного теплового расширения;  $\lambda$  и  $\mu$  – коэффициенты Ламе;  $\delta = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z}$ ,  $F_x, F_y, F_z$  – компоненты объемных сил,  $a_i$  – коэффициент теплопроводности,  $T$  – текущая температура,  $\Delta$  – оператор Лапласа.

Для моделирования внутренних термоупругих напряжений в процессе получения сапфира требуются граничные условия, имеющие обобщенный вид. Автором определены граничные условия для системы уравнений (1) в виде следующих соотношений для температур:

$$a_1 \frac{\partial T_1(x_T, y, z)}{\partial x} = a_2 \frac{\partial T_2(x_T, y, z)}{\partial x}, \quad (2)$$

$$a_2 \frac{\partial T_2(x_T + \Delta x, y, z)}{\partial x} = a_3 \frac{\partial T_3(x_T + \Delta x, y, z)}{\partial x}, \quad (3)$$

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

и для перемещений

$$\frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0, \quad (5)$$

$$u = v = w = 0, \quad (6)$$

где  $\sigma$  – постоянная Стефана-Больцмана;  $\beta$  – коэффициент излучения кристалла, расплава, шихты;  $T_{\text{hot}}$  – функция, задающая распределение температуры на кристаллизаторах;  $\varphi = \{u, v, w\}$ .

Разработана методика расчета температур, перемещений, деформаций, напряжений в процессе получения кристаллов сапфира методом ГНК на основании уравнений (1) и граничных условий (2) – (6).

1. Ввод исходных данных: длина, высота и ширина тигля, плотность, теплопроводность, удельная теплоемкость материалов, коэффициенты Ламе и ряд других.

2. Расчет распределения температур в процессе получения кристаллов сапфира.

2.1. Расчет погрешности температур по выражению:

$$\Delta' = \frac{T^{(r)} - T^{(r-1)}}{T^{(r)}}, \quad (7)$$

где  $T^{(r-1)}$  – температура, рассчитанная на  $r-1$  шаге;  $T^{(r)}$  – температура, рассчитанная на  $r$  шаге;  $\Delta'$  – относительная погрешность  $r$  шага.

2.2. Сравнение погрешности, рассчитанной в пункте 2.1 с заданной  $\Delta'_0$ . Если  $\Delta' > \Delta'_0$  то переход в пункт 2, иначе в пункт 2.3.

2.3. Расчет градиентов температур в процессе получения кристаллов сапфира методом наименьших квадратов.

3. Расчет перемещений в первом приближении в процессе получения кристаллов сапфира.

3.1. Расчет погрешности перемещения по выражению:

$$\Delta'' = \frac{u^{(n)} - u^{(n-1)}}{u^{(n)}}, \quad (8)$$

где  $u^{(n-1)}$  – перемещение, рассчитанное на n-1 шаге;  $u^{(n)}$  – перемещение, рассчитанная на n шаге;  $\Delta''$  – относительная погрешность n шага.

3.2. Сравнение погрешности, рассчитанной в пункте 3.1 с заданной  $\Delta''_0$ . Если  $\Delta'' > \Delta''_0$  то переход в пункт 3, иначе в пункт 3.3.

3.3. Расчет градиентов перемещений методом наименьших квадратов и решение уравнения термоупругости с учетом градиентов перемещений.

3.4. Расчет погрешности перемещений, полученных с учетом градиентов перемещений, в соответствии с выражением:

$$\Delta''' = \frac{u'^{(m)} - u'^{(m-1)}}{u'^{(m)}}, \quad (9)$$

где  $u'^{(m-1)}$  – перемещения с учетом градиентов перемещений, рассчитанные на m-1 шаге;  $u'^{(m)}$  – перемещения с учетом градиентов перемещений, рассчитанные на m шаге;  $\Delta'''$  – относительная погрешность m шага.

