

01

Расчет термоупругих напряжений вблизи фронта кристаллизации для монокристаллических стержней круглого сечения, выращиваемых из расплава

© С.И. Бахолдин, Е.В. Галактионов, Э.А. Тропп

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе,
194021 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: S.Bakholdin@mail.ioffe.ru

(Поступило в Редакцию 28 января 2014 г.)

Получены приближенные выражения для компонент тензора термоупругих напряжений в изотропном кристаллическом стержне круглого сечения, пригодные во всем кристалле, включая область вблизи фронта кристаллизации. С помощью полученных приближенных формул выполнены расчеты полей напряжений в монокристаллах лейкосапфира для модельных температурных полей. Показано, что именно у фронта кристаллизации термоупругие напряжения достигают максимальных значений.

Введение

Одной из основных причин, вызывающих возникновение дефектов в монокристаллах, выращиваемых из расплава, является пластическая деформация под действием термических напряжений [1]. В методах выращивания, в которых отсутствует контакт растущего кристалла со стенками контейнера, а его боковая поверхность остается свободной от механических нагрузок (методы Чохральского, Кирополуса, Степанова), напряжения возникают вследствие нелинейности температурных полей. Следствием пластической деформации может быть возникновение дислокаций, линий и полос скольжения, а при перестройке дислокационной структуры — появление малоугловых границ и развитие блочности. В связи с этим, расчетам термоупругих напряжений, возникающих в выращиваемых кристаллах, всегда уделялось большое внимание. В настоящее время для этой цели разрабатываются мощные программные пакеты, позволяющие рассчитывать теплообмен в реальных тепловых зонах и поля напряжений на разных стадиях выращивания кристалла (см., например, [2,3]). Однако подобные расчеты требуют больших затрат времени и сил на составление программ и использования мощных вычислительных средств. Для качественного анализа и сопоставления роли различных факторов, определяющих качество и структуру растущего кристалла, желательно иметь хотя бы приближенные аналитические выражения для компонент тензора напряжений в кристаллах различной формы.

Такие выражения могут быть получены путем асимптотического интегрирования уравнений термоупругости [4]. В этом методе решение ищется в виде ряда по малому параметру. Для кристаллов, выращиваемых способом Степанова, в качестве такого параметра может быть выбрано отношение характерного размера поперечного сечения к длине кристалла. Ранее этим методом были решены задачи термоупругости в кри-

сталлах цилиндрической формы в изотропном приближении [5], с учетом анизотропии теплофизических и упругих свойств кристалла [6], а также в случае температурной зависимости коэффициента теплового расширения [7]. Во всех случаях были получены приближенные аналитические выражения для температуры и компонент тензора термоупругих напряжений, пригодные всюду, кроме областей вблизи торцов кристаллического стержня (длина этих областей порядка поперечного размера кристалла).

С математической точки зрения характерной особенностью асимптотического подхода для тонких кристаллических стержней является наличие малого параметра при старших производных по продольной координате. Поэтому решение, получаемое в ходе основного итерационного процесса (так называемое „внешнее“ разложение), может лишь в среднем удовлетворять граничным условиям по температуре и напряжениям на торцах кристалла, в частности на фронте кристаллизации. В то же время при выращивании сапфира и многих других прозрачных монокристаллов с высокими температурами плавления и интенсивным радиационно-кондуктивным теплообменом именно вблизи фронта кристаллизации наблюдается наибольшая кривизна температурного поля и можно ожидать появления максимальных напряжений и образования дефектов.

