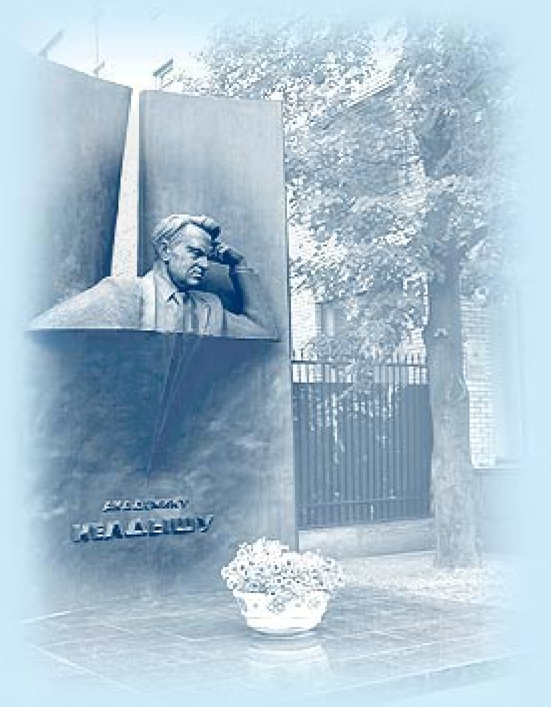
ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 8 за 2023 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

П.С. Аронов, А.О. Гусев,
А.С. Родин

Моделирование напряженно-деформированного состояния кристалла, выращенного методом Бриджмена

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Аронов П.С., Гусев А.О., Родин А.С. Моделирование напряженно-деформированного состояния кристалла, выращенного методом Бриджмена // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2023. № 8. 26 с.
https://doi.org/10.20948/prepr-2023-8
https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2023-8

Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
им. М.В. Келдыша
Российской академии наук

П.С. Аронов, А.О. Гусев, А.С. Родин

Моделирование напряженно-деформированного состояния кристалла, выращенного методом Бриджмена

Москва — 2023

Аронов П.С., Гусев А.О., Родин А.С.
Моделирование напряженно-деформированного состояния кристалла, выращенного методом Бриджмена

Рассмотрены математическая модель и алгоритм численного решения квазистатической задачи механики деформируемого твердого тела применительно к монокристаллу, выращенному методом вертикальной направленной кристаллизации. Задача рассмотрена в осесимметричном приближении, для численного решения использован метод конечных элементов. Выполнено сравнение результатов моделирования напряженно-деформированного состояния кристалла при выборе различных граничных условий и свойств материала.

Ключевые слова: метод вертикальной направленной кристаллизации, задача теории термоупругости, напряженно-деформированное состояние, метод конечных элементов.

Aronov P.S., Gusev A.O., Rodin A.S.
Modeling of the stress-strain state of the crystal grown by Bridgman method

The thermal stress in single crystal grown by Bridgman method is studied. The corresponding quasi-static problem of deformable solid mechanics is considered in axisymmetric case. The governing equations are approximated by finite element method. The effect of boundary conditions and material parameters on the stress-strain state of the single crystal is studied numerically.

Key words: Bridgman method, problem of the thermoelasticity theory, stress-strain state, finite element method.

1. Введение

При выращивании монокристаллов из высокотемпературных расплавов из-за неоднородного распределения температуры в материале возникают термические напряжения, которые являются основной причиной образования дислокаций. Плотность дислокаций и их распределение в кристалле являются одними из основных характеристик качества получаемых материалов.

В работе изучено возникновение температурных напряжений в двухкомпонентном монокристалле, выращенном методом вертикальной направленной кристаллизации. Задача рассмотрена в цилиндрической системе координат в осесимметричном приближении. Основой математической модели процесса кристаллизации являются уравнения Навье — Стокса, уравнения тепломассопереноса в твердой и жидкой фазах и условия термодинамического равновесия на границе раздела фаз. Соответствующая задача механики деформируемого твердого тела решена в квазистатическом приближении. Численно изучено влияние условий закрепления и упругих характеристик материала на напряженно-деформированное состояние монокристалла.

Рассмотрена задача о кристаллизации многокомпонентного раствора, в ходе моделирования определены форма фронта кристаллизации, распределения температуры и концентрации компонентов в твердой фазе. Поле температуры, полученное в ходе изучения процессов тепло- и массопереноса в среде с фазовым переходом, использовано для расчета напряженно-деформированного состояния монокристалла.

2. Математическая постановка задачи

2.1. Задача о фазовом переходе в многокомпонентном растворе

Рассматривается процесс получения монокристалла $A_{\mathrm{x}}B_{1-\mathrm{x}}$ из двухкомпонентного раствора компонента A в веществе B методом направленной кристаллизации. Рост полупроводникового соединения происходит за счет протяжки ампулы с кристаллом-затравкой и растворенным материалом вдоль вертикальной оси цилиндрической печи с неравномерным распределением температуры по высоте.

Задача о направленной кристаллизации двухкомпонентного соединения решена в следующей постановке. Поля температуры, концентрации и скоростей жидкости предполагаются осесимметричными. Поэтому расчет ведется в области, расположенной в плоскости (r, z) и состоящей из трех подобластей: жидкой фазы, твердой фазы, включающей затравку и выращенный кристалл, и ампулы (рис. 1). Основой математической модели процесса направленной кристаллизации являются уравнения Навье — Стокса, уравнения тепломассопереноса в твердой и жидкой фазах и условия термодинамического равновесия на границе раздела фаз.

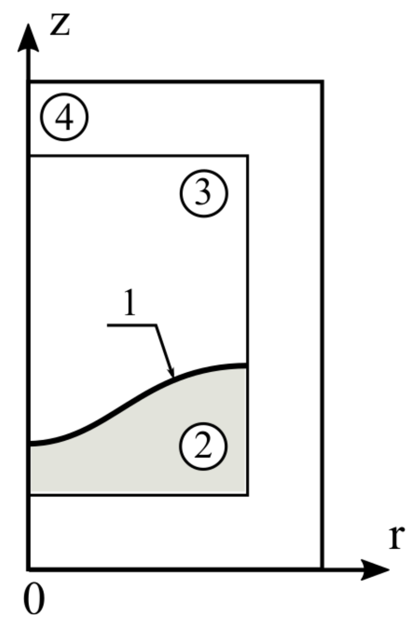


Рис. 1. Цилиндрическая ампула: 1 — фронт кристаллизации, 2 — твердая фаза, 3 — жидкая фаза, 4 — стенки ампулы

В расчетах используется вычислительная схема, в которой на разностном уровне выполнены законы сохранения кинетической и внутренней энергии, балансы масс для компонентов. Дискретные уравнения, описывающие распределение температуры в области, состав твердой и жидкой фаз и положение фронта кристаллизации, решаются совместно [1].

Подробное описание математической модели процесса кристаллизации и численного метода ее исследования приведено в работе [2].

2.2. Задача механики деформируемого твердого тела

Математическая формулировка квазистатической задачи механики деформируемого твердого тела (рис. 2) для случая, когда объемные силы отсутствуют, включает в себя [3] следующие соотношения для каждого тела с номером m $(i, j = \overline{1,3})$:

- уравнения равновесия

$$\sigma_{ji,j}(\mathbf{u}, t) = 0, \quad \mathbf{x} \in G_m, \quad t > 0; \tag{1}$$

- кинематические граничные условия

$$u_i(\mathbf{x}, t) = u_{i_0}(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in S_D, \quad t > 0; \tag{2}$$

- силовые граничные условия

$$\sigma_{ji}(\mathbf{u}, t) n_j = p_i(\mathbf{x}, t), \quad x \in S_N, \quad t > 0; \tag{3}$$

- соотношения Коши для линейного тензора полной деформации

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{x},t) = \frac{1}{2}(u_{i,j}(\mathbf{x},t) + u_{j,i}(\mathbf{x},t)), \quad \mathbf{x} \in G_m, \quad t > 0; \tag{4}$$

- определяющие уравнения (закон Гука)

$$\sigma_{ij}(\mathbf{x},t) = C_{ijkl}(\varepsilon_{kl}(\mathbf{x},t) - \varepsilon^T_{kl}(\mathbf{x},t)), \quad \mathbf{x} \in G_m, \quad t > 0, \tag{5}$$

где x_i — координаты вектора $x \in G_m$; σ_{ij} — компоненты тензора напряжений; ε_{kl} — компоненты тензора полной деформации; ε^T_{kl} — компоненты тензора температурной деформации; u_i — компоненты вектора перемещения; C_{ijkl} — компоненты тензора упругих постоянных; p — компоненты вектора поверхностных сил; n_j — компоненты вектора внешней нормали к соответствующей поверхности S_j, S_D и S_N — объединение поверхностей, на которых заданы кинематические и силовые граничные условия соответственно.

Для термоупругого тела температурные деформации записываются следующим образом [3]:

$$\varepsilon^T_{ij} = \alpha^T_{ij}\Delta T, \tag{6}$$

где α^T_{ij} — компоненты тензора коэффициентов теплового расширения (в изотропном случае $\alpha^T_{ij} = \alpha\delta_{ij}$, $\alpha = \mathrm{const}$), $\Delta T = T(\mathbf{x},t) - T_0$ — приращение температуры относительно начального уровня температуры.

При решении задачи механики деформируемого твердого тела считается, что для рассматриваемого момента времени известна геометрия твердой фазы и температурное поле. Механическая задача решается только для твердой фазы, жидкая фаза не рассматривается. На рис. 2 показана расчетная область для задачи механики, включающая твердую фазу (рис. 2a) и участок стенки ампулы, который к ней примыкает (рис. 2b).

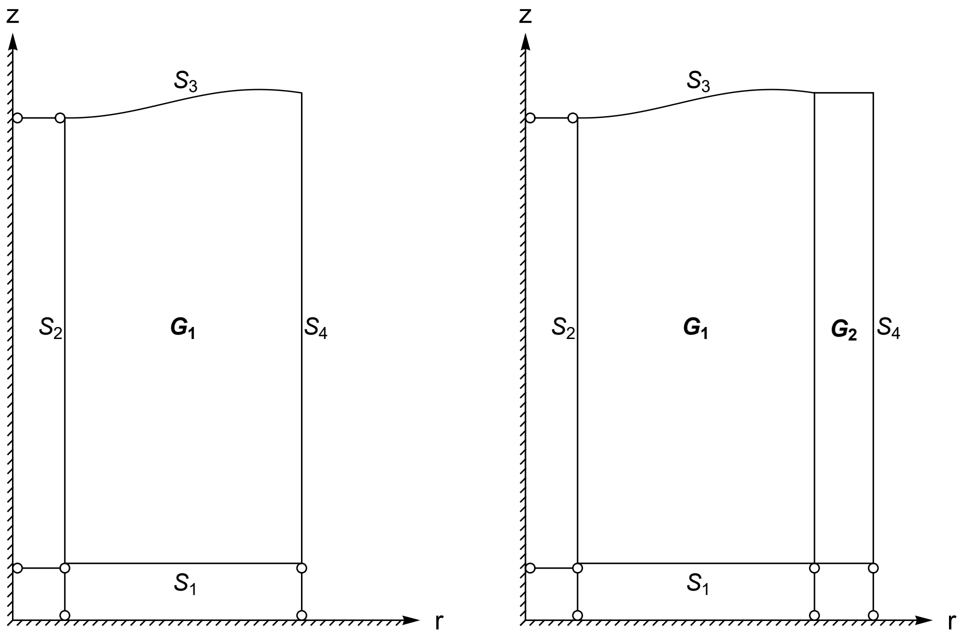
Решение задачи (1)–(5) в момент времени t_k эквивалентно [4] минимизации функционала

$$\Pi(t_k) = \frac{1}{2}\int\limits_G \boldsymbol{\sigma}^T(t_k)(\boldsymbol{\varepsilon}(t_k) - \boldsymbol{\varepsilon}^T(t_k))dG - \int\limits_{S_N} \mathbf{u}^T(t_k)\mathbf{p}dS \tag{7}$$

при выполнении кинематических граничных условий (2).

