



Сравнительный анализ процессов теплообмена при выращивании кристаллов $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$ и $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$ низкоградиентным методом Чохральского.

О.Н.Буденкова¹⁾, М.Г.Васильев¹⁾, В.Н.Шлегель²⁾, Н.В.Иванникова²⁾, Р.И.Брагин²⁾, В.В.Калаев³⁾

1) Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе РАН, С. Петербург

2) Институт неорганической химии СО РАН, Новосибирск

3) ООО Софт-Импакт, С. Петербург

Предмет исследования:

Что является причиной различного поведения фронта кристаллизации при выращивании низкоградиентным методом Чохральского кристаллов $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$ и $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$ в сходных условиях* (рис.1.)?



Кристалл $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$ Кристалл $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$

Рис.1. Типичная форма фронта кристаллизации кристалла $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$: на ранних стадиях роста прогиб фронта примерно равен радиусу, огранка отсутствует.

Кристалл $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$: фронт ограняется на ранних стадиях роста.

*К сходным условиям относятся:

- Геометрические параметры кристаллов:
 - угол разраствания
 - стационарный диаметр
- ориентация затравки
- скорости вращения и вытягивания
- одинаковые ростовые установки
- подобные температурные градиенты, используемые в процессе выращивания

Форма фронтов кристаллизации сравнивается при одинаковых длинах кристаллов.

Таблица. Теплофизические свойства соединений $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$ и $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$ в твердой и жидкой фазах.

	$\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$	$\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$	Отношение $\frac{\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}}{\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}}$
Расплав			
Температура плавления, К	1323	1203	
Плотность, кг/м ³	6710	8130	1.211
Динамическая вязкость, кг/(м·с ²)	0.044	0.017	0.38
Коэффициент объемного расширения, 10 ⁻⁴ 1/К	0.76	1.2	1.57
Теплопроводность, Вт/(м·К)	0.783	0.345	0.44
Теплоемкость, Дж/(кг·К)	356.0	390.0	
Число Прандтля	21.9	17.54	
Число Рейнольдса	149	469	3.14
Число Грасгофа ($\Delta T = 10$)	7425	84564	11.38
Кристалл			
Показатель преломления	2.15	2.35	
Коэффициент поглощения в наиболее прозрачной полосе, 1/м	3.0	45.5	15.17
Теплопроводность, Вт/(м·К)	1.2	0.18	0.15

Заключение

В работе показано, что решающим фактором, ответственным за различный прогиб фронта кристаллизации при выращивании кристаллов германата висмута в структурах эвлитина и силленита является разная величина коэффициента поглощения указанных кристаллов.

Для менее прозрачного кристалла $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$ отвод тепла излучением от межфазной границы оказывается значительно ниже, что приводит к существенно меньшему прогибу ФК.

Меньший прогиб фронта кристаллизации приводит к меньшему изгибу изотерм около межфазной границы и таким образом создаются более благоприятные условия для ее ограничения.

Возможные причины явления:

Существенно различные свойства жидких фаз $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$ и $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$ (см. Таблицу)

разные режимы течения в расплаве

различное количество теплоты, поступающее к фронту кристаллизации из расплава

Существенно различные величины коэффициентов поглощения излучения в кристалле (см. Таблицу)

различное количество теплоты, отводимое от фронта кристаллизации через кристалл.

Отвод тепла излучением от ФК через кристалл

И френелевское отражение (преломление) излучения, уходящего от ФК, на поверхности кристалла

приводят к сильному прогибу ФК на начальном этапе роста кристалла $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$ [1].

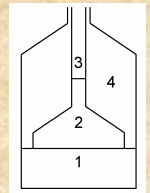


Рис.2. Схема ростовой установки: 1 – расплав, 2 – кристалл, 3 – затравкодержатель, 4 – газовый зазор

Результаты численного исследования

1. $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$

1.1. Конвекция в расплаве.

$Gr=7425$ (по радиусу тигля)
 $Ra=1.49 \cdot 10^5$

⇒ Ламинарный режим течения

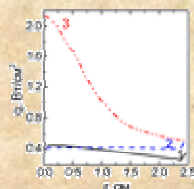


Рис.3. Тепловые потоки на фронте кристаллизации: 1 – при ламинарном течении в расплаве 2 – при турбулентном течении в расплаве 3 – тепловой поток, отводимый через кристалл

Вывод

1. Тепловые потоки, поступающие к фронту кристаллизации примерно одинаковы для ламинарного и турбулентного режимов течения расплава $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$.
2. Режим течения, скорее всего, ламинарный.

1.2. Расчет формы фронта кристаллизации при зеркально отражающей поверхности кристалла.

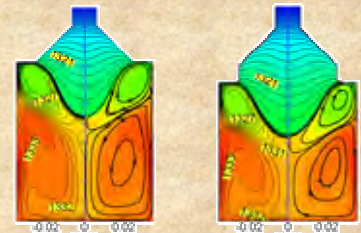


Рис.4. Рассчитанная форма ФК для $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$, температурные поля в расплаве и кристалле, линии тока в расплаве

Вывод

Прогиб фронта кристаллизации приблизительно равен радиусу кристалла, что совпадает с экспериментальными данными.

2. $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$

2.1. Конвекция в расплаве.

$Gr=8.46 \cdot 10^5$ (по радиусу тигля)
 $Ra=1.49 \cdot 10^7$

⇒ Скорее всего, турбулентный режим.

Вывод

1. Тепловые потоки, поступающие к фронту кристаллизации примерно одинаковы для ламинарного и турбулентного режимов течения расплава $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$.
2. Режим течения, скорее всего, турбулентный.

2.2. Расчет формы фронта кристаллизации при зеркально отражающей поверхности кристалла для разных режимов течения в расплаве.



Рис.6. Рассчитанная форма ФК для $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$, температурные поля в расплаве и кристалле, линии тока в расплаве

Вывод

1. Для всех режимов течения форма фронта кристаллизации примерно одинакова.
2. Прогиб фронта кристаллизации умеренный, значительно меньше, чем у кристалла $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$.

Список литературы

1. V.S.Yuferev, O.N.Budenkova, M.G.Vasiliev, et al, J. Crystal Growth 253 (2003) 383.

2.3. Расчет формы ФК для $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$ с коэффициентом поглощения в кристалле, равном коэффициенту поглощения в кристалле $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$

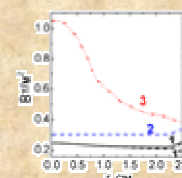


Рис.5. Тепловые потоки на фронте кристаллизации:

- 1.1' – при колебательном ламинарном течении в расплаве
- 2 – при турбулентном течении в расплаве
- 3 – тепловой поток, отводимый через кристалл

Вывод

При уменьшении величины коэффициента поглощения в кристалле $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$ до величины такой же, как в кристалле $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$, фронт кристаллизации прогибается значительно сильнее.