Для компенсации возникающих невязок по граничным условиям в областях вблизи торцов необходимо вводить в них функции типа пограничного слоя (строить „внутреннее“ разложение) и искать решение задачи в виде суммы внешнего и внутреннего разложений. Погранслоиные поправки ищут в виде рядов по тому же малому параметру, но уже в полубесконечном стержне, возникающем после растяжения продольной координаты. Алгоритм построения пограничного слоя для случая изотропных кристаллов в виде стержней кругового сечения был рассмотрен в [5]. Он приводил к задаче нахождения напряжений в полубесконечном

круговом цилиндре с боковой поверхностью, свободной от напряжений, и заданными напряжениями на торце, которая может быть решена методом однородных решений [8,9]. Однако приближенные формулы для расчета температуры и полей термоупругих напряжений в кристаллическом стержне вблизи фронта кристаллизации не были получены.

В настоящей работе приводится алгоритм построения приближенных аналитических выражений для компонент тензора напряжений, пригодных для проведения расчетов во всем объеме изотропного кристаллического стержня круглого сечения, включая область вблизи фронта кристаллизации, для произвольного коэффициента Пуассона и сами приближенные формулы. Численные расчеты выполнены для монокристаллов сапфира с использованием модельных температурных полей.

Расчет напряжений

Решается стационарная осесимметричная задача термоупругости в изотропном прямом стержне кругового сечения. Исходными уравнениями являются уравнение теплопроводности, уравнения равновесия и закон Гука с учетом деформации теплового расширения. Предполагается, что теплообмен на боковой поверхности кристаллического стержня достаточно мал (критерий Био много меньше единицы) и отсутствуют источники тепла внутри кристалла. Граничные условия такие же, как и в работе [5]: температура торца стержня ($z = 0$) равна температуре плавления, боковая поверхность и торец свободны от напряжений. Вводятся следующие масштабы для независимых переменных и искомых функций (черточками сверху отмечены размерные величины):

$$r = \bar{r}/R, \quad z = \bar{z}/L, \quad T = (\bar{T} - \bar{T}_0)/\bar{T}_0,$$

$$\alpha = \bar{\alpha}\bar{T}_0, \quad \sigma_i = \bar{\sigma}_i/E, \quad \tau_{rz} = \bar{\tau}_{rz}/E, \quad i = r, \theta, z.$$

Здесь r , θ и z — цилиндрические координаты, R , L — радиус и длина цилиндра, $\varepsilon = R/L$ — малый параметр задачи, \bar{T}_0 — температура плавления, T , α — безразмерные температура и коэффициент теплового расширения, σ_i , τ_{rz} — компоненты тензора напряжений, E — модуль Юнга, ось z направлена по оси стержня, совпадает с направлением вытягивания, а начало координат находится в центре нижнего основания цилиндра.

Алгоритм построения асимптотического процесса приведен в [5]. Приближенная формула, описывающая с точностью до членов порядка ε^2 температурное поле в цилиндре (включая и область вблизи торца $z = 0$), имеет следующий вид (см. [5]):

$$\bar{T}(r, z) \approx \bar{T}_0 \{ T^{\text{ext}}(r, z) + T^{\text{int}}(r, z) \},$$

$$T^{\text{ext}}(r, z) = 1 + T_0(z) + \frac{(1 - 2r^2)}{8} \frac{d^2 T_0(z)}{dz^2} \varepsilon^2,$$

$$T^{\text{int}}(r, z) = \frac{d^2 T_0(0)}{dz^2} \sum_{k=1}^{20} \frac{J_0(\mu_k r) e^{-\mu_k \frac{z}{\varepsilon}}}{\mu_k^2 J_0(\mu_k)} \varepsilon^2. \quad (1)$$

Здесь $T^{\text{ext}}(r, z)$ — внешнее разложение (результат основного итерационного процесса), а $T^{\text{int}}(r, z)$ — внутреннее разложение (погранслоиная поправка), необходимое для компенсации невязки, так как внешнее разложение удовлетворяет граничному условию на торце только в среднем (интегрально), $T_0(z)$ — средняя по сечению безразмерная температура (замеряется экспериментально с помощью термодпары), μ_k , $k = 1, \dots, 20$ — первые двадцать положительных корней уравнения $J_1(\mu) = 0$ [10] (ряд сходится быстро и такого количества корней достаточно для обеспечения требуемой точности вычислений), J_0 , J_1 — обыкновенные функции Бесселя с нулевым и единичным индексами.