Для осесимметричной постановки в цилиндрической системе координат векторы напряжений $\boldsymbol{\sigma}$, деформаций $\boldsymbol{\varepsilon}$ и перемещений $\mathbf{u}$ записываются следующим образом:

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{Bmatrix} \sigma_{rr} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{\theta\theta} \\ \tau_{r\theta} \end{Bmatrix}, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{Bmatrix} \varepsilon_{rr} \\ \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{\theta\theta} \\ \gamma_{r\theta} \end{Bmatrix}, \quad \mathbf{u} = \begin{Bmatrix} u_r \\ u_z \end{Bmatrix}. \tag{8}$$



(a) (b)

Рис. 2. Схема расчетной области: (a) — без ампулы, (b) — с ампулой

Для пространственной дискретизации функционала (7) использован метод конечных элементов, в расчетах применены элементы второго порядка на четырехугольной сетке [5].

Компоненты вектора перемещения $u_1(\mathbf{x})$ и $u_2(\mathbf{x})$ внутри конечного элемента с номером (e) определяются с помощью зависимости [6]:

$$\begin{Bmatrix} u_1^{(e)} \\ u_2^{(e)} \end{Bmatrix} = [N]^{(e)}\{u\}^{(e)}, \tag{9}$$

где матрица базисных функций записывается следующим образом [5]:

$$[N]^{(e)} = \begin{bmatrix} N_1^{(e)} & 0 & N_2^{(e)} & 0 & \dots & N_8^{(e)} & 0 \\ 0 & N_1^{(e)} & 0 & N_2^{(e)} & \dots & 0 & N_8^{(e)} \end{bmatrix}, \tag{10}$$

а вектор узловых перемещений выглядит так:

$$\{u\}^{(e)} = \begin{Bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1^{(e)} \\ u_2^{(e)} \end{Bmatrix}_1 \\ \begin{Bmatrix} u_1^{(e)} \\ u_2^{(e)} \end{Bmatrix}_2 \\ \vdots \\ \begin{Bmatrix} u_1^{(e)} \\ u_2^{(e)} \end{Bmatrix}_8 \end{Bmatrix}. \tag{11}$$

Соотношения между деформациями и перемещениями записываются следующим образом [6]:

$$\{\varepsilon\}^{(e)} = [B]^{(e)}\{u\}^{(e)}. \tag{12}$$

Напряжения выражаются через деформации с помощью закона Гука:

$$\{\sigma\}^{(e)} = [D]^{(e)}\left(\{\varepsilon\}^{(e)} - \{\varepsilon^T\}^{(e)}\right), \tag{13}$$

или с учетом (12)

$$\{\sigma\}^{(e)} = [D]^{(e)}[B]^{(e)}\{u\}^{(e)}, \tag{14}$$

где $[D]^{(e)}$ — локальные матрицы упругости конечного элемента. Для осесимметричной постановки задачи матрица $[D]^{(e)}$ выглядит следующим образом [7]:

$$[D]^{(e)} = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)}\begin{pmatrix} 1-\nu & \nu & \nu & 0 \\ \nu & 1-\nu & \nu & 0 \\ \nu & \nu & 1-\nu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1-2\nu}{2} \end{pmatrix}, \tag{15}$$

где E — модуль Юнга, а ν — коэффициент Пуассона.

Минимизация функционала (7) приводит к формированию следующей системы линейных алгебраических уравнений, решение которой осуществляется с помощью метода сопряженных градиентов [8]:

$$\mathbf{Au} = \mathbf{R}, \tag{16}$$

где

$$\mathbf{A} = \sum_{e=1}^{k_G} [a_G]^{(e)^T} \left(\int\limits_G [B]^{(e)^T} [D_m]^{(e)} [B]^{(e)} dG \right) [a_G]^{(e)}, \tag{17}$$

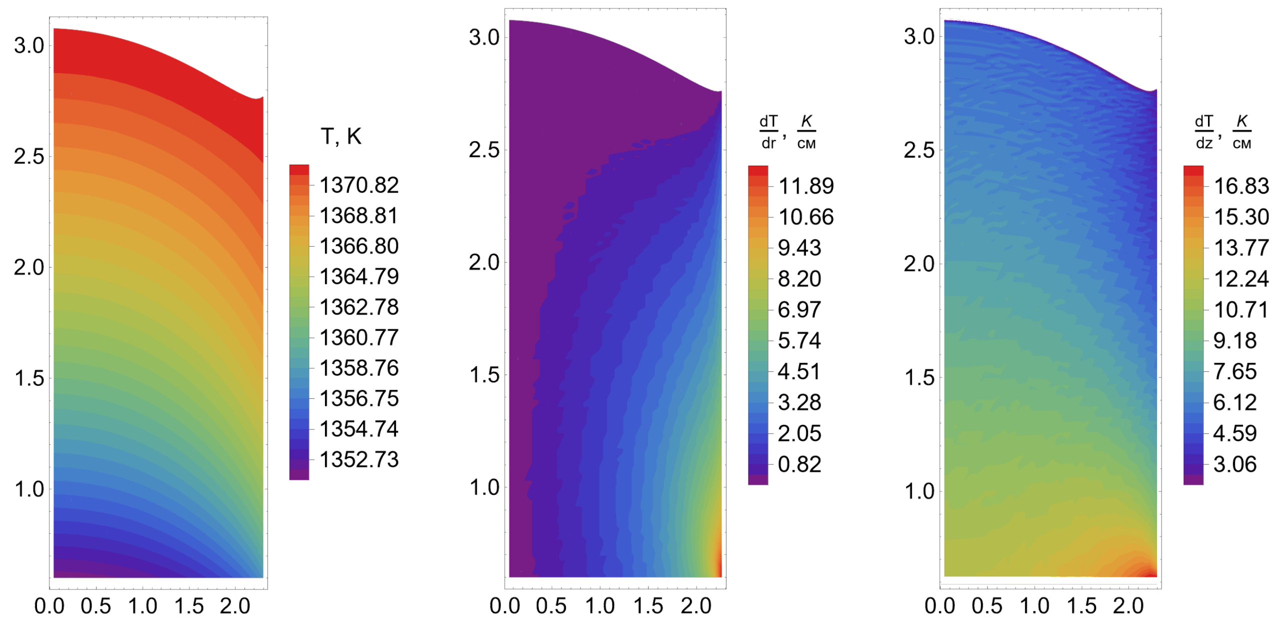
$$\mathbf{R} = \sum_{e=1}^{k_S} [a_S]^{(e)^T} \left(\int\limits_S [N]^{(e)^T} [p]^{(e)} dS \right), \tag{18}$$

где $[a_G]^{(e)}$ и $[a_S]^{(e)}$ — матрицы геометрических связей конечного элемента с номером (e), k_G и k_S — количество конечных элементов, на которые разбиты тело G и поверхности, на которых заданы силовые граничные условия, соответственно.

3. Результаты моделирования

При решении задачи механики деформируемого твердого тела известно распределение поля температур в любой момент времени. В данной работе считается, что упругие параметры материалов не зависят от температуры, поэтому, используя стандартный закон Гука для термоупругого тела (5), можно найти напряженно-деформированное состояние тела в любой момент времени, независимо от предыдущей истории нагружения.

В работах [9, 10], а также [11] приведены различные значения модуля Юнга и коэффициента Пуассона. В дальнейших расчетах использованы следующие значения: модуль Юнга $E = 2,488 \cdot 10^{10}$ Па, коэффициент Пуассона $\nu = 0,4$ [9]. Для сравнения результатов также проведена серия расчетов с другими упругими свойствами материала: модуль Юнга $E = 3,98 \cdot 10^{11}$ Па, коэффициент Пуассона $\nu = 0,459$ [10] (см. параграф 3.4). Коэффициент теплового расширения $\alpha = 6,3629 \cdot 10^{-6}$ 1/К. Радиус кристалла равен 2,3 см, высота для момента времени $t = 100$ ч — 3,08 см, для момента времени $t = 480$ ч — 9 см. На рис. 3–4 показаны двумерные распределения температуры, а также компонентов градиента температурного поля для моментов времени $t = 100$ ч и $t = 480$ ч.



(a) (b) (c)

Рис. 3. Двумерные распределения в узлах элементов, момент времени $t = 100$ ч: (a) — температура, (b) — радиальная компонента градиента температуры, (c) — осевая компонента градиента температуры

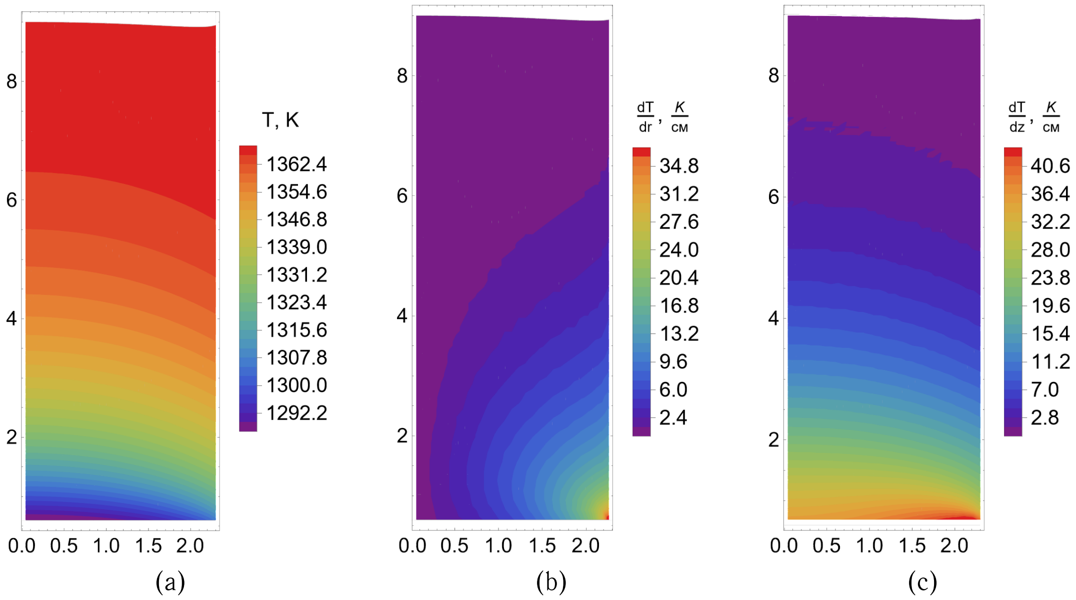
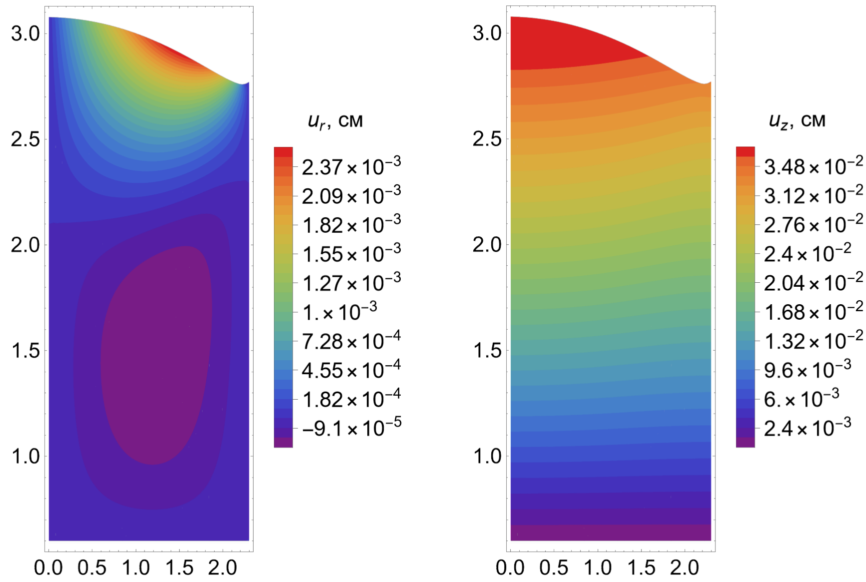


Рис. 4. Двумерные распределения в узлах элементов, момент времени $t = 480$ ч: (a) — температура, (b) — радиальная компонента градиента температуры, (c) — осевая компонента градиента температуры

Введем следующие обозначения: сечение 1 ($r =$const) соответствует середине кристалла в направлении r ($r = 1,11$ см), сечение 2 ($z =$const) — середине кристалла в направлении z (для $t = 100$ ч: $z = 1,54$ см, для $t = 300$ ч: $z = 2,95$ см, для $t = 480$ ч: $z = 4,5$ см).

