

## شبیه‌سازی رشد تک بلور BGO به وسیله روش ارتقاء یافته چکرالسکی با

### گرادیان دمای پایین

شیرین امید<sup>1\*</sup>، محمدحسین توکلی<sup>1</sup>، خیراله محمدی<sup>2</sup>

<sup>1</sup>گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه بوعلی سینا، همدان، ایران

<sup>2</sup>گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه مالک اشتر، تهران، ایران

دریافت: 1396/09/29 ویرایش نهائی: 1397/01/16 پذیرش: 1397/02/03

#### چکیده

در این مقاله میدان دما و جریان شاره در مراحل مختلف از رشد تک بلور BGO به روش چکرالسکی با گرادیان دمای پایین و استفاده از سامانه گرمایش مقاومتی شبیه‌سازی شده و کیفیت بلور رشد یافته با استفاده از تنش گرمایی ایجاد شده در آن، در ارتفاع‌های مختلف بررسی شده است. پیکربندی سامانه رشد استفاده شده در سامانه مورد مطالعه مطابق با یک سامانه واقعی در آزمایشگاه و شامل یک لوله سرامیکی استوانه‌ای، محافظ گرمایی و سه منطقه گرمایی المنتی با شعاع‌های مختلف به منظور تولید و کنترل گرادیان دمای پایین می‌باشد. انتقال حرارت تابشی سطح به سطح و نیز تابش داخلی در محاسبات سامانه رشد در نظر گرفته شده است. نتایج شبیه‌سازی و انطباق آن با داده‌های تجربی نشان می‌دهد که گرادیان دمای پایین و پیکربندی خاص سامانه منجر به بهینه شدن فصل مشترک بلور-مذاب، کاهش تنش‌های گرمایی و بهبود کیفیت بلور رشد یافته می‌گردد.

**کلیدواژگان:** شبیه‌سازی رایانه‌ای، انتقال گرما، میدان شاره، روش چکرالسکی، تک بلور

#### مقدمه

کمتری نسبت به بقیه (جهت کنترل دما) می‌باشد. در این تحقیق به جای بلور دانه از یک سیم پلاتینی استفاده شده است [8]. یک دیسک عایق نیز در بالای کوره به نحوی تعبیه شده است که بتوان فرآیند رشد را مشاهده کرد، به عبارت دیگر این سامانه رشد بلور یک سامانه باز است.

در تحقیق پیش رو انتقال حرارت تابشی سطح به سطح (بین سطوح مختلف درون سامانه) و تابش داخلی (درون بلور رشد یافته) با محاسبه فاکتورهای دید مورد بررسی قرار گرفته‌است. تحقیقات بسیار در این خصوص از نقش مهم انتقال حرارت تابشی در فرآیند رشد بلور حکایت دارد [9-11].

شکل و عمق فصل مشترک بلور-مذاب نیز عامل مهمی است که برای پی بردن به کیفیت بلور رشد یافته مورد مطالعه قرار گرفته است [12-14].

برای رشد تک بلورهای BGO ( $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$ ) از دو روش چکرالسکی متداول (گرادیان دمای بالا) و سامانه گرمایش القایی [1و2] و روش چکرالسکی با گرادیان دمای پایین و سامانه گرمایش مقاومتی [3-7] استفاده می‌شود. در روش دوم تک بلور BGO می‌تواند با کیفیت بسیار بالا و اندازه بزرگ رشد پیدا کند. به همین دلیل این روش تا حدود زیادی جایگزین روش اول برای رشد این بلور شده است.

اجزای سامانه رشد بلور بررسی شده در این تحقیق شامل بوتۀ پلاتینی، المنت‌های گرمایی، لوله سرامیکی و دیسک عایق (به منظور کاهش تأثیرات انتقال حرارت تابشی و تنظیم گرادیان دما) می‌باشد (شکل 1). المنت‌ها به صورت حلقه‌ای و در سه ناحیه مجزا در بالا، پایین و میانه سامانه قرار گرفته‌اند که ناحیه میانی دارای شعاع

\* نویسنده مسئول: sh.omid86@yahoo.com

جریان سیال در مذاب و گاز:

1

$$\rho \vec{V} \cdot \nabla \vec{V} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{V} + \rho \beta g (T - T_0) \hat{e}_z$$

معادله پیوستگی:

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0$$

انتقال گرما به وسیله همرفت و رسانش:

$$\alpha \nabla^2 T_f - \vec{V} \cdot \nabla T_f = 0$$

$$\nabla^2 T_i + q_i = 0$$

شرایط مرزی نیز عبارتند از،

مرزهای جامد-شاره:

$$\vec{V} = 0$$

5

فصل مشترک مذاب-گاز:

$$-k_m \frac{\partial T_m}{\partial \hat{n}} = -k_g \frac{\partial T_g}{\partial \hat{n}} + \sigma \varepsilon_i \sum_i (T_m^4 - T_i^4) F_{m-i}$$

6

$$\mu_m \frac{\partial u_m}{\partial \hat{n}} - \mu_g \frac{\partial u_g}{\partial \hat{n}} = \frac{\partial \gamma}{\partial \hat{t}} = \frac{\partial \gamma}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial \hat{t}}$$

7

$$V_{\hat{n}} = 0$$

8

در فصل مشترک بلور-مذاب:

9

$$k_m \frac{\partial T_m}{\partial \hat{n}} - k_s \frac{\partial T_s}{\partial \hat{n}} - n^2 \varepsilon_{sm} \sigma \sum_i (T_s^4 - T_i^4) F_{s-i} = -\rho_s H_f V_g$$

$$V_\phi = r \omega_s$$

10

در فصل مشترک بلور-گاز:

11

$$-k_s \frac{\partial T_s}{\partial \hat{n}} - n^2 \varepsilon_s \sigma \sum_i (T_s^4 - T_i^4) F_{s-i} = -k_g \frac{\partial T_g}{\partial \hat{n}}$$

$$V_\phi = r \omega_s$$

12

در سطوح خارجی سامانه رشد:

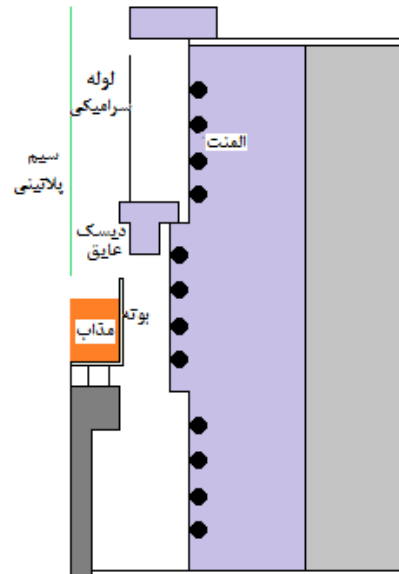
$$-k_i \frac{\partial T_i}{\partial \hat{n}} = h_i (T_i - T_a) + \sigma \varepsilon_i (T_i^4 - T_a^4)$$

13

در سطوح داخلی سامانه رشد:

$$-k_c \frac{\partial T_c}{\partial \hat{n}} - \sigma \varepsilon_c (T_c^4 - T^4) = -k_g \frac{\partial T_g}{\partial \hat{n}}$$

14



شکل 1. نمایی از سامانه رشد چکراسکی BGO با گرادیان دمایی پایین.

هدف از این تحقیق آنالیز رایانه‌ای سامانه رشد بلور چکراسکی با گرمایش مقاومتی برای بررسی کیفیت تک بلور رشد یافته در ارتفاع‌های مختلف است. توزیع دما، جریان شاره، فصل مشترک بلور-مذاب و تنش‌های گرمایی در بلور عواملی هستند که مورد ارزیابی قرار خواهند گرفت. در نهایت نتایج به دست آمده با نتایج مشاهده شده در آزمایشگاه مقایسه می‌گردد.

## مدل ریاضی

الف) معادلات اساسی

جریان شاره و انتقال حرارت: برای ساخت مدل ریاضی مناسب، فرضیات زیر در نظر گرفته می‌شوند [7]:

- سیستم در حالت شبه‌پایا بوده و دارای تقارن استوانه‌ای است.
- همه مواد خطی و همگن می‌باشند.
- مذاب و گاز سیالات تراکم‌ناپذیر نیوتنی هستند.
- جریان‌ها به صورت لایه‌ای می‌باشند.
- بلور از نظر تابش نیمه شفاف است. بنابراین معادلات اساسی جریان شاره، پیوستگی و انتقال حرارت در سامانه رشد به صورت زیر می‌باشند:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{rr} \\ \sigma_{\theta\theta} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{rz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{rr} - \alpha T \\ \varepsilon_{\theta\theta} - \alpha T \\ \varepsilon_{zz} - \alpha T \\ \varepsilon_{rz} \end{bmatrix} \quad 19$$

تنش فون میسر برای نشان دادن تنش‌های ترموالاستیک در بلورها استفاده می‌شود. پس از به دست آوردن تنش‌های نرمال و برشی، تنش فون میسر به وسیله فرمول زیر محاسبه می‌شود:

$$\sigma_{vm} = \sqrt{\frac{(\sigma_r - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{\theta\theta} - \sigma_{rr})^2 + (\sigma_{\theta\theta} - \sigma_{zz})^2 + 6\sigma_{rz}^2}{2}} \quad 20$$

(ب) شرایط محاسبه:

پارامترهای سامانه رشد در جدول 1 و خواص فیزیکی BGO در جدول 2 لیست شده‌اند. اعداد بدون بُعد پراتل، گراشف و رینولدز از خواص ترموفیزیکی BGO در سامانه‌اند که به ترتیب عبارتند از 20/7، 400000 و 211.

در این مقاله چند مرحله از فرآیند رشد بررسی می‌شوند که عبارتند از قبل و بعد از تماس سیم پلاتینی با مذاب (مرحله دانه‌گذاری)، و پس از رشد بلور در سه ارتفاع مختلف 1cm، 3cm و 5cm. لازم به ذکر است که در مرحله دانه‌گذاری، از سیم پلاتینی به جای بلور دانه استفاده می‌شود.

(ج) حل معادلات:

1: برای حل معادلات از روش عناصر متناهی (بسته نرم‌افزاری FlexPDE [18]) استفاده شده است.

2: محاسبات به صورت سراسری و گام به گام انجام شده است. گام اول محاسبه گام به گام عدد گراشف، عدد رینولدز و عدد مارانگونی از صفر تا مقدار نهایی، گام دوم محاسبه شکل فصل مشترک مذاب-بلور، گام سوم وارد کردن انتقال حرارت تابشی و تصحیح فصل مشترک بلور-مذاب، گام آخر محاسبه تنش‌های گرمایی در بلور رشد یافته.

3: یک برنامه رایانه‌ای برای محاسبه فاکتورهای دید در انتقال حرارت تابشی برای سامانه رشد به وسیله

اندیس‌های  $f, g, s, m, i, d, c$  به ترتیب به قسمت‌های جامد سامانه، مذاب، بلور، گاز، سیال (گاز و مذاب) و بوته اشاره دارند. در این معادلات  $\sigma$  رسانندگی الکتریکی بوته،  $\vec{V} = (u, v, w)$  سرعت شار،  $p$  فشار،  $T$  دما،  $g$  شتاب جاذبه زمین،  $\beta$  ضریب انبساط حرارتی،  $\mu$  گرانیوی دینامیکی،  $\alpha$  پخشندگی گرمایی،  $\gamma$  کشش سطحی،  $\varepsilon$  گسیلندگی،  $k$  ضریب هدایت گرمایی،  $\rho$  چگالی،  $n$  بردار واحد عمود بر سطح و  $\vec{r}$  بردار یکه مماسی می‌باشد.