Далее приведем приближенные (с точностью до членов порядка ε^2) формулы для компонент тензора термоупругих напряжений в рассматриваемом стержне с учетом погранслоиной поправки вблизи торца $z = 0$ и алгоритм их построения. Такие формулы будут иметь структуру, подобную структуре формулы, описывающей распределение температуры в стержне, т.е. включать в себя внешнее разложение, пригодное всюду, кроме области вблизи торца, и внутреннее разложение, экспоненциально убывающее при удалении от торца и подправляющее граничные условия на нем. Кроме того, приближенные формулы для компонент σ_r , σ_θ будут содержать еще погранслоиные поправки $\sigma_r^{T^{\text{int}}}$, $\sigma_\theta^{T^{\text{int}}}$, которые возникают за счет температурного пограничного слоя, приведенного выше. Итак, структура приближенных формул, описывающих с точностью до членов порядка ε^2 поля термоупругих напряжений в стержне, будет иметь следующий вид:

$$\bar{\sigma}_r(r, z) \approx -\frac{E\alpha\varepsilon^2}{16(1+\nu)} [\sigma_r^{\text{ext}}(r, z) + \sigma_r^{\text{int}}(r, z) + \sigma_r^{T^{\text{int}}}(r, z)],$$

$$\bar{\sigma}_\theta(r, z) \approx -\frac{E\alpha\varepsilon^2}{16(1+\nu)} [\sigma_\theta^{\text{ext}}(r, z) + \sigma_\theta^{\text{int}}(r, z) + \sigma_\theta^{T^{\text{int}}}(r, z)],$$

$$\bar{\sigma}_z(r, z) \approx \frac{E\alpha\varepsilon^2}{8(1+\nu)} [\sigma_z^{\text{ext}}(r, z) + \sigma_z^{\text{int}}(r, z)],$$

$$\bar{\tau}_{rz}(r, z) \approx \frac{E\alpha\varepsilon^2}{8(1+\nu)} \tau_{rz}^{\text{int}}(r, z), \quad (2)$$

где ν — коэффициент Пуассона, а формулы для внешнего разложения компонент σ_r , σ_θ , σ_z тензора термоупругих напряжений приведены в [5], а именно

$$\sigma_r^{\text{ext}}(r, z) = (1 - r^2) \frac{d^2 T_0(z)}{dz^2},$$

$$\sigma_\theta^{\text{ext}}(r, z) = (1 - 3r^2) \frac{d^2 T_0(z)}{dz^2},$$

$$\sigma_z^{\text{ext}}(r, z) = (1 - 2r^2) \frac{d^2 T_0(z)}{dz^2}. \quad (3)$$

Внешнее разложение (результат основного итерационного процесса) для τ_{rz} компоненты начинается с членов порядка ε^3 и поэтому представление для этой

компоненты тензора включает только внутреннее разложение (погранслоиную поправку) [2]. Из этих приближенных формул, пригодных всюду, кроме областей вблизи торцов стержня, видно, что условие равенства нулю нормальной компоненты тензора не выполнено, так как

$$\sigma_z^{\text{ext}}(r, 0) = (1 - 2r^2) \frac{d^2 T_0(0)}{dz^2} \neq 0.$$

В связи с этим и возникает необходимость построения внутреннего разложения (пограничного слоя у торца $z = 0$). Погранслоинные поправки σ_r^{Tint} , $\sigma_\theta^{\text{Tint}}$, порожденные внутренним разложением для температуры T^{int} (1), определяются из формул, приведенных в работе [5], и имеют вид