3.5. Сравнение погрешности, рассчитанной в пункте 3.4 с заданной  $\Delta'''_0$ . Если  $\Delta''' > \Delta'''_0$  то переход в пункт 3.3, иначе в пункт 4.

4. Расчет деформаций в процессе получения кристаллов сапфира на основе полученных перемещений.

5. Расчет напряжений в процессе получения кристаллов сапфира на основании полученных деформаций.

6. Вывод результатов.

Для реализации представленной методики проведено трехмерное численное моделирование распределения температур, перемещений, деформаций и термоупругих напряжений на различных стадиях роста кристаллов сапфира методом контрольных объемов на неструктурированной сетке с учетом распределения температур в процессе роста кристаллов сапфира.

---



Таким образом, разработана методика моделирования и трехмерная численная модель для расчета полей температур, перемещений, деформаций и напряжений на различных стадиях роста сапфира методом горизонтальной направленной кристаллизации, что позволяет с помощью вычислительного эксперимента провести анализ изменений температурных и термоупругих полей в кристалле, зависящих от пространственных и геометрических характеристик нагревателей, и на основании анализа провести перераспределение дефектов в сапфире, тем самым повысив качество выращиваемых кристаллов.

Результаты получены с использованием оборудования Научно-образовательного центра «Лазерные технологии», Центра коллективного пользования и Научно-образовательного центра «Нанотехнологии», Института нанотехнологий, электроники и приборостроения Южного федерального университета (г. Таганрог).

Статья написана в рамках выполнения проекта ФЦП Россия № 14.587.21.0025. Уникальный идентификатор проекта RFMEFI58716X0025.

### Литература

1. Мелан Э., Паркус Г. Термоупругие напряжения, вызываемые стационарными температурными полями. Москва: ФИЗМАТЛИТ, 1958. 165 с.
2. Розин Л.А. Задачи теории термоупругости и численные методы их решения. Санкт-Петербург: СПбГТУ, 1998. 532 с.
3. Розенберг О.А., Сохань С.В., Залого В.А., Криворучко Д.В., Дегтярев И.М. О выборе параметров сборных компонентов подвижного соединения эндопротеза тазобедренного сустава // Вісник СумДУ. Серія “Техічні науки”. 2009. № 4. С. 156-169.



4. Cherednichenko D.I., Malyukov S.P., Klunnikova Yu.V. Sapphire: Structure, Technology and Applications. USA: Nova Science Publishers, 2013. pp. 101-118.

5. Бахолдин С.И., Галактионов Е.В., Крымов В.М. Термоупругие напряжения, действующие в базисной и призматической системах скольжения при выращивании лент лейкосапфира нулевой и 900-ной ориентаций // Известия академии наук. Серия физическая. 1999. Т. 63. № 9. С. 1816-1824.

6. Malyukov S.P., Klunnikova Yu.V. Advanced Materials // Springer Proceedings in Physics. 2014. V. 152. pp. 55-69.

7. Босин М.Е., Звягинцева И.Ф., Звягинцев В.Н., Лаврентьев Ф.Ф., Никифорова В.Н. Стартовое напряжение для начала движения дислокаций в монокристаллах рубина // Физика твердого тела. 2004. Т. 46. № 5. С. 834-836.

8. Никитенко В.И., Инденбом В.Л. Сопоставление напряжений и дислокаций в кристалле германия // Кристаллография. 1971. Т. 6. № 3. С. 432-438.

9. Антонов Ю.Я., Рагозин Ю.И. Импульсный метод снятия остаточных напряжений // Физика и химия обработки материалов. 2001. № 3. С. 91-95.

10. Вандакуров И.Ю., Галактионов Е.В., Юферев В.С., Крымов В.М., Барта Ч. Температурные поля и поля напряжений при выращивании оптически анизотропных кристаллов // Известия академии наук СССР. Серия физическая. 1988. № 10. Т. 52. С. 1879-1883.

11. Цветков Е.Г., Рылов Г.М., Юркин А.М. Роль дислокационных образований в релаксации локальных напряжений, вызванных структурной неоднородностью кристаллов // Кристаллография. 1999. № 2. Т. 44. С. 308-316.