معادلات تنش: تغییرات دما درون یک پیوستگی الاستیک به تنش‌های گرمایی منجر می‌شود. نظریه ترموالاستیکی خطی بر اساس رابطه بین کرنش‌های گرمایی و کرنش‌های مکانیکی است. ماده ترموالاستیک ایزوتروپ، همگن و با خواص ثابت فرض می‌شود. قوانین اساسی معادلات تنش و کرنش به صورت زیر بیان می‌شود [15]:

رابطه تنش-کرنش بلور عبارت است از:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} (\varepsilon_{kl} - \alpha \theta \delta_{kl}), \quad (\theta = T - T_0) \quad 15$$

که در این معادله  $\sigma_{ij}$  تانسور تنش و  $C_{ijkl}$  تانسور ثابت الاستیک است که وابسته به ساختار بلور و جهت رشد می‌باشد.  $\alpha$  ضریب انبساط گرمایی و  $\varepsilon_{kl}$  و  $\delta_{kl}$  به ترتیب، تانسور کرنش و تانسور دلتای کرونکر می‌باشند.

$$\varepsilon_{rr} = \frac{\partial u_r}{\partial r}, \quad \varepsilon_{\theta\theta} = \frac{u_r}{r}, \quad \varepsilon_{zz} = \frac{\partial u_z}{\partial z}, \quad 16$$

$$\varepsilon_{r\theta} = 0, \quad \varepsilon_{\theta z} = 0, \quad \varepsilon_{rz} = \left( \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} \right)$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \sigma_{rr}) - \frac{1}{r} \sigma_{\theta\theta} + \frac{\partial \sigma_{rz}}{\partial z} = 0 \quad 17$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \sigma_{rz}) + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} = 0 \quad 18$$

همچنین BGO ساختار مکعبی دارد بنابراین ماتریس ثابت الاستیک دارای سه مؤلفه مستقل است. رابطه کرنش-تنش در مختصات استوانه‌ای عبارت است از:

| جدول 2. خواص گرما فیزیکی استفاده شده در محاسبات [16 و 17] |              |                       |
|---|--------------|-----------------------|
| پارامتر   | نشانه        | مقدار                 |
| چگالی ( $kg/m^3$ )  | $\rho_s$     | 7130                  |
|   | $\rho_m$     | 6,65                  |
| دمای ذوب ( $^{\circ}C$ )                                  | T            | 1050                  |
| رسانندگی گرمایی ( $W/m \cdot K$ )                         | $k_m$        | 0,78                  |
|   | $k_g$        | 0,024                 |
|   | $k_s$        | 0,78                  |
| نفوذپذیری گرمایی ( $m^2/s$ )                              | $\alpha_m$   | $2,99 \times 10^{-7}$ |
|   | $\alpha_g$   | $2,7 \times 10^{-4}$  |
| انبساط پذیری گرمایی ( $K^{-1}$ )                          | $\beta_m$    | $7,6 \times 10^{-5}$  |
|   | $\beta_g$    | 0,0027                |
| ویسکوزیته سینماتیک ( $m^2/s$ )                            | $\nu_m$      | $6,2 \times 10^{-6}$  |
|   | $\nu_g$      | $1,14 \times 10^{-4}$ |
| ویسکوزیته دینامیک ( $kg/m.s$ )                            | $\mu_m$      | 0,044                 |
| گسیلندگی  | $\epsilon_m$ | 0,8                   |
|   | $\epsilon_s$ | 0,8                   |

### نتایج و بحث

در ابتدا به منظور اعتبارسنجی روش محاسباتی به کار رفته در این تحقیق و سنجش میزان تطابق آن با داده‌های آزمایشگاهی، نمودار دما را به صورت تجربی و محاسباتی در امتداد محور مرکزی سامانه رشد بدون بوته به دست آوردیم (شکل 2).

اندازه‌گیری از جایی که بوته قرار می‌گیرد تا دریاچه بالای سامانه رشد انجام شده است. خطای ترموکوپل در اندازه‌گیری دما  $1^{\circ}C$  است. در شرایط مشابه نمودار گرمایی را به وسیله شبیه‌سازی نیز به دست آوردیم. مشاهده شد که نمودار محاسباتی مطابقت خوبی با اطلاعات تجربی دارد و این مسأله اعتبار مدل استفاده شده و روش محاسبات را در تحقیق پیش رو اثبات می‌کند.

نویسندگان مقاله، تهیه شده است. برای محاسبه تابش داخلی فرض شده است که بلور رشد یافته یک بلور نازک اپتیکی است که سطوح آن با هم تبادل انرژی تابشی دارند. در این تقریب بلور به عنوان یک محفظه تابشی در نظر گرفته شده است که دارای سطوح کدر نازک است [19].

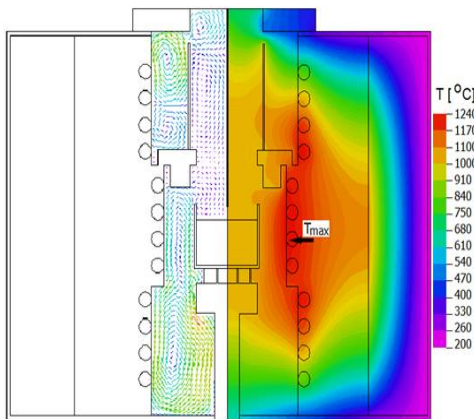
4: نتایج محاسبه به دست آمده با مشاهدات و اندازه‌گیری‌های به دست آمده در آزمایشگاه مقایسه شده است.