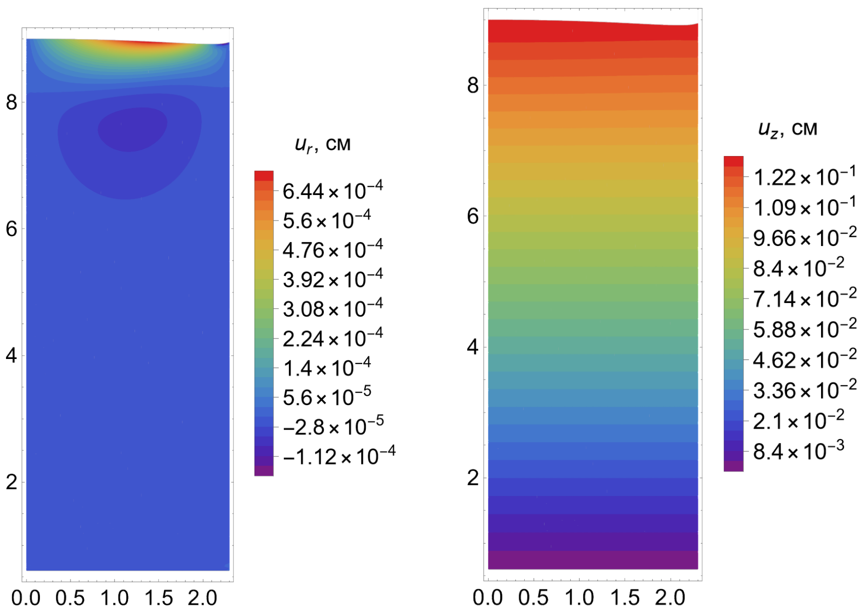
3.1. Закрепление боковой поверхности кристалла в направлении r

В первой серии расчетов боковая поверхность закреплена в направлении r ($S_D = S_1 \cup S_4$). На рис. 5 показаны двумерные распределения радиальных и осевых перемещений в момент времени $t = 100$ ч, на рис. 6 — в момент времени $t = 480$ ч, на рис. 7 и 8 — двумерные распределения интенсивностей напряжений и деформаций в те же моменты времени. Из рисунков видно, что максимальные значения интенсивностей напряжений и деформаций достигаются в правом верхнем углу вблизи поверхности S_3, так как там расположен концентратор напряжений, обусловленный наличием неоднородности поверхности. Максимальная интенсивность напряжений для $t = 100$ ч равна 554 МПа, для $t = 480$ ч — 340 МПа, максимальная интенсивность деформаций для $t = 100$ ч равна 0,031, для $t = 480$ ч — 0,019. Максимальные радиальные перемещения достигаются вблизи поверхности S_3: $2,56 \cdot 10^{-3}$ см для момента времени $t = 100$ ч и $7,19 \cdot 10^{-4}$ см для момента времени $t = 480$ ч. Максимальные осевые перемещения составляют 1,22 мм. На рис. 9–11 приведены графики интенсивности напряжений, а также радиальных и осевых напряжений для сечений 1 и 2 в различные моменты времени. Из рис. 9a видно, что в момент времени $t = 100$ ч максимальная интенсивность напряжений достигается в нижней части кристалла, с течением времени интенсивность напряжений выравнивается, ее средний уровень уменьшается. Приведенные на рис. 9b графики интенсивностей напряжений для сечения 2 демонстрируют, что максимальные напряжения достигаются вблизи оси, с течением времени уровень напряжений уменьшается. На рис. 12 показаны графики максимальных и минимальных значений интенсивностей напряжений и деформаций в зависимости от времени.



(a) (b)

Рис. 5. Двумерные распределения в узлах элементов, момент времени $t = 100$ ч: (a) — радиальные перемещения, (b) — осевые перемещения



(a) (b)

Рис. 6. Двумерные распределения в узлах элементов, момент времени $t = 480$ ч: (a) — радиальные перемещения, (b) — осевые перемещения

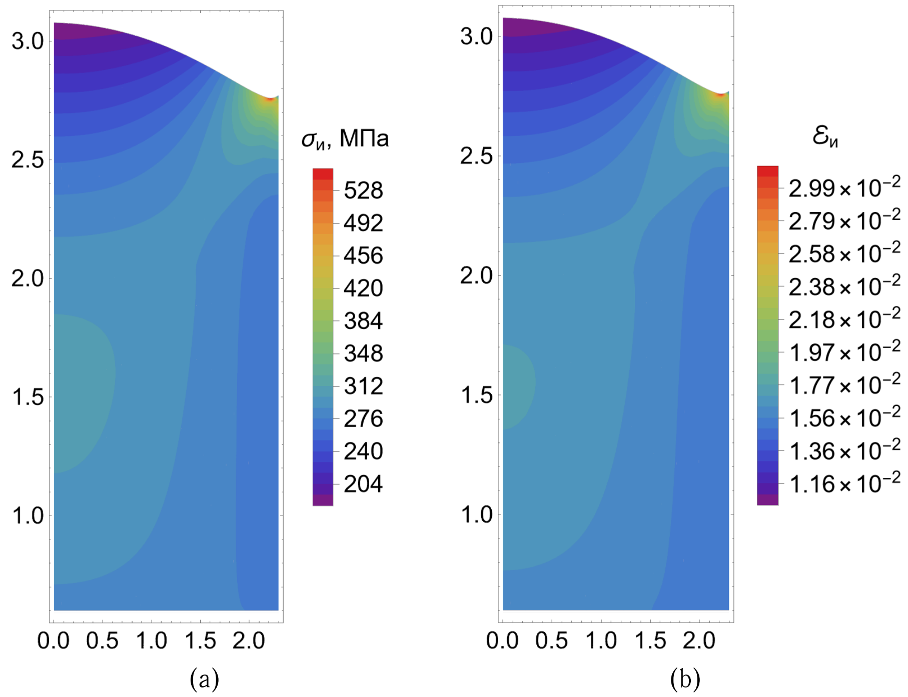


Рис. 7. Двумерные распределения в узлах элементов, момент времени $t = 100$ ч: (a) — интенсивность напряжений, (b) — интенсивность деформаций

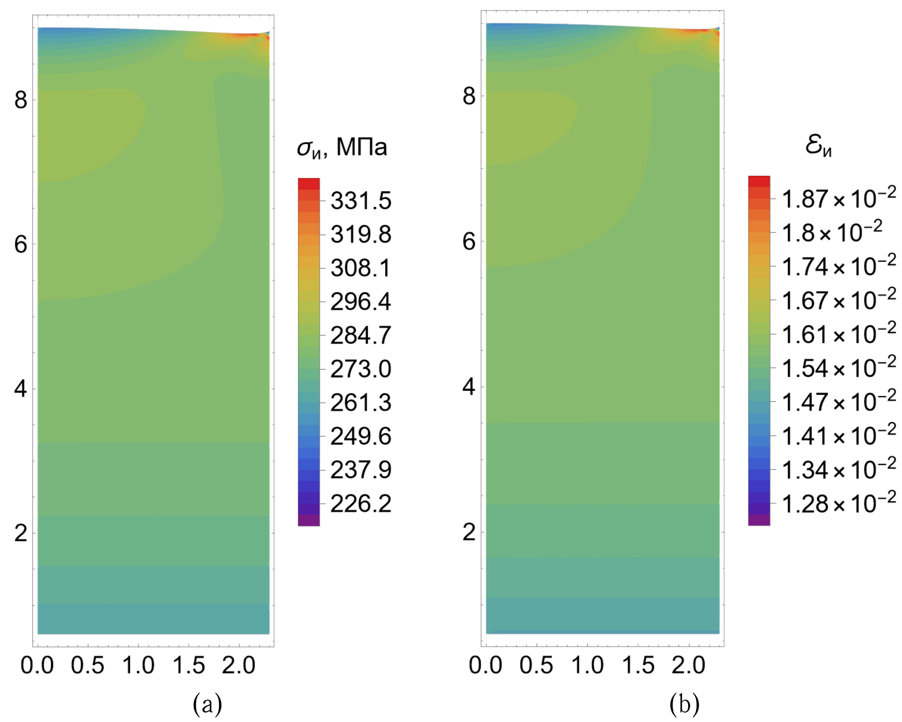
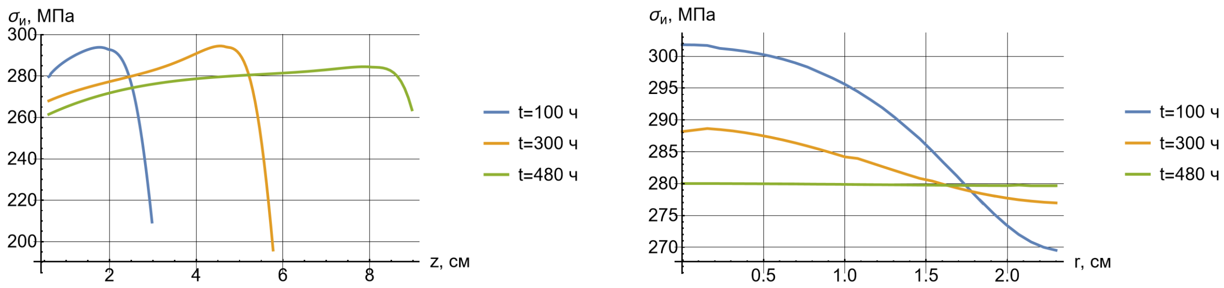
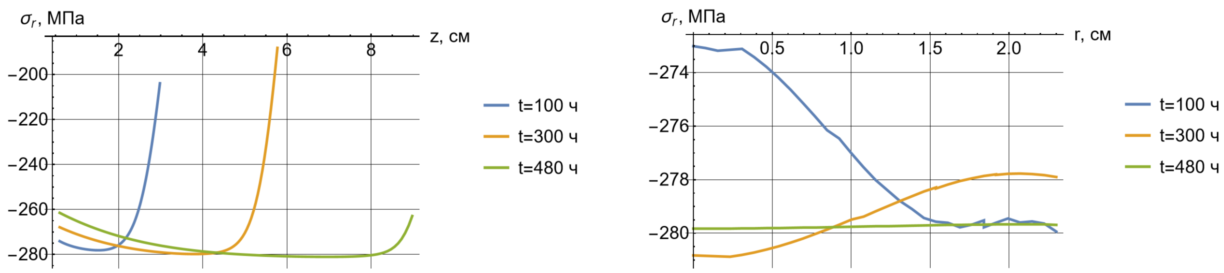