$$\begin{aligned} \sigma_r^{\text{Tint}}(r, z) &= \frac{16(1 + \nu)}{r} \frac{d^2 T_0(0)}{dz^2} \sum_{k=1}^{20} \frac{J_1(\mu_k r) e^{-\mu_k \frac{z}{\varepsilon}}}{\mu_k^3 J_0(\mu_k)}, \\ \sigma_\theta^{\text{Tint}}(r, z) &= 16(1 + \nu) \frac{d^2 T_0(0)}{dz^2} \\ &\times \sum_{k=1}^{20} \left[\mu_k J_0(\mu_k r) - \frac{J_1(\mu_k r)}{r} \right] \frac{e^{-\mu_k \frac{z}{\varepsilon}}}{\mu_k^3 J_0(\mu_k)}. \end{aligned} \quad (4)$$

Займемся теперь построением алгоритма для вычисления слагаемых σ_r^{int} , $\sigma_\theta^{\text{int}}$, σ_z^{int} , τ_{rz}^{int} .

Как известно [4], задача нахождения этих погранслоинных поправок эквивалентна решению задачи теории упругости для полубесконечного сплошного цилиндра со свободной боковой поверхностью и нормальным и касательным напряжениями на торце, имеющими в рассматриваемом случае вид

$$\sigma_z^{\text{int}}(r, 0) = (2r^2 - 1) \frac{d^2 T_0(0)}{dz^2}, \quad \tau_{rz}^{\text{int}}(r, 0) = 0. \quad (5)$$

Эта задача решается приближенно с помощью метода однородных решений [9]. Используется класс однородных решений теории упругости, т.е. решений для полубесконечного цилиндра, оставляющих его боковую поверхность свободной от нагрузок и быстро затухающих при удалении от торца. Такие однородные решения приводятся в [9] и имеют вид $\sigma_\kappa^{(n)}(r) e^{i\beta_n z/\varepsilon}$, $\kappa = r, \theta, z$, $\tau_{rz}^{(n)}(r) e^{i\beta_n z/\varepsilon}$, где $\beta_n = \gamma_n + i\delta_n$, $n = 1, 2, \dots$ — первые (в порядке возрастания модуля) корни трансцендентного уравнения Шиффа [9]

$$\beta_n^2 (\lambda_n^2 - 1) = 2(1 - \nu), \quad \lambda_n = \frac{I_0(\beta_n)}{I_1(\beta_n)}, \quad n = 1, 2, \dots$$

Здесь I_0 , I_1 — модифицированные функции Бесселя с нулевым и единичным индексами. Процедура вычисления корней приведена в работе [11] (там же сосчитаны восемь первых корней для $\nu = 0.25$). Корни характеристического уравнения Шиффа для $\nu = 0.3$ даны в

работе [12]. Амплитуды однородных решений имеют следующий вид [9]:

$$\begin{aligned} \sigma_r^{(n)}(r) &= \frac{1}{I_1(\beta_n)} \left\{ (1 + \beta_n \lambda_n) I_0(\beta_n r) \right. \\ &\quad \left. - \left(\lambda_n + \frac{2(1 - \nu)}{\beta_n} + \beta_n r^2 \right) \frac{I_1(\beta_n r)}{r} \right\}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_\theta^{(n)}(r) &= \frac{1}{I_1(\beta_n)} \left\{ -(1 - 2\nu) I_0(\beta_n r) \right. \\ &\quad \left. + \left(\lambda_n + \frac{2(1 - \nu)}{\beta_n} \right) \frac{I_1(\beta_n r)}{r} \right\}, \end{aligned}$$

$$\sigma_z^{(n)}(r) = \frac{1}{I_1(\beta_n)} [(2 - \beta_n \lambda_n) I_0(\beta_n r) + \beta_n r I_1(\beta_n r)],$$

$$\tau_{rz}^{(n)}(r) = \frac{-i\beta_n}{I_1(\beta_n)} [r I_0(\beta_n r) - \lambda_n I_1(\beta_n r)], \quad n = 1, 2. \quad (6)$$