جدول 1. پارامترهای سامانه رشد استفاده شده در محاسبات.

| پارامتر (واحد)              | نشانه      | مقدار |
|-----------------------------|------------|-------|
| شعاع داخلی بوته (mm)        | $r_c$      | 25    |
| ضخامت بوته (mm)             | $l_c$      | 1     |
| ارتفاع داخلی بوته (mm)      | $h_c$      | 40    |
| شعاع داخلی المنت ها (mm)    | $r_e$      | 5     |
| ارتفاع هر ناحیه المنتی (mm) | $h_e$      | 70    |
| ضخامت کوره (mm)             | $l_f$      | 3     |
| ضخامت لایه ضد آتش (mm)      | $l_{fi}$   | 50    |
| ضخامت عایق (mm)             | $l_i$      | 60    |
| ارتفاع کوره (mm)            | $h_f$      | 250   |
| ارتفاع پایه بوته (mm)       | $h_{cb}$   | 10    |
| سرعت چرخش بوته (rev/min)    | $\omega_s$ | 20    |
| دمای محیط ( $^{\circ}C$ )   | $T_a$      | 25    |

در این شرایط سامانه رشد در سه حالت شبیه‌سازی شده است:

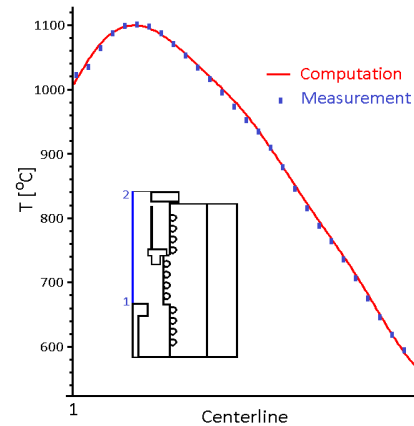
حالت اول: سامانه رشد بدون سیم پلاتینی  
 شکل 4 توزیع دما (سمت راست) و میدان شماره (سمت چپ) را در سامانه رشد نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود بیشینه دما بر روی المنت.



شکل 4: توزیع دما (سمت راست) و جریان شماره (سمت چپ) در سامانه رشد در حالتی که سیم پلاتینی وارد مذاب نشده است.

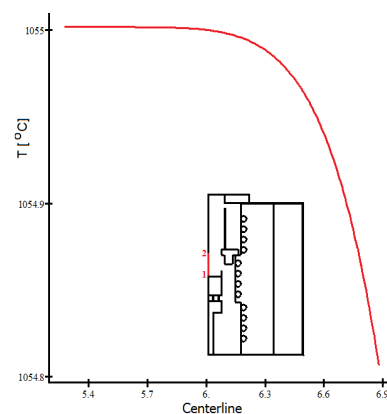
ناحیه میانی و  $1240^{\circ}\text{C}$  می‌باشد که هر چه از این محل دورتر شویم دما کاهش می‌یابد. اطراف سطح مذاب نیز تغییرات دمایی بسیار اندکی مشاهده می‌شود که به رشد بلور با کیفیت بالا کمک می‌کند.

جریان شماره در ناحیه درون لوله سرامیکی آرام‌تر از قسمت‌های دیگر است زیرا این لوله مانع از رسیدن تابش و حرارت بالای المنت‌ها به این منطقه می‌شود. بنابراین اختلاف دما و انتقال گرما درون لوله سرامیکی، جایی که سیم پلاتینی قرار می‌گیرد، کاهش یافته و منجر به یکنواخت‌تر شدن توزیع دما در این قسمت می‌شود. این مسأله تأثیر به‌سزایی در رشد بلور با تنش‌های گرمایی و نواقص بلوری کمتر دارد. دیسک عایق نیز که بین دو ناحیه المنتی بالا و میانی قرار دارد نیز در این امر بی‌تأثیر نیست. در قسمت پایین کوره مشاهده می‌شود که به دلیل تأثیر دو ناحیه المنت میانی و پایینی



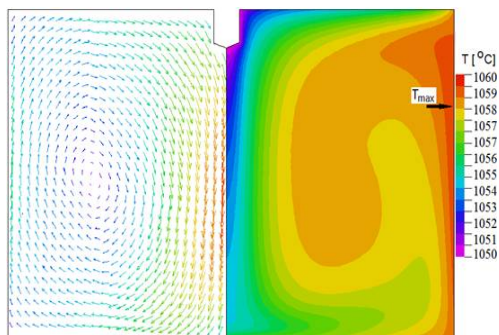
شکل 2: نمودار گرمایی در امتداد محور تقارن سامانه رشد از مکان قرار گرفتن بوته تا دریچه بالای کوره، به صورت تجربی و محاسباتی.

آزمایشاتی که به منظور پیدا کردن شرایط بهینه دمایی در آغاز رشد بلور به روش گرادین دمایی پایین انجام شده است نشان می‌دهند که بهتر است قبل از تماس سیم پلاتینی با سطح مذاب، دمای سطح مذاب تا  $4\text{cm}$  بالای آن برابر با دمای ذوب BGO باشد. در این حالت تنش‌های گرمایی کاهش یافته و تک بلور با خاصیت آشکارسازی مطلوب می‌تواند رشد کند. شکل 3 نمودار تغییرات دما از مرکز سطح مذاب ( $1055^{\circ}\text{C}$ ) تا  $4\text{cm}$  بالای آن را ( $1054,8^{\circ}\text{C}$ ) نشان می‌دهد. تغییرات دمایی در این قسمت  $0,2^{\circ}\text{C}$  است که مطابق با نتایج تجربی است.



شکل 3: تغییرات دما در سطح مذاب تا  $4$  سانتی‌متر بالای آن.