12. Носов Ю.Г., Деркаченко Л.И. Последствие при испытании корунда на микротвердость // Журнал технической физики. 2003. Т. 73. № 10. С. 139-142.

13. Майстренко А.В. Тестирование программы нестационарного теплового режима конструкции // Инженерный вестник Дона, 2015, №4 URL: ivdon.ru/magazine/archive/n4y2015/3373/.

14. Александров А.А. Прогнозирование остаточных напряжений, возникающих при термообработке алюминиевых сплавов // Инженерный вестник Дона, 2015, №4 URL: ivdon.ru/magazine/archive/n4y2015/3367/.

15. Гончаров В.А., Азанова И.В., Васекин Б.В. Модель неравновесной кристаллизации для численного решения задачи роста полупроводниковых кристаллов из расплавов // Известия вузов. Электроника. 2010. № 5. С. 5-13.

### References

1. Melan Je., Parkus G. Termouprugie naprjazhenija, vyzyvajemye stacionarnymi temperaturnymi poljami [Thermoelastic tension caused by stationary temperature fields]. Moskva: FIZMATLIT, 1958. 165 p.

2. Rozin L.A. Zadachi teorii termouprugosti i chislennye metody ih reshenija [Tasks of the thermoelasticity theory and numerical methods of their decision]. Sankt-Peterburg: SPbGTU, 1998. 532 p.

3. Rozenberg O.A., Sohan' S.V., Zaloga V.A., Krivoruchko D.V., Degtjarev I.M. Visnik SumDU. Serija "Tehichni nauki". 2009. № 4. pp. 156-169.

4. Cherednichenko D.I., Malyukov S.P., Klunnikova Yu.V. Sapphire: Structure, Technology and Applications. USA: Nova Science Publishers, 2013. pp. 101-118.

5. Baholdin S.I., Galaktionov E.V., Krymov V.M. Izvestija akademii nauk. Serija fizicheskaja. 1999. T. 63. № 9. pp. 1816-1824.



6. Malyukov S.P., Klunnikova Yu.V. Advanced Materials. Springer Proceedings in Physics. 2014. V. 152. pp. 55-69.
7. Bosin M.E., Zvjaginceva I.F., Zvjagincev V.N., Lavrent'ev F.F., Nikiforenko V.N. Fizika tverdogo tela. 2004. T. 46. № 5. pp. 834-836.
8. Nikitenko V.I., Indenbom V.L. Kristallografija. 1971. T. 6. № 3. pp. 432-438.
9. Antonov Ju.Ja., Ragozin Ju.I. Fizika i himija obrabotki materialov. 2001. № 3. pp. 91-95.
10. Vandakurov I.Ju., Galaktionov E.V., Juferev V.S., Krymov V.M., Barta Ch. Izvestija akademii nauk SSSR. Serija fizicheskaja. 1988. № 10. T. 52. pp. 1879-1883.
11. Cvetkov E.G., Rylov G.M., Jurkin A.M. Kristallografija. 1999. № 2. T. 44. pp. 308-316.
12. Nosov Ju.G., Derkachenko L.I. Zhurnal tehnicheckoj fiziki. 2003. T. 73. № 10. pp. 139-142.
13. Majstrenko A.V. Inženernyj vestnik Dona (Rus), 2015, №4 URL: [ivdon.ru/magazine/archive/n4y2015/3373/](http://ivdon.ru/magazine/archive/n4y2015/3373/).
14. Aleksandrov A.A. Inženernyj vestnik Dona (Rus), 2015, №4 URL: [ivdon.ru/magazine/archive/n4y2015/3367/](http://ivdon.ru/magazine/archive/n4y2015/3367/).
15. Goncharov V.A., Azanova I.V., Vasekin B.V. Izvestija vuzov. Jelektronika. 2010. № 5. pp. 5-13.