Рис. 8. Двумерные распределения в узлах элементов, момент времени $t = 480$ ч: (a) — интенсивность напряжений, (b) — интенсивность деформаций



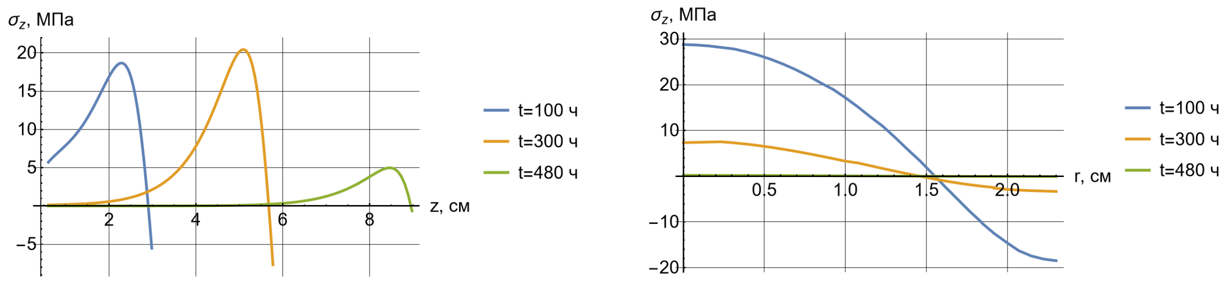
(a) (b)

Рис. 9. Зависимости интенсивности напряжений: (a) — сечение 1, (b) — сечение 2



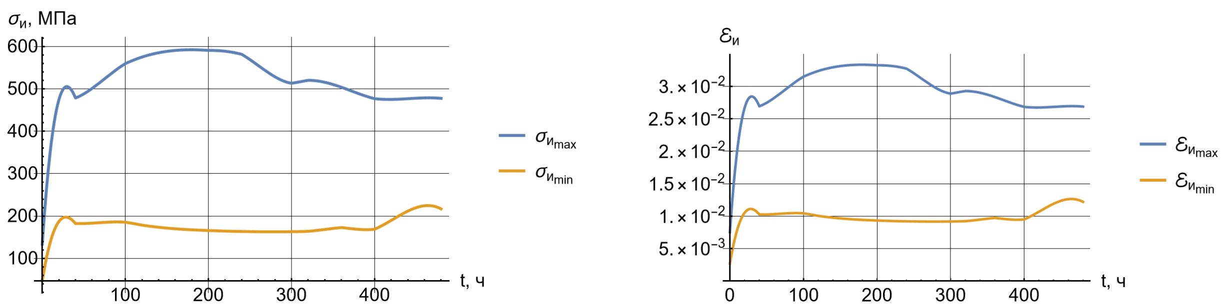
(a) (b)

Рис. 10. Зависимости радиальных напряжений: (a) — сечение 1, (b) — сечение 2



(a) (b)

Рис. 11. Зависимости осевых напряжений: (a) — сечение 1, (b) — сечение 2



(a) (b)

Рис. 12. Зависимости от времени: (a) — интенсивности напряжений, (b) — интенсивности деформаций

3.2. Свободная боковая поверхность

В следующей серии расчетов боковая поверхность кристалла S_4 является свободной (в уравнении (3) $\mathbf{p} = 0$, $S_D = S_4$, стенка ампулы не учитывается). На рис. 13 показаны двумерные распределения радиальных и осевых перемещений в момент времени $t = 100$, на рис. 14 — в момент времени $t = 480$, на рис. 15 и 16 — двумерные распределения интенсивностей напряжений и деформаций в те же моменты времени. Максимальные значения интенсивностей напряжений и деформаций достигаются в правом нижнем углу вблизи поверхностей S_1 и S_4, что соответствует максимальным значениям радиальных и осевых компонентов градиента температурного поля (см. рис. 4b–4c). Максимальная интенсивность напряжений для $t = 100$ ч равна 2,6 МПа, для $t = 480$ ч — 7,3 МПа, максимальная интенсивность деформаций для $t = 100$ ч равна $1,46 \cdot 10^{-6}$, для $t = 480$ ч — $4,13 \cdot 10^{-6}$. Максимальные радиальные и осевые перемещения составляют 0,15 мм. На рис. 17–19 приведены графики интенсивности напряжений, а также радиальных и осевых напряжений для сечений 1 и 2 в различные моменты времени. На рис. 20 показаны графики максимальных и минимальных значений интенсивностей напряжений и деформаций в зависимости от времени.

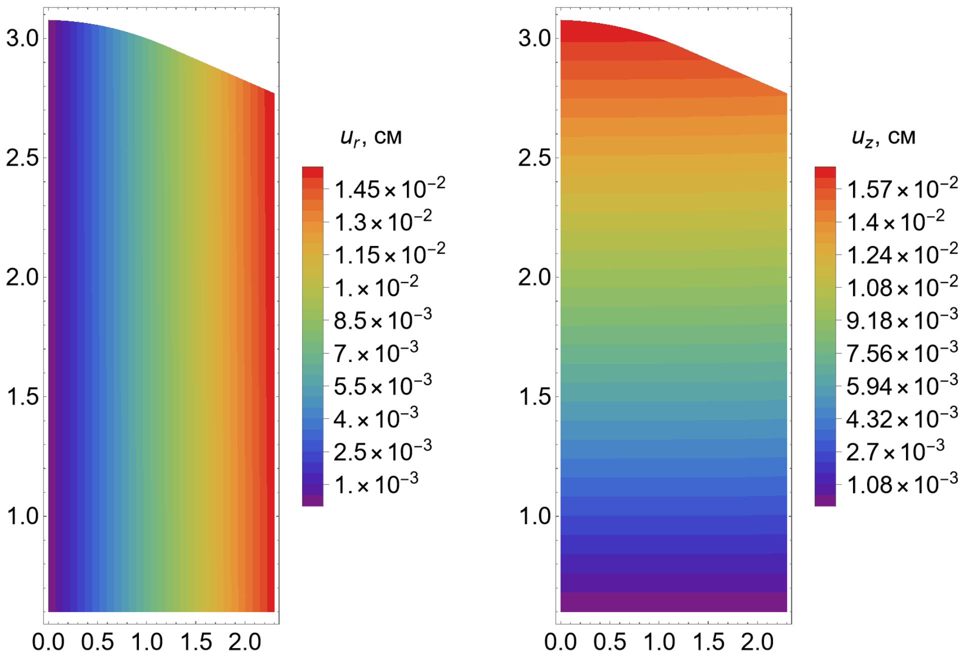


Рис. 13. Двумерные распределения в узлах элементов, момент времени $t = 100$ ч: (a) — радиальные перемещения, (b) — осевые перемещения

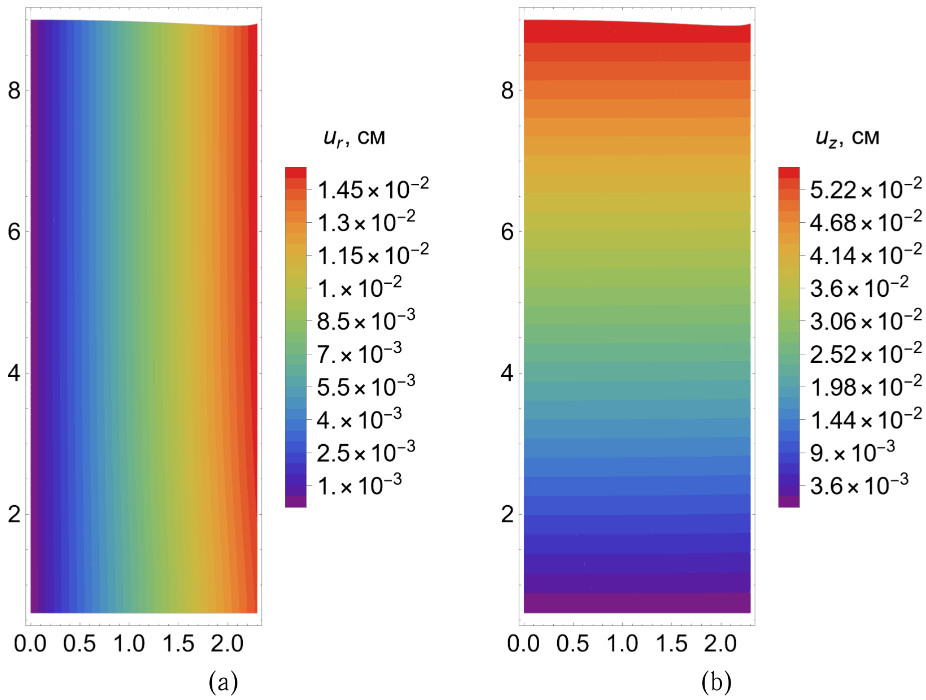


Рис. 14. Двумерные распределения в узлах элементов, момент времени $t = 480$ ч: (a) — радиальные перемещения, (b) — осевые перемещения