Для получения приближенных формул берем два однородных решения ($n = 1, 2$) и, как показано в [12], такой выбор уже обеспечивает точность выполнения граничных условий на торце стержня в пределах 10%. Теперь приведем приближенные формулы для компонент σ_r^{int} , $\sigma_\theta^{\text{int}}$, σ_z^{int} , τ_{rz}^{int} . Итак, с учетом двух однородных решений получаем

$$\begin{aligned} \sigma_r^{\text{int}}(r, z) &\approx -2 \frac{d^2 T_0(0)}{dz^2} \\ &\times \sum_{n=1}^2 [K_n(z) \text{Re}(\sigma_r^{(n)}(r)) - L_n(z) \text{Im}(\sigma_r^{(n)}(r))] e^{-\delta_n \frac{z}{\varepsilon}}, \\ \sigma_\theta^{\text{int}}(r, z) &\approx -2 \frac{d^2 T_0(0)}{dz^2} \\ &\times \sum_{n=1}^2 [K_n(z) \text{Re}(\sigma_\theta^{(n)}(r)) - L_n(z) \text{Im}(\sigma_\theta^{(n)}(r))] e^{-\delta_n \frac{z}{\varepsilon}}, \\ \sigma_z^{\text{int}}(r, z) &\approx 2 \frac{d^2 T_0(0)}{dz^2} \\ &\times \sum_{n=1}^2 [K_n(z) \text{Re}(\sigma_z^{(n)}(r)) - L_n(z) \text{Im}(\sigma_z^{(n)}(r))] e^{-\delta_n \frac{z}{\varepsilon}}, \\ \tau_{rz}^{\text{int}}(r, z) &\approx 2 \frac{d^2 T_0(0)}{dz^2} \\ &\times \sum_{n=1}^2 [K_n(z) \text{Re}(\tau_{rz}^{(n)}(r)) - L_n(z) \text{Im}(\tau_{rz}^{(n)}(r))] e^{-\delta_n \frac{z}{\varepsilon}}, \end{aligned} \quad (7)$$

где для удобства записи введены обозначения

$$K_n(z) = M_n \cos\left(\gamma_n \frac{z}{\varepsilon}\right) - N_n \sin\left(\gamma_n \frac{z}{\varepsilon}\right),$$

$$L_n(z) = M_n \sin\left(\gamma_n \frac{z}{\varepsilon}\right) + N_n \cos\left(\gamma_n \frac{z}{\varepsilon}\right), \quad n = 1, 2.$$

Следовательно, все сводится к определению постоянных M_1, M_2, N_1, N_2 . Эти постоянные находим из условия минимума среднего квадратичного уклонения получающихся на торце нормальных и касательных напряжений от их заданных значений:

$$\Psi(M_1, M_2, N_1, N_2) = \int_0^1 \left\{ \left[F(r) - \sum_{n=1}^2 \left(M_n \operatorname{Re}(\sigma_z^{(n)}(r)) - N_n \operatorname{Im}(\sigma_z^{(n)}(r)) \right) \right]^2 + \left[G(r) + \sum_{n=1}^2 \left(M_n \operatorname{Re}(\tau_{rz}^{(n)}(r)) - N_n \operatorname{Im}(\tau_{rz}^{(n)}(r)) \right) \right]^2 \right\} r dr,$$

т. е. из системы четырех линейных алгебраических уравнений:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial M_n} = 0, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial N_n} = 0, \quad n = 1, 2.$$

В данной задаче условия на торце $z = 0$: $\sigma_z = F(r) = 2r^2 - 1$, $\tau_{rz} = G(r) = 0$. Решение системы 4-х линейных алгебраических уравнений для определения постоянных коэффициентов $M_n, N_n, n = 1, 2$ можно записать в следующем виде:

$$\begin{pmatrix} M_1 \\ M_2 \\ N_1 \\ N_2 \end{pmatrix} = A^{-1} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix},$$