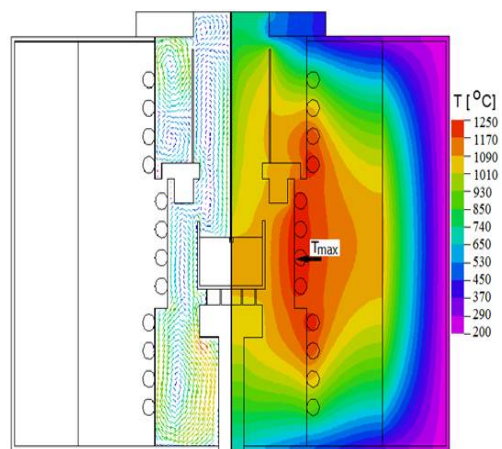
شکل 6 میدان سرعت (سمت چپ) و خطوط هم‌دما (سمت راست) در مذاب را نشان می‌دهد. جریان چرخشی ساعتگرد از اطراف محور تقارن به سمت پایین و از دیوارهٔ بوت به سمت بالا می‌باشد. بیشینهٔ سرعت جریان اطراف محور تقارن است. میدان شاره در مذاب از اختلاف دما و همرفت مارانگونی ناشی می‌شود. بیشینهٔ دما در مذاب  $1060^{\circ}\text{C}$  در دیوارهٔ بوت و کمینهٔ آن در مرکز فصل مشترک گاز-مذاب است (جایی که بلور شکل می‌گیرد).



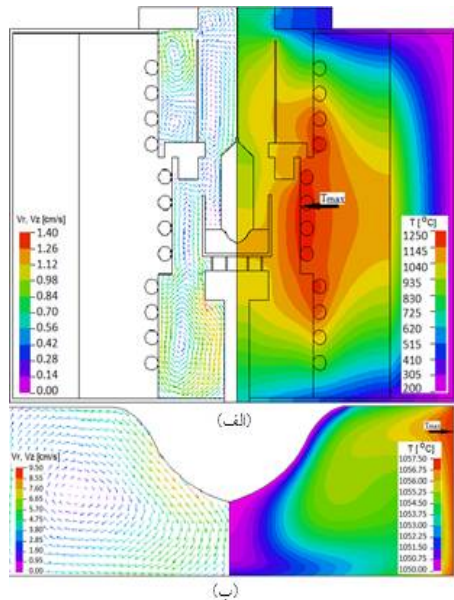
شکل 6. توزیع دما (سمت راست) و جریان شاره (سمت چپ) در مذاب در حالتی که سیم پلاتینی وارد مذاب نشده است.

شکل‌های 7 تا 9 توزیع دما (سمت راست) و میدان شاره (سمت چپ) برای (الف) تمام سامانه و (ب) مذاب در بلورهای رشدیافته با ارتفاع 1cm، 3cm و 5cm را نشان می‌دهد. بیشینهٔ دمای سامانه در همهٔ موارد در حدود  $1250^{\circ}\text{C}$  است. در این شکل‌ها یک جریان گردابی ساعتگرد در مذاب مشاهده می‌شود که از همرفت طبیعی به‌خاطر اختلاف دما و همچنین اثر مارانگونی برمی‌خیزد. سرعت بیشینهٔ این جریان اطراف خط مرکزی و حدود  $1/4 \text{ cm/s}$  برای همهٔ موارد است. ساختار پایهٔ میدان‌های جریان در مذاب برای همهٔ این شکل‌ها تقریباً مشابه یکدیگر است اما با شدت‌های مختلف که این اختلاف به‌خاطر تفاوت در انتقال حرارت، گرمای وارد شده از دیواره و کف بوت، و گرمای خارج شده از فصل مشترک گاز-مذاب و بلور-

جریان‌های شاره سرعت بیشتری یافته است. حالت دوم: سامانهٔ رشد پس از قرار دادن سیم پلاتینی: در گام دوم سیم پلاتینی را در کوره قرار دادیم. میدان دما در کوره (سمت راست) و میدان شاره در هوا که از جریان همرفت طبیعی و به‌دلیل اختلاف دما ایجاد می‌شود (سمت چپ) در شکل 5 نشان داده شده است. دو جریان گردابی قوی با چرخش در جهت‌های مختلف خارج از لولهٔ سرامیکی وجود دارد. این پیچیدگی به‌خاطر گرمای گسیل شده از المنت بالایی، انتقال حرارت تابشی سطح به سطح و وجود عایق اطراف این منطقه است که مانعی برای ورود و خروج گرماس. در قسمت پایین سامانه یک جریان چرخشی ساعتگرد در جهت دیوارهٔ بوت به سمت پایین و از دیوارهٔ المنت (گرم‌ترین قسمت سامانه) به سمت بالا وجود دارد. جریان شاره در سامانه تأثیر مستقیمی بر میدان دما دارد. به‌عبارت دیگر خطوط هم‌دما به‌وسیلهٔ ساختار و دینامیک جریان شاره در سامانهٔ رشد تعیین می‌شوند. البته در این سامانهٔ رشد، لولهٔ سرامیکی و محافظ گرمایی نیز تأثیر مهمی بر توزیع دما دارند. بیشینهٔ دما در سامانه  $1240^{\circ}\text{C}$  بر روی المنت وسطی است.



شکل 5. توزیع دما (سمت راست) و جریان شاره (سمت چپ) در سامانهٔ رشد در حالتی که سیم پلاتینی وارد مذاب نشده است.