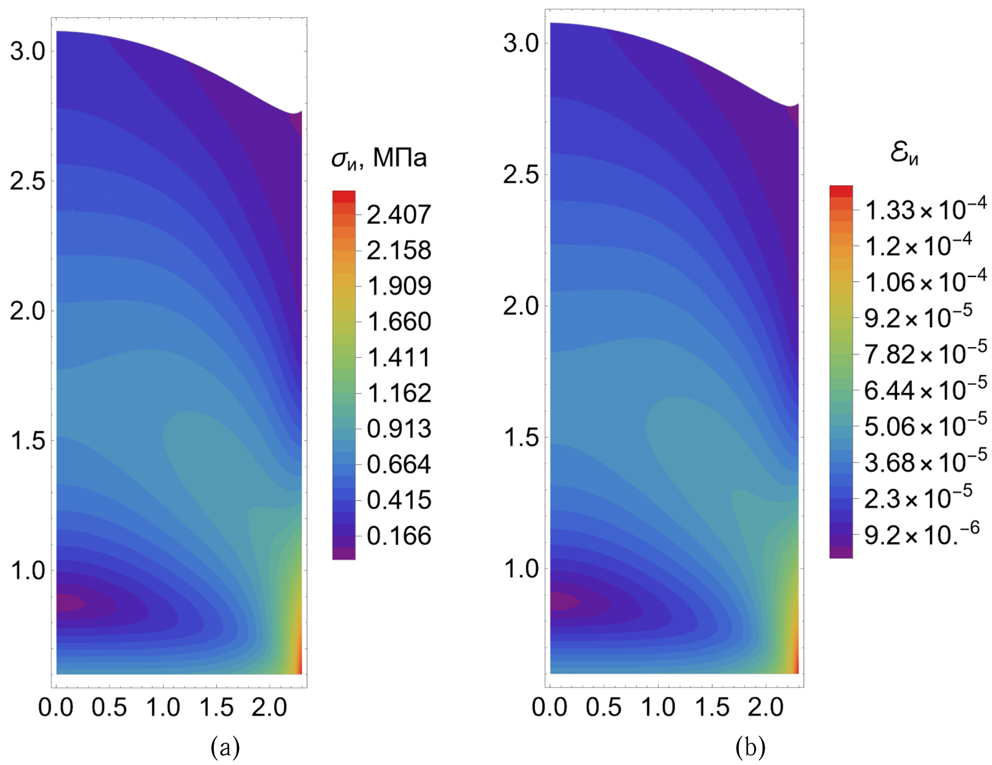
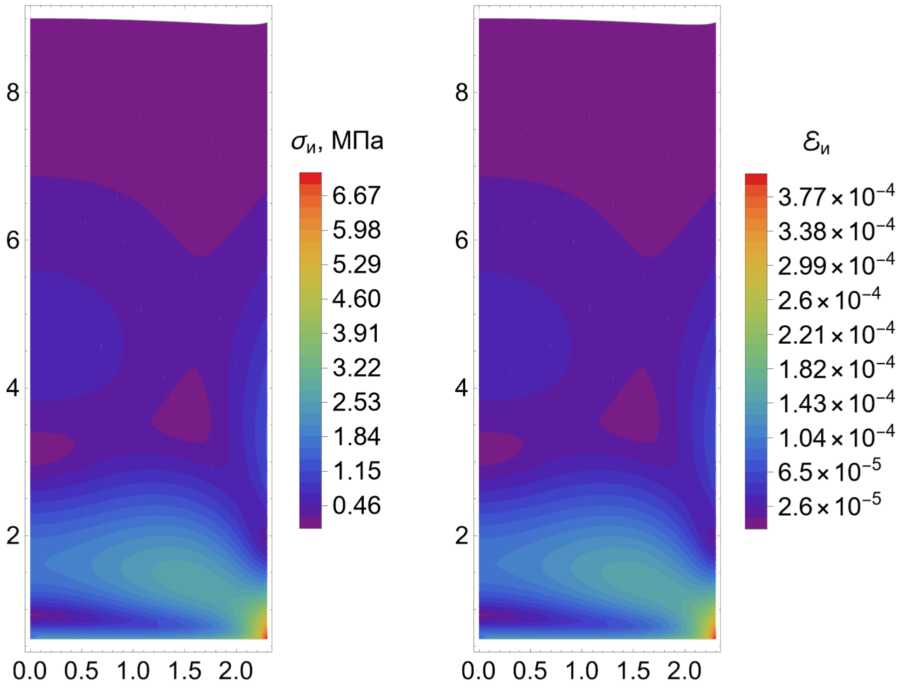
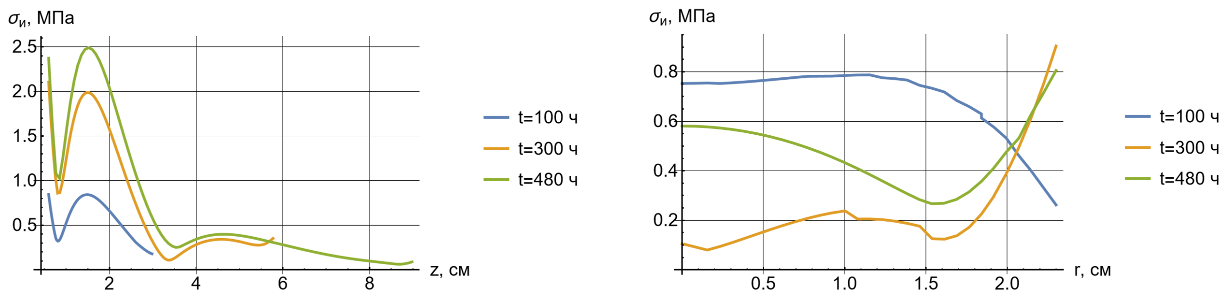


Рис. 15. Двумерные распределения в узлах элементов, момент времени $t = 100$ ч: (a) — интенсивность напряжений, (b) — интенсивность деформаций



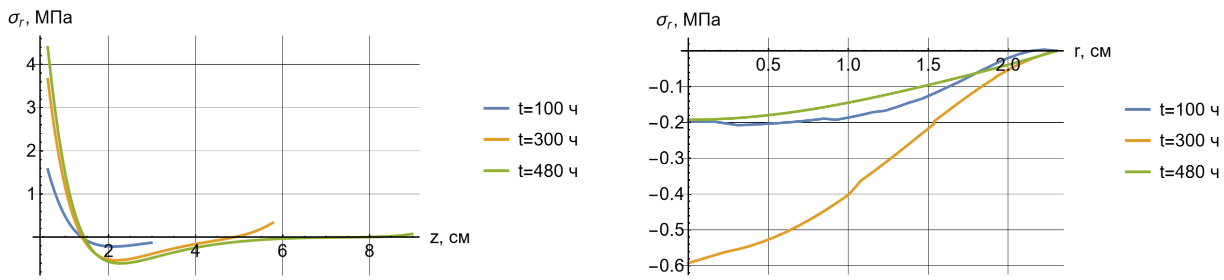
(a) (b)

Рис. 16. Двумерные распределения в узлах элементов, момент времени $t = 480$ ч: (a) — интенсивность напряжений, (b) — интенсивность деформаций



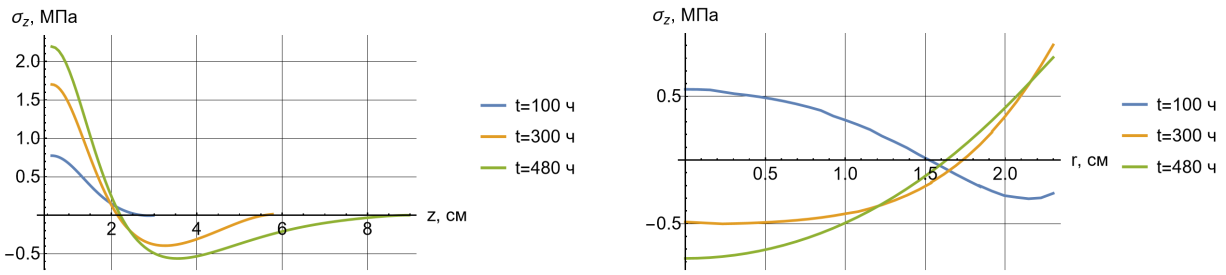
(a) (b)

Рис. 17. Зависимости интенсивности напряжений: (a) — сечение 1, (b) — сечение 2



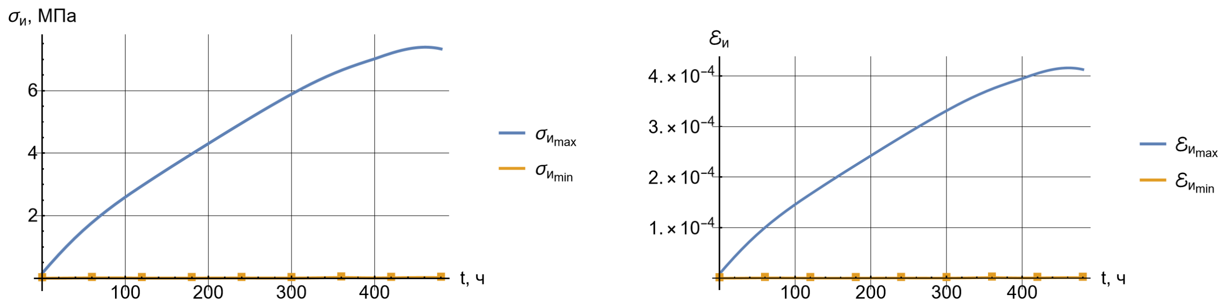
(a) (b)

Рис. 18. Зависимости радиальных напряжений: (a) — сечение 1, (b) — сечение 2



(a) (b)

Рис. 19. Зависимости осевых напряжений: (a) — сечение 1, (b) — сечение 2

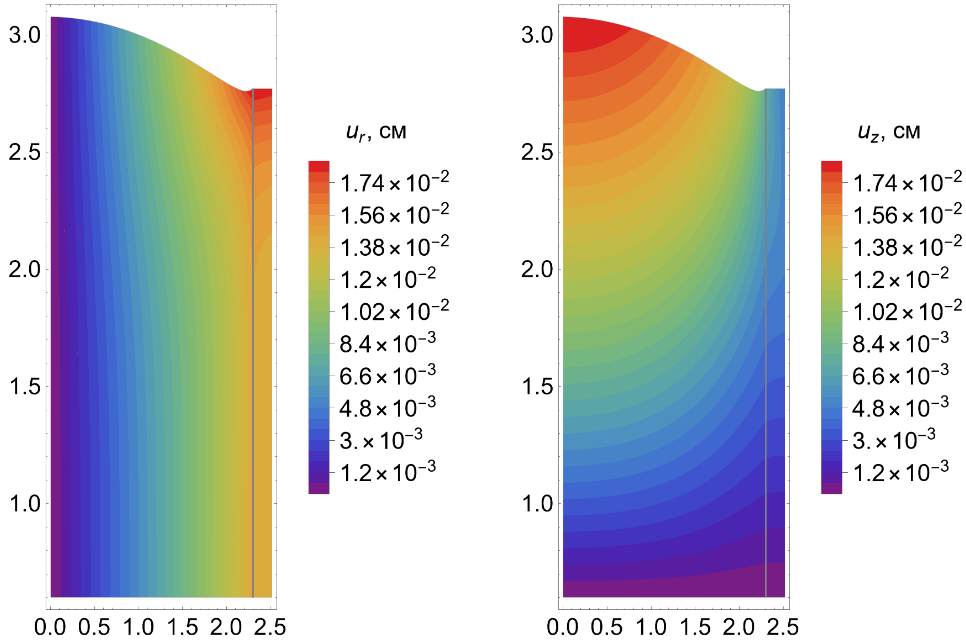


(a) (b)

Рис. 20. Зависимости от времени: (a) — интенсивности напряжений, (b) — интенсивности деформаций