где компоненты симметричной вещественной матрицы A и компоненты вектора правых частей системы выражаются через $\nu, \beta_1, \beta_2, \lambda_1, \lambda_2$:

$$\phi_n = -\frac{8(1+\nu)}{(\gamma_n^2 + \delta_n^2)^3} [(\gamma_n^2 - \delta_n^2)\gamma_n - 2\gamma_n\delta_n^2],$$

$$\psi_n = -\frac{8(1+\nu)}{(\gamma_n^2 + \delta_n^2)^3} [(\gamma_n^2 - \delta_n^2)\delta_n + 2\gamma_n^2\delta_n], \quad n = 1, 2,$$

$$A_{mm} = 0.5\operatorname{Re}(h_m + g_{mm}), \quad A_{12} = 0.5\operatorname{Re}(h + g_{12}),$$

$$A_{m,m+2} = -0.5\operatorname{Im}(h_m + g_{mm}),$$

$$A_{14} = -0.5\operatorname{Im}(h + g_{21}), \quad A_{23} = -0.5\operatorname{Im}(h + g_{12}),$$

$$A_{m+2,m+2} = -0.5\operatorname{Re}(h_m - g_{mm}),$$

$$A_{34} = -0.5\operatorname{Re}(h - g_{12}), \quad m = 1, 2,$$

при этом

$$h = \frac{4}{(\beta_1 - \beta_2)^2} \left[1 - \nu - \frac{\beta_1\beta_2(\beta_1\lambda_2 - \beta_2\lambda_1)}{\beta_1^2 - \beta_2^2} \right],$$

$$h_m = -\frac{2}{3}\beta_m\lambda_m + \frac{9-4\nu}{3} - 6(1-\nu)\frac{\lambda_m}{\beta_m} + \frac{4(1-\nu)(2-\nu)}{\beta_m^2},$$

$$g_{mm} = -4(\beta_m + \bar{\beta}_n)^{-2} \times \left[1 - \nu - \beta_m\bar{\beta}_n(\beta_m\bar{\lambda}_n - \bar{\beta}_n\lambda_m)(\beta_m^2 - \bar{\beta}_n^2)^{-1} \right],$$

$$m, n = 1, 2.$$

Итак, термоупругие напряжения в изотропном прямом кристаллическом стержне кругового сечения для заданного коэффициента Пуассона находятся по приближенным формулам (2), а слагаемые для этих сумм определяются из формул (3), (4), (7).

Таким образом, построен алгоритм вычисления коэффициентов и приведены приближенные формулы для нахождения компонент тензора термоупругих напряжений, пригодные как вблизи торца $z = 0$, так и в отдалении от него.

Численные расчеты для монокристаллов сапфира с использованием модельных температурных полей

В качестве примера использования приведенных выше формул выполним расчет термоупругих напряжений в профилированном монокристалле сапфира, имеющем форму стержня круглого сечения диаметром 10 mm, длиной 100 mm (малый параметр $\varepsilon = 0.05$) и выращиваемом из расплава по способу Степанова. Поскольку в настоящей работе напряжения рассчитываются в изотропном приближении, то использовались значения модуля Юнга $E = 4.37 \cdot 10^5$ МПа и коэффициента Пуассона $\nu = 0.3$, полученные усреднением по Фогту [13] упругих постоянных сапфира [14], а также среднее значение коэффициента теплового расширения $\bar{\alpha} = 6.2 \cdot 10^{-6}$ К⁻¹ [15].

Как уже отмечалось во Введении, экспериментальное изучение тепловых полей в профилированных кристаллах сапфира показало, что для них характерно наличие резкого спада вблизи фронта кристаллизации и дальнейшего относительно плавного снижения температуры. В связи с этим распределение напряжений в области вблизи фронта и в средней части стержня будет отличаться в силу двух факторов: высокого уровня кривизны температурного поля и рассмотренного нами выше пограничного слоя. Чтобы разделить их влияние, проведем расчеты термоупругих напряжений для