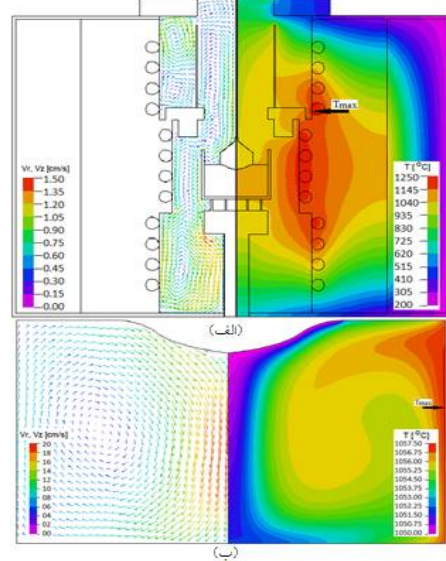


شکل 9. توزیع دما (سمت راست) و جریان شاره (سمت چپ)، الف: در کل سامانه ب: در مذاب برای بلور با ارتفاع 5cm.

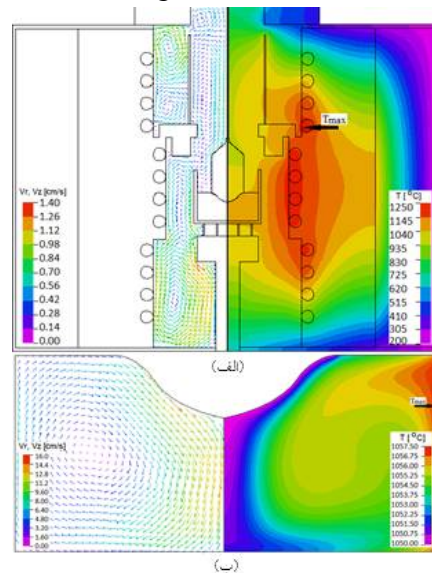
حالت سوم: سامانه رشد با بلور رشد یافته در سه ارتفاع مختلف:

در شکل 10 توزیع دما در بلور رشد یافته برای سه ارتفاع مختلف (الف) 1cm، (ب) 3cm و (ج) 5cm نشان داده شده است. نمودار دمایی در امتداد محور تقارن بلورهای رشد یافته در شکل 11 نشان داده شده است. اختلاف دما در بلور با ارتفاع 5cm برابر با  $130^{\circ}\text{C}$ ، ارتفاع 3cm برابر با  $93^{\circ}\text{C}$  و ارتفاع 1cm برابر با  $70^{\circ}\text{C}$  است. بنابراین با افزایش ارتفاع بلور تغییرات دما در بلور افزایش می‌یابد که ناشی از افزایش تبادل گرما در سطوح به وسیله انتقال حرارت تابشی سطح به سطح و داخلی، رسانش داخل بلور و گرمای وارد شده از فصل مشترک می‌باشد. با افزایش ارتفاع بلور گردان دمایی نیز افزایش پیدا می‌کند که موجب افزایش تنش‌های گرمایی در بلور رشد یافته می‌شود و در نتیجه کیفیت آن را کاهش می‌دهد.

مذاب در همه موارد می‌باشد. تغییرات دمایی بالایی در نزدیکی فصل مشترک بلور-مذاب وجود دارد که در شدت تبادل گرمایی بین مذاب و بلور و همچنین تنش‌های گرمایی و نواقص بلوری و در نتیجه کیفیت بلور رشد یافته تأثیر به‌سزایی دارد.



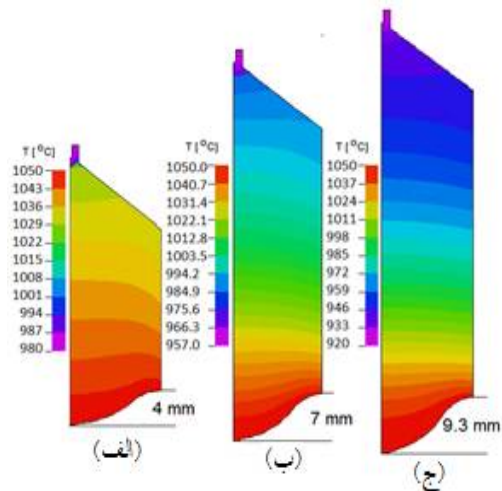
شکل 7. توزیع دما (سمت راست) و جریان شاره (سمت چپ)، الف: در کل سامانه ب: در مذاب برای بلور با ارتفاع 1cm.



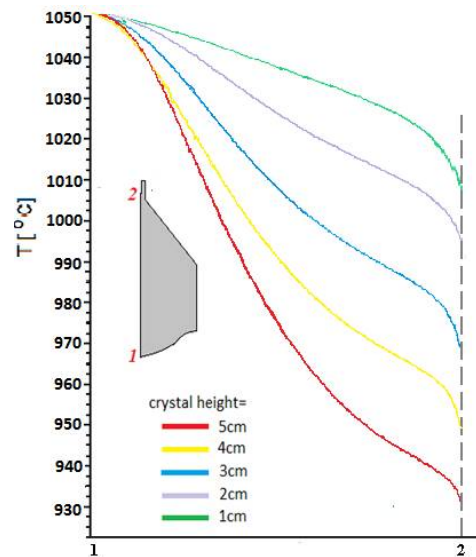
شکل 8. توزیع دما (سمت راست) و جریان شاره (سمت چپ)، الف: در کل سامانه ب: در مذاب برای بلور با ارتفاع 3cm.

پارامتر مهم دیگر در رشد بلور، فصل مشترک مذاب-بلور است. انتقال حرارت، ساختار جریان شاره و میدان دما نقش مهمی را در ساختار شکل فصل مشترک بلور-مذاب بازی می‌کنند. در شکل 10، شکل فصل مشترک محذب و موج است که به‌داخل مذاب فرورفته است. در حالی که شکل مطلوب برای آن مسطح می‌باشد. فرورفتگی فصل مشترک درون مذاب در شکل 10 الف: 4mm، ب: 7mm، ج: 9/3mm است. تابش داخلی و رسانندگی گرمایی در بلور، گرمای از دست رفته از سطوح بیرونی بلور، همرفت طبیعی و واداشته در مذاب بر روی شکل محذب فصل مشترک بلور-مذاب و عمق آن درون مذاب تأثیر دارد [20].