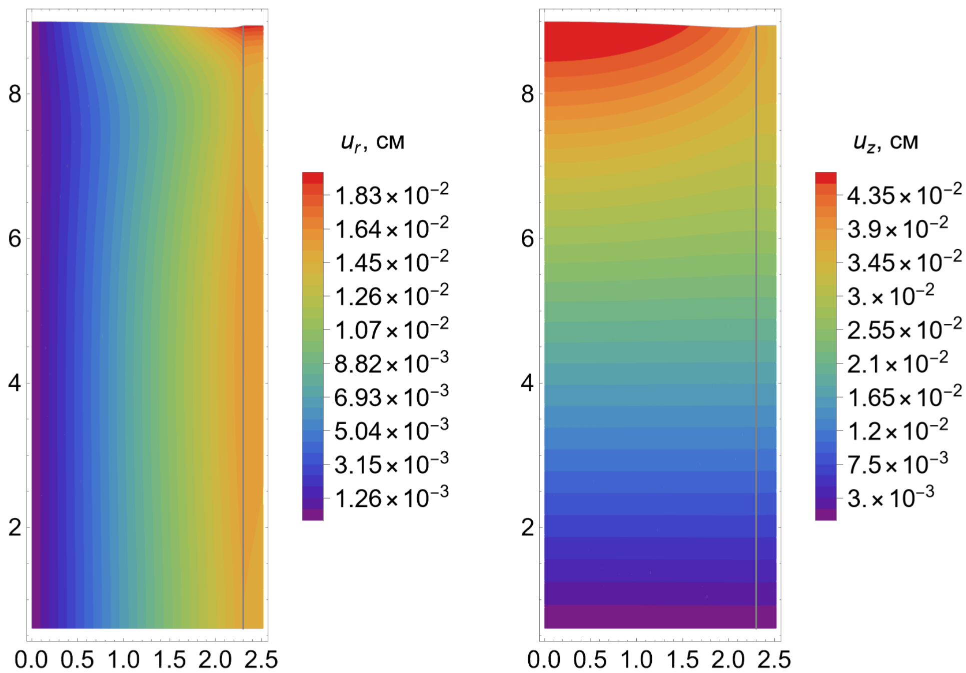
3.3. Взаимодействие со стенкой ампулы

Далее проведем серию расчетов, учитывающих наличие контакта кристалла со стенкой ампулы, выполненной из кварца, со следующими упругими характеристиками: модуль Юнга $E = 7,17 \cdot 10^{10}$ Па, коэффициент Пуассона $\nu = 0,16$, коэффициент теплового расширения $\alpha = 3,637 \cdot 10^{-7}$ 1/K [11]. Толщина ампулы равна $0,22$ см. На границе кристалла с ампулой решается не полноценная контактная задача с условием прилипания, а задача теории термоупругости для единого тела, состоящего из подобластей, выполненных из разных материалов, с использованием единой сетки. На рис. 21 показаны двумерные распределения радиальных и осевых перемещений в момент времени $t = 100$ ч, на рис. 22 — в момент времени $t = 480$ ч, на рис. 23 и 24 — двумерные распределения интенсивностей напряжений и деформаций в те же моменты времени. На рис. 21–24 линией показана граница между кристаллом и стенкой ампулы. Максимальная интенсивность напряжений для $t = 100$ ч равна 785,2 МПа, для $t = 480$ ч — 735,5 МПа, максимальная интенсивность деформаций для $t = 100$ ч равна $0,013$, для $t = 480$ ч — $0,012$. Максимальные осевые перемещения составляют 0,2 мм для момента времени $t = 100$ ч и 0,5 мм для $t = 480$ ч. На рис. 25–27 приведены графики интенсивности напряжений, а также радиальных и осевых напряжений для сечений 1 и 2 в различные моменты времени. На рис. 28 показаны графики максимальных и минимальных значений интенсивностей напряжений и деформаций в зависимости от времени.



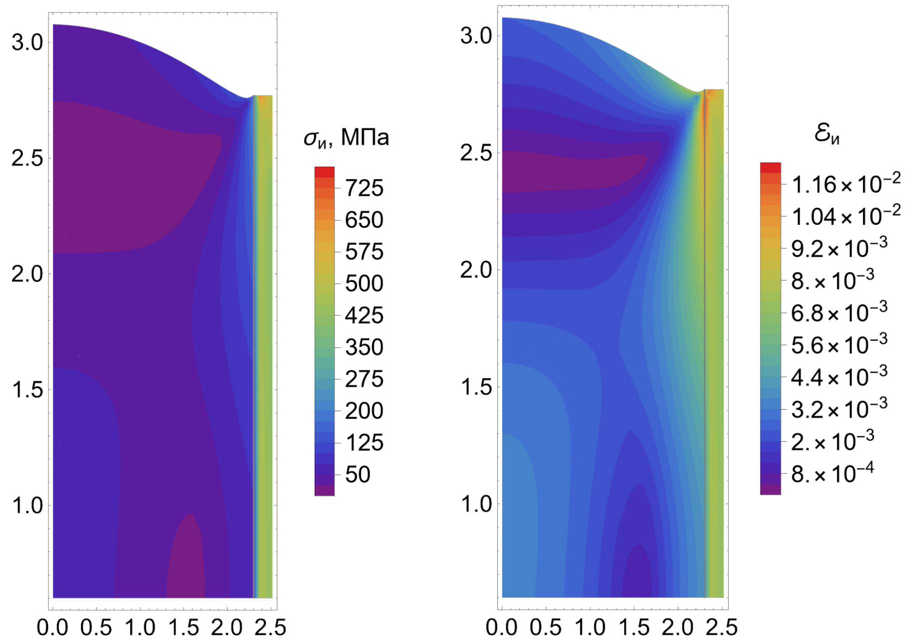
(a) (b)

Рис. 21. Двумерные распределения в узлах элементов, момент времени $t = 100$ ч: (a) — радиальные перемещения, (b) — осевые перемещения



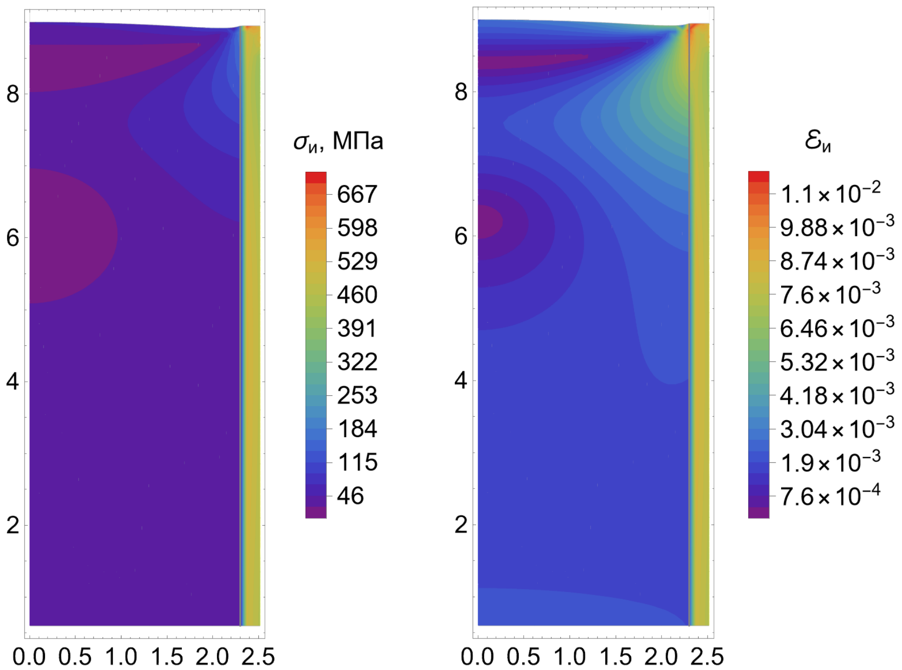
(a) (b)

Рис. 22. Двумерные распределения в узлах элементов, момент времени $t = 480$ ч: (a) — радиальные перемещения, (b) — осевые перемещения



(a) (b)

Рис. 23. Двумерные распределения в узлах элементов, момент времени $t = 100$ ч: (a) — интенсивность напряжений, (b) — интенсивность деформаций



(a) (b)

Рис. 24. Двумерные распределения в узлах элементов, момент времени $t = 480$ ч: (a) — интенсивность напряжений, (b) — интенсивность деформаций

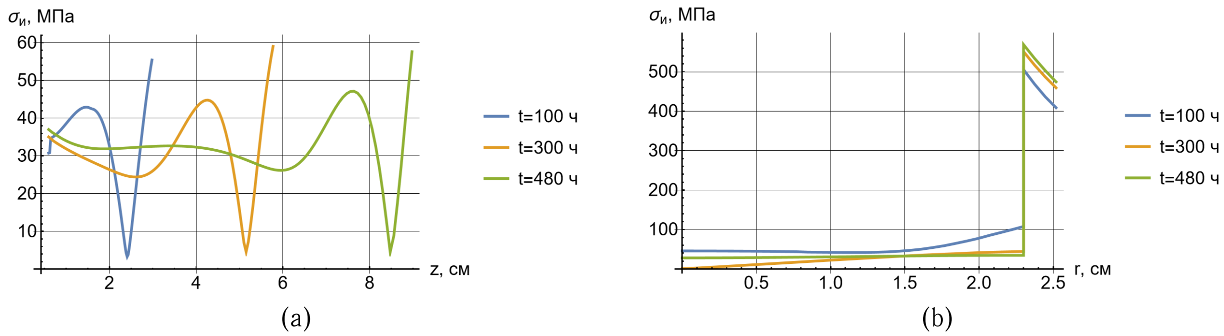


Рис. 25. Зависимости интенсивности напряжений: (a) — сечение 1, (b) — сечение 2

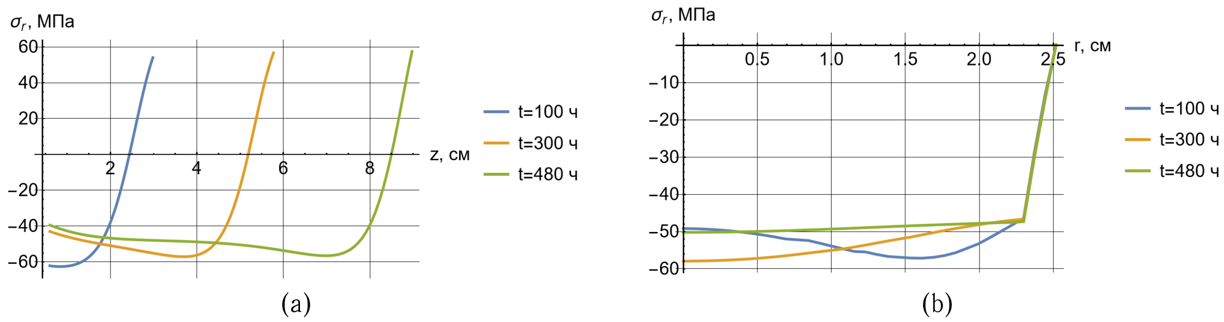


Рис. 26. Зависимости радиальных напряжений: (a) — сечение 1, (b) — сечение 2

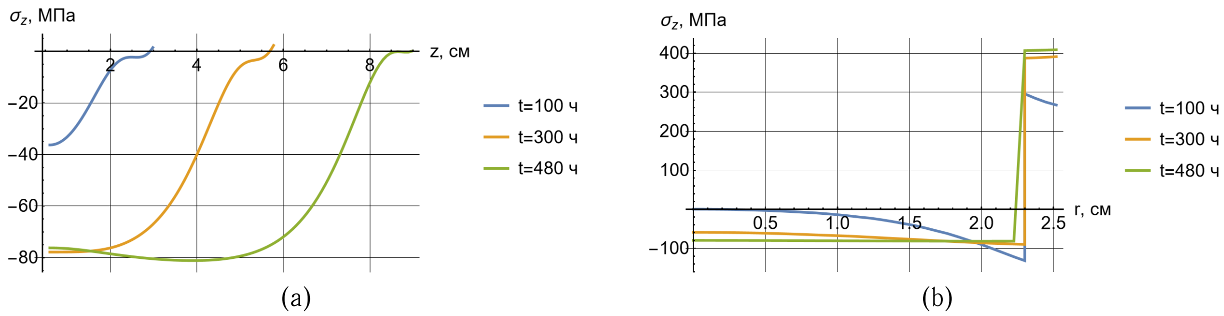


Рис. 27. Зависимости осевых напряжений: (a) — сечение 1, (b) — сечение 2

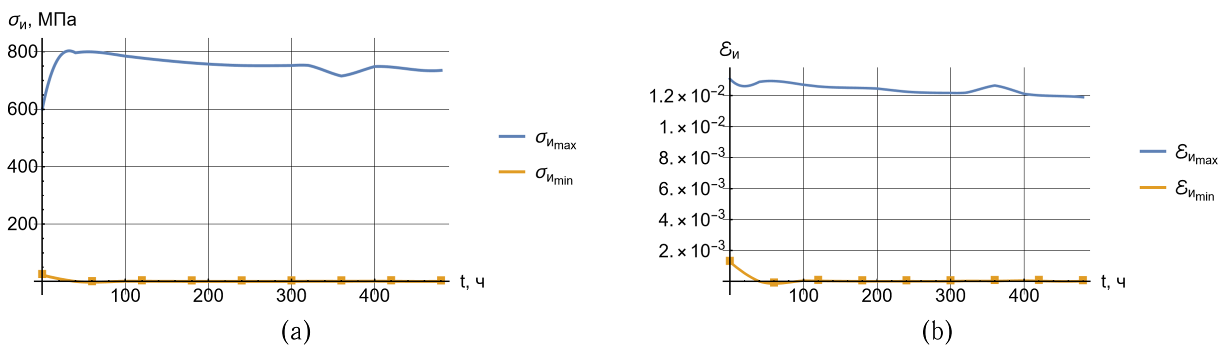


Рис. 28. Зависимости от времени: (a) — интенсивности напряжений, (b) — интенсивности деформаций

3.4. Влияние выбора упругих свойств материала

Проведем серию расчетов с другим набором упругих характеристик кристалла A_xB_{1-x}: модуль Юнга $E = 3,98 \cdot 10^{11}$ Па, коэффициент Пуассона $\nu = 0,459$ [10]. При этом боковая поверхность кристалла S_4 является свободной. На рис. 29 показаны двумерные распределения радиальных и осевых перемещений в момент времени $t = 100$ ч, на рис. 30 — в момент времени $t = 480$ ч, на рис. 31 и 32 — двумерные распределения интенсивностей напряжений и деформаций в те же моменты времени. На рис. 33–35 приведены графики интенсивности напряжений, а также радиальных и осевых напряжений для сечений 1 и 2 в различные моменты времени. На рис. 36 показаны графики максимальных и минимальных значений интенсивностей напряжений и деформаций в зависимости от времени. Из приведенных графиков видно, что характер зависимостей напряжений и деформаций аналогичен соответствующему расчету с базовым набором упругих параметров материала (см. параграф 3.2), однако их значения существенно увеличиваются.