تابش داخلی در بلور و گرمایی که از سطوح آن خارج می‌شود در بلورهای بزرگتر منجر به افزایش انحنای فصل مشترک بلور-مذاب و نفوذ بیشتر به داخل مذاب می‌شود. به عبارت دیگر همرفت طبیعی قوی، گرادیان دمای شعاعی بالا در مذاب و گرمای منتقل شده در فصل مشترک مذاب-هوا بر روی میزان نفوذ فصل مشترک به داخل مذاب تأثیر می‌گذارد و به همین دلایل است که هرچه ارتفاع بلور افزایش می‌یابد عمق این فصل مشترک بیشتر شده که نشان از کاهش کیفیت بلور می‌باشد. شکل 12 تنش گرمایی را برای بلور رشد یافته با ارتفاع 5cm نشان می‌دهد. بیشینه تنش گرمایی برابر با 3MPa است که در ناحیه فصل مشترک بلور-مذاب و بر روی محور تقارن مشاهده می‌شود. همچنین قسمت بالایی بلور دارای تنش گرمایی کمتری است زیرا در آن قسمت بلور دما یکنواخت‌تر از قسمت‌های دیگر است.



شکل 10. توزیع دما در بلور رشد یافته برای سه ارتفاع مختلف الف: 4cm، ب: 3cm و ج: 5cm.



شکل 11. نمودار دما در امتداد محور تقارن بلور رشد یافته با ارتفاع‌های مختلف.

به‌علاوه با افزایش ارتفاع بلور حجم مذاب کاهش می‌یابد که به دریافت گرمای بیشتر از کف بوتله و افزایش انتقال گرما در مذاب منجر می‌شود و در نتیجه بر روی تبادل گرما بین مذاب و بلور تأثیر می‌گذارد. کنترل گرمای رسیده از کف بوتله بر شکل فصل مشترک بلور-مذاب و بهبود کیفیت آن اثر دارد [11].



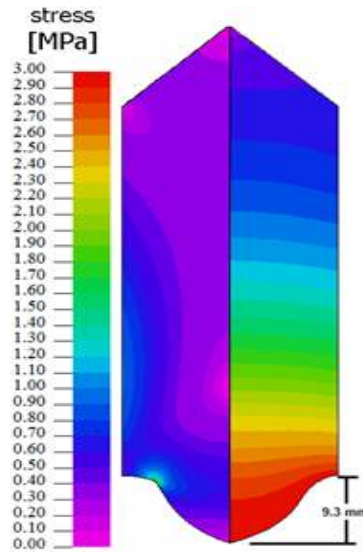


شکل 13. دو تصویر از بلور BGO رشد یافته توسط سامانه مورد مطالعه با ارتفاع (الف) 1cm و (ب) 5cm.

### نتیجه گیری

در این تحقیق یک شبیه‌سازی عددی دو بُعدی از رشد تک بلور BGO به روش چکرالسکی با گرادیان دمای پایین و با استفاده از روش عناصر متناهی انجام شده است. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که استفاده از سامانه گرمایش سه‌ناحیه‌ای مناسب در پیکربندی سامانه رشد برای ایجاد گرادیان بهینه دمایی آن، موجب شده است که این روش را ارتقاء یافته بنامیم.

نتایج محاسبات نشان می‌دهد پیکربندی مناسب سامانه موجب تنظیم و کنترل گرادیان دمایی لازم و انتقال حرارت در سامانه رشد بلور BGO و کاهش تنش‌های گرمایی در بلور رشد یافته شده است. قرار دادن لوله سرامیکی و دیسک عایق در سامانه مانع خوبی برای تبادل انتقال حرارت تابشی در سامانه بوده و موجب کاهش تنش گرمایی شده و کمک شایانی به یکنواخت شدن بلورهای رشد یافته و بهبود ساختار توزیع دما در آن‌ها کرده است. شرایط دمایی نیز که پیش از آغاز



شکل 12. توزیع دما (سمت راست) و تنش (سمت چپ) در بلور با ارتفاع 5cm.

همان‌طور که قبلاً اشاره شد نتایج عددی به دست آمده به صورت تجربی اعتبار سنجی شدند. شکل 13 دو تصویر از بلور رشد یافته با استفاده از سامانه مورد مطالعه را نشان می‌دهد. شرایط آزمایشگاه، پیکربندی سامانه رشد و تنظیمات دما برای رشد واقعی این دو بلور دقیقاً مشابه با آنچه که در شبیه‌سازی استفاده شده است، می‌باشد. در شکل 13 الف بلور BGO رشد یافته با ارتفاع 1cm و شعاع 1/2cm را نشان می‌دهد که بسیار شفاف و بدون ترک و مطابق با شکل 10 الف است. شکل 13 ب یک بلور BGO با ارتفاع 5cm را نشان می‌دهد که مطابق با شکل 10 ج است. ارتفاع و انحنای فصل مشترک بلور-مذاب در هر دو مورد نشان می‌دهد که پیش‌گویی‌های محاسباتی با نتایج به دست آمده تجربی انطباق خوبی دارند.

Cz growth for diffuse and specular crystal side surface, *Journal of Crystal Growth* 253 (2003) 383-397.

[7] I.Yu. Evstratov, S. Rukolaine, V.S. Yuferev, M.G. Vasiliev, A.B. Fogelson, V.M. Mamedov, V.N. Shlegel, Ya. V. Vasiliev, Yu.N. Makarov, Global analysis of heat transfer in growing BGO crystals (Bi<sub>4</sub>Ge<sub>3</sub>O<sub>12</sub>) by low-gradient Czochralski method, *Journal of Crystal Growth* 235 (2002) 371-376.