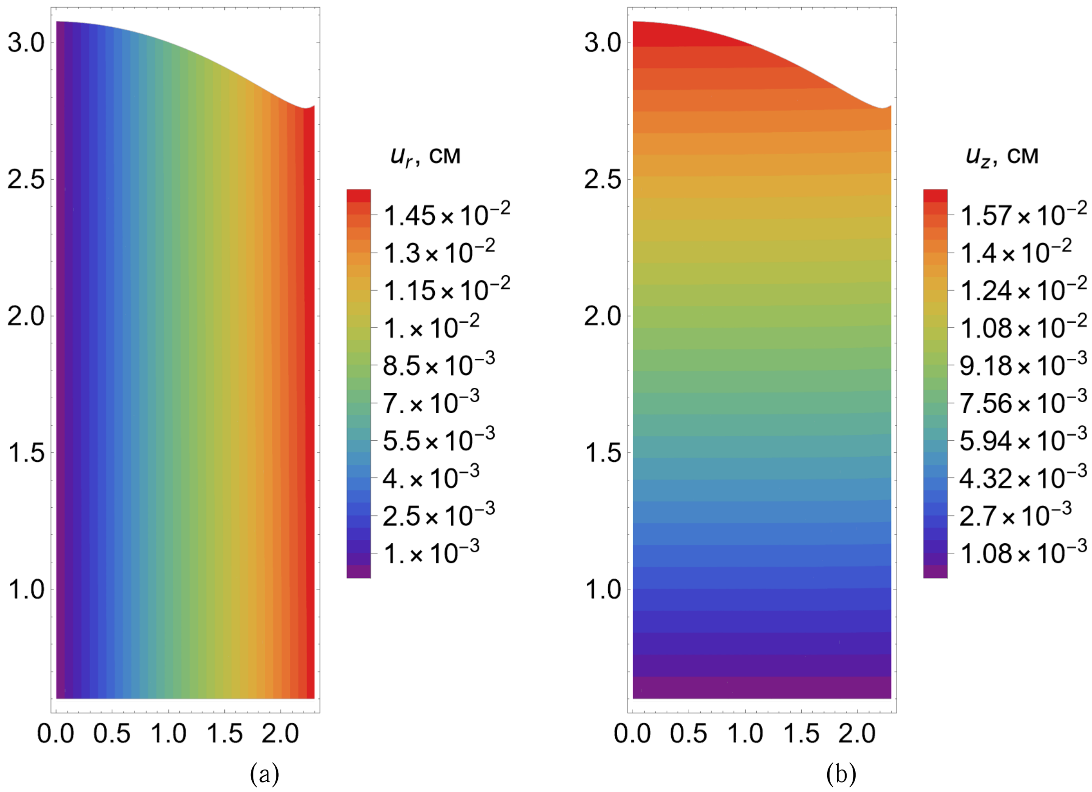
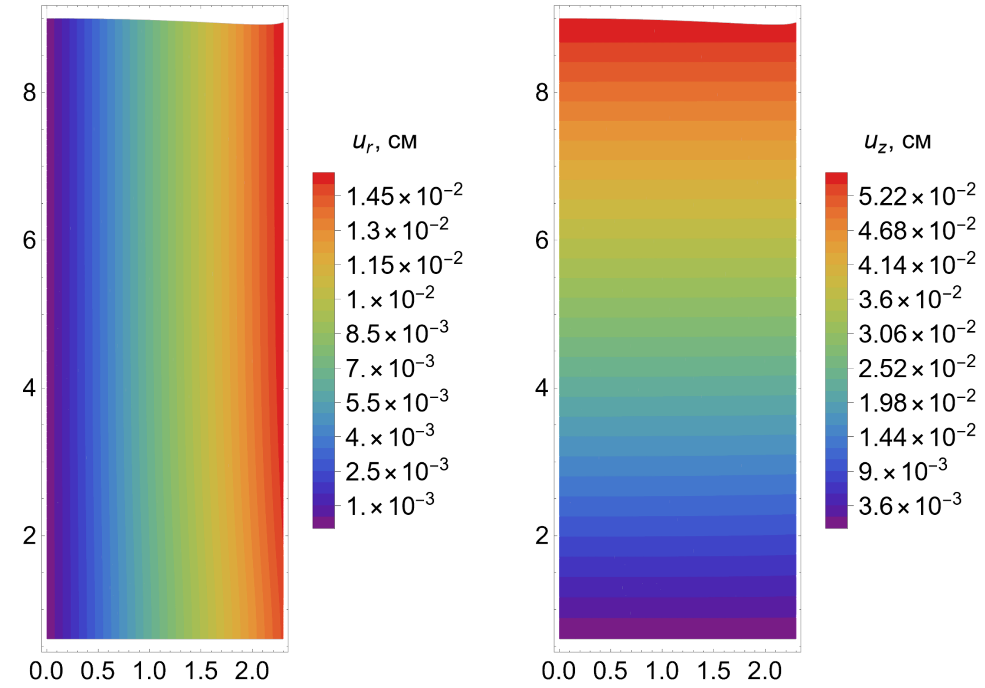
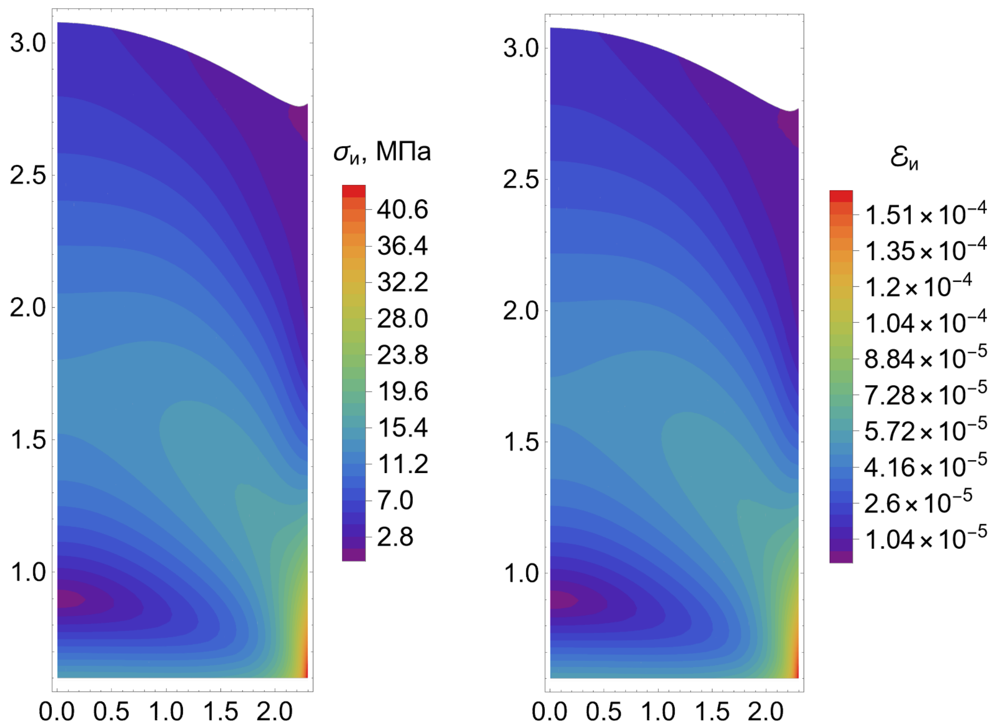


Рис. 29. Двумерные распределения в узлах элементов, момент времени $t = 100$ ч: (a) — радиальные перемещения, (b) — осевые перемещения



(a) (b)

Рис. 30. Двумерные распределения в узлах элементов, момент времени $t = 480$ ч: (a) — радиальные перемещения, (b) — осевые перемещения



(a) (b)

Рис. 31. Двумерные распределения в узлах элементов, момент времени $t = 100$ ч: (a) — интенсивности напряжений, (b) — интенсивности деформаций

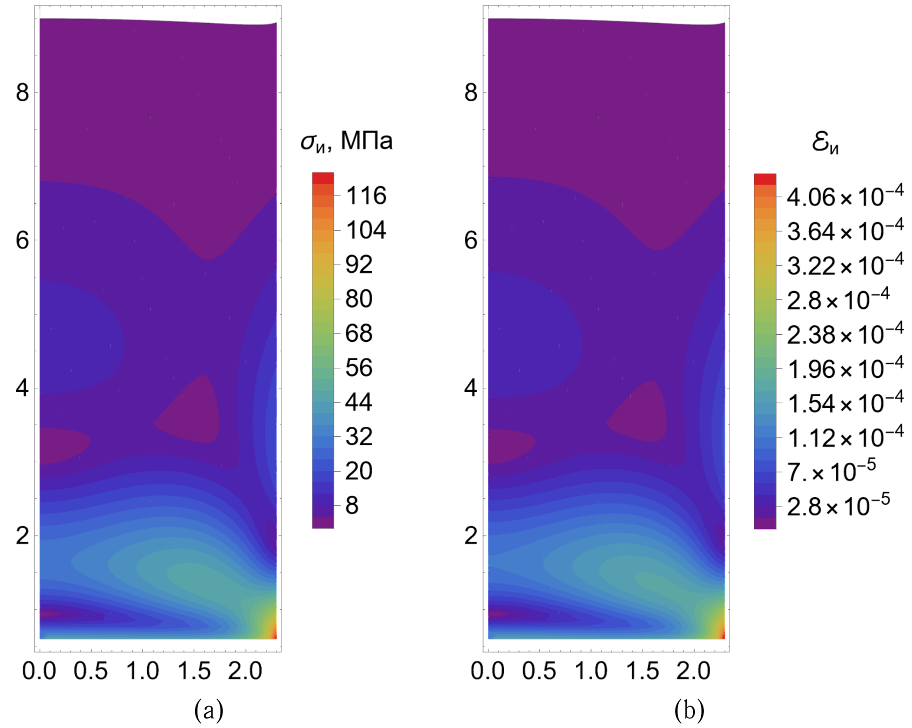


Рис. 32. Двумерные распределения в узлах элементов, момент времени $t = 480$ ч: (a) — интенсивности напряжений, (b) — интенсивности деформаций