[8] V.M. Skorikov, Yu.F. Kargin, A.V. Egorysheva, V. V. Volkov, and M.M. Gospodinov, Growth of Sillenite-Structure Single Crystals, *Inorganic Materials* 41 (2005) 24-46.

[9] S.V. Bykova, V.D. Golyshev, M.A. Gonik, V.B. Tsvetovskiy, V.I. Deshko, A.Ya. Karvatskii, A.V. Lenkin, S. Brandon, O. Weinstein, A. Virozub, J.J. Derby, A. Yeckel, P. Sonda, Experimental and numerical analysis of coupled interfacial kinetics and heat transport during the axial heat flux close to the phase interface growth of BGO single crystals, *Journal of Crystal Growth* 266 (2004) 246-256.

[10] O.N. Budenkova, M.G. Vasiliev, V.N. Shlegel, N.V. Ivannikova, R.I. Bragin, V.V. Kalaev, Comparative Analysis of the Heat Transfer Processes during Growth of Bi<sub>12</sub>GeO<sub>20</sub> and Bi<sub>4</sub>Ge<sub>3</sub>O<sub>12</sub> Crystals by the Low-Thermal-Gradient Czochralski Technique, *Journal of Crystal Growth* 50 (2005) 100-105.

[11] K. Mazaev, V. Kalaev, E. Galenin, S. Tkachenko, O. Sidletskiy, Heat transfer and convection in Czochralski growth of large BGO Crystals, *Journal of Crystal Growth* 311 (2009) 3933-3937.

[12] J.H. Wang, D.H. Kim, J.S. Huh, Modelling of crystal growth process in heat exchanger method, *Journal of Crystal Growth* 174 (1997) 13-17.

[13] O.N. Budenkova, M.G. Vasilieva, V.S. Yufereva, E.N. Bystrovab, V.V. Kalaevb, V. Bermudezc, E. Dieguezc, Yu.N. Makarov, Simulation of global heat transfer in the Czochralski process for BGO sillenite crystals *Journal of Crystal Growth* 266 (2004) 103-108.

[14] J.H. Wang, D.H. Kim, D.S. Chung, Analysis of moving boundary problem of growth of

فرآیند رشد بلور ایجاد شده است، در این امر بی‌تأثیر نمی‌باشد. علاوه بر آن با مقایسه میزان انحنای فصل مشترک بلور-مذاب و مقدار فرورفتگی آن در مذاب، کیفیت بلورها در ارتفاع‌های مختلف ارزیابی شده و مشاهدات نشان دادند با وجود آنکه بلورهای با کیفیت نسبتاً مطلوبی تولید شده‌اند ولی با افزایش ارتفاع، کیفیت بلورها کاهش یافته است. مشاهدات تجربی که کاملاً در شرایط مشابه با شبیه‌سازی به دست آمدند مطابقت خیلی خوبی با نتایج عددی را نشان داده‌اند.

#### مرجع‌ها

[1] A.V. Kolesnikov, E.P. Galenin, O.Ts. Sidletskiy, V.V. Kalaev, Optimization of heating conditions during Cz BGO crystal growth, *Journal of Crystal Growth* 407 (2014) 43-47.

[2] H. Khodamoradi, M.H. Tavakoli, K. Mohammadi, Influence of crucible and coil geometry on the induction heating process in Czochralski crystal growth system, *Journal of Crystal Growth* 66 (2015) 421-429.

[3] Yu.A. Borovlev, N.V. Ivannikova, V.N. Shlegel, Ya.V. Vasiliev, V.A. Gusev, Progress in growth of large sized BGO crystals by the low-thermal-gradient Czochralski technique, *Journal of Crystal Growth* 229 (2001) 305-311.

[4] R.V. Murthy, M. Ravikumar, A. Choubey, KrishanLal, Lyudmila Kharachenko, V. Shleguel, V. Guerasimov, Growth and characterization of large-size bismuth germinate single crystals by low thermal gradient Czochralski method, *Journal of Crystal Growth* 197 (1999) 865-873.

[5] V.M. Mamedov, M.G. Vasiliev, V.S. Yuferev, D.Pantsurkin, V.N. Shlegel, Ya. V. Vasiliev, Control of multi-zone resistive heater in low temperature gradient BGO Czochralski growth with a weighing feedback, based on the global dynamic heat transfer model, *Journal of Crystal Growth* 312 (2010) 2814-2822.

[6] V.S. Yuferev, O.N. Budenkova, M.G. Vasiliev, S.A. Rukolaine, V.N. Shlegel, Ya.V. Vasiliev, A.I. Zhmakin, Variations of solid-liquid interface in the BGO low thermal gradients

transfer, *Journal of Crystal Growth* 262 (2004) 212-224.

[18] <http://www.pdesolutions.com>.

[19] M.H. Tavakoli, E. Mohammadi-Manesh and S. Omid, Simulation of temperature and flow fields in an inductively heated melt growth system, *Crystal Research and Technology* 45 (2010) 1117-1122.

[20] M.H. Tavakoli, S. Omid, E. Mohammadi-Manesh, Influence of active afterheater on the fluid dynamics and heat transfer during Czochralski growth of oxide single crystals, *CrystEngComm* 13 (2011) 5088-5093.

bismuteh germinate crystal by heat *The Chemical Engineering Journal* 13 (1996) 503-509.,

[15] R.B. Hetnarski, M.R. Eslami, *Thermal Stresses—Advanced Theory and Applications*, Springer, (2009).

[16] M.H. Tavakoli, H. Wilke, Numerical investigation of heat transport and fluid flow during the seeding process of oxide Czochralski crystal growth Part 1: non-rotating seed *Crystal and Research Technology* 42 (2007) 544-557.

[17] V.D. Golyshev, M.A. Gonik, Heat transfer in growing Bi<sub>4</sub>Ge<sub>3</sub>O<sub>12</sub> crystals under weak convection: II-radiative–conductive heat