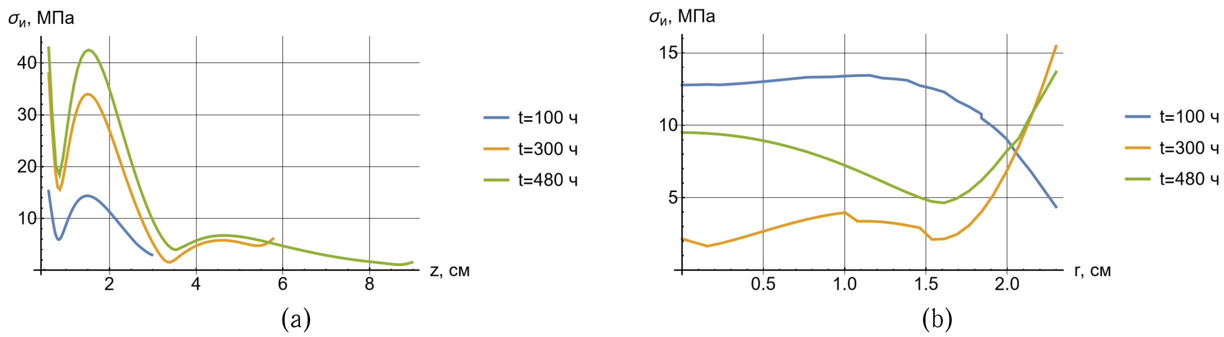


Рис. 33. Зависимости интенсивности напряжений: (a) — сечение 1, (b) — сечение 2

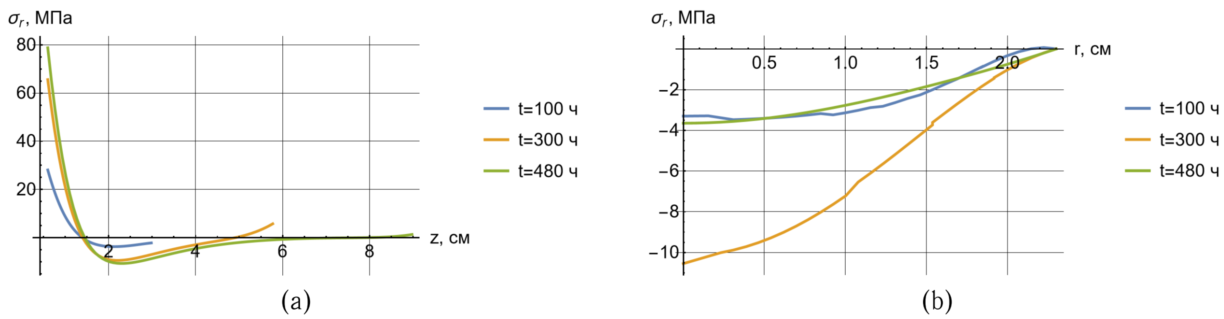
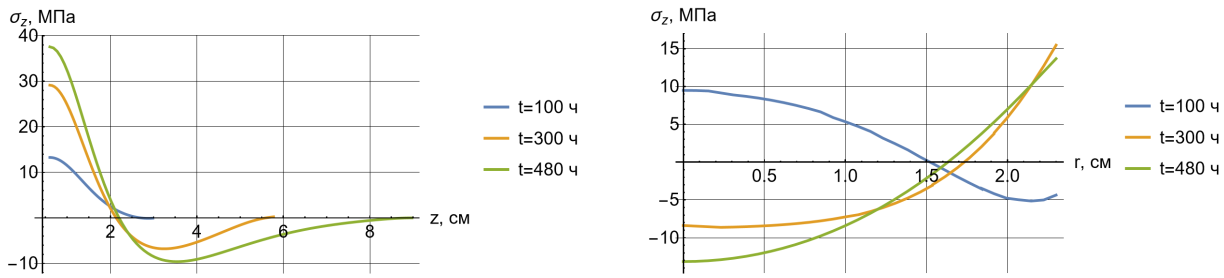
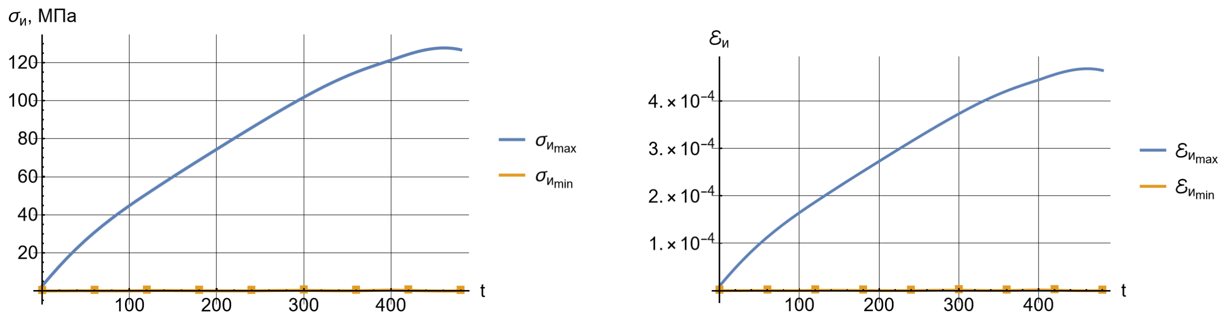


Рис. 34. Зависимости радиальных напряжений: (a) — сечение 1, (b) — сечение 2



(a) (b)

Рис. 35. Зависимости осевых напряжений: (a) — сечение 1, (b) — сечение 2



(a) (b)

Рис. 36. Зависимости от времени: (a) — интенсивности напряжений, (b) — интенсивности деформаций

3.5. Сравнение результатов

Из представленных выше результатов видно, что максимальные значения интенсивностей напряжений и деформаций достигаются для расчетов с закрепленной в направлении r боковой поверхностью кристалла S_4, а также для расчета с учетом взаимодействия со стенкой ампулы, однако они соответствуют разным областям: в случае закрепления боковой поверхности это правый верхний угол, соответствующий неоднородной геометрии поверхности, а в случае наличия стенки ампулы это область внутри ампулы вблизи поверхности S_3, что обусловлено условием прилипания на границе кристалла и ампулы, требующим равенства обеих компонент вектора перемещений. В случае если боковая поверхность является свободной, интенсивности напряжений уменьшаются в 250 (для $t = 100$ ч) и в 50 (для $t = 480$ ч) раз, интенсивности деформаций уменьшаются в 20 раз (для $t = 100$ ч) и в 50 раз (для $t = 480$ ч), а максимальные осевые перемещения уменьшаются в 8 раз. При использовании других значений упругих свойств кристалла A_xB_{1-x} (модуль Юнга в 16 раз больше) максимальные значения интенсивности напряжений примерно в 20 раз больше, а максимальные значения интенсивности деформаций в 110 раз больше по сравнению с аналогичным расчетом с базовым набором упругих параметров A_xB_{1-x}.

В случае, когда боковая поверхность кристалла закреплена в направлении r, максимальные радиальные перемещения достигаются вблизи верхней поверхности кристалла S_3. Для расчета со свободной боковой поверхностью они соответствуют области вблизи поверхности S_4, не зависят от выбранных упругих свойств материала кристалла и увеличиваются в 6 раз для момента времени $t = 100$ ч и в 22 раза для момента времени $t = 480$ ч. В случае наличия взаимодействия со стенкой ампулы максимальные радиальные перемещения расположены вблизи поверхности S_3: в правом верхнем углу кристалла и верхней части ампулы — и увеличиваются незначительно по сравнению с расчетом со свободной боковой поверхностью.

Для расчетов, соответствующих закрепленной боковой поверхности кристалла и учету взаимодействия со стенкой ампулы, уровень максимальных интенсивностей напряжений практически не изменяется с течением времени и находится в диапазоне 450–600 МПа и 600–800 МПа соответственно. Аналогичная ситуация с максимальными интенсивностями деформаций: они находятся в диапазоне от $2,5 \cdot 10^{-2}$ до $3,5 \cdot 10^{-2}$ и от $1,2 \cdot 10^{-2}$ до $1,4 \cdot 10^{-2}$. Для расчетов со свободной боковой поверхностью эти значения увеличиваются с течением времени: в зависимости от выбранных упругих свойств материала кристалла максимальная интенсивность напряжений увеличивается от близких к нулевым значениям до 7,3 МПа либо до 126,7 МПа, максимальная интенсивность деформаций — до $4,13 \cdot 10^{-6}$ либо $4,64 \cdot 10^{-4}$.

4. Заключение

Представлены формулировки задачи направленной кристаллизации двухкомпонентного раствора, а также квазистатической задачи механики деформируемого твердого тела в осесимметричной постановке. С использованием известных температурного поля и формы выращенного кристалла на текущий момент времени, полученных в ходе решения задачи кристаллизации многокомпонентного раствора, выполнено моделирование напряженно-деформированного состояния твердой фазы, включающей затравку, выращенный кристалл и стенку ампулы. Изложен численный алгоритм решения задачи механики, основанный на методе конечных элементов. Проведено несколько серий расчетов, соответствующих различным граничным условиям на боковой поверхности кристалла, а также разным наборам упругих характеристик материала кристалла. Сравнение полученных результатов показало, что максимальные напряжения, деформации и осевые перемещения достигаются в случае взаимодействия кристалла со стенкой ампулы, а также если боковая поверхность кристалла закреплена в радиальном направлении.

Список литературы

[1] Гусев А.О., Щерица О.В., Мажорова О.С. Анализ устойчивости методов решения задачи о фазовом переходе // Дифференциальные уравнения. 2019. Т. 55, № 7. С. 929–939. https://doi.org/10.1134/S0374064119070069

[2] Gusev A.O., Shcheritsa O.V., Mazhorova O.S. Conservative finite volume strategy for investigation of solution crystal growth techniques // Computers & fluids. 2020. Vol. 202, No. 104501. https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2020.104501

[3] Зарубин B.C., Кувыркин Г.Н. Математические модели механики и электродинамики сплошной среды. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2008. 512 с.

[4] Розин Л.А. Вариационные постановки задач для упругих систем. Л.: Изд-во Ленинградского университета, 1978. 222 с.

[5] Bathe K.-J. Finite Element Procedures. Prentice-Hall, 1996. 1052 p.

[6] Зенкевич О. Метод конечных элементов в технике. М.: Мир, 1975. 318 с.

[7] Сегерлинд Л. Применение метода конечных элементов. М.: Мир, 1979. 392 с.

[8] Hestenes M.R., Stiefel E. Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems // Journal of Research of the National Bureau of Standards. 1952. Vol. 49, No. 6. P. 409–435. http://dx.doi.org/10.6028/jres.049.044

[9] Mechanical Properties Calculation of II-VI Semiconductors / Martinez A.M. [et al.] // Procedia Materials Science. 2015. Vol. 8. P. 656–664. https://doi.org/10.1016/j.mspro.2015.04.122

[10] Liu J., Zhang G. Numerical Simulation of the Thermal Stress Field during Vertical Bridgman CdZnTe Single Crystal Growth // Journal of the Korean Physical Society. 2008. Vol. 53, No. 5. P. 2989–2995. https://doi.org/10.3938/jkps.53.2989

[11] Numerical study of thermal stresses for the semiconductor CdZnTe in vertical Bridgman / Jamai H. [et al.] // International Letters of Chemistry, Physics and Astronomy. 2015. Vol. 55. P. 67–79. https://doi.org/10.56431/p-i37881

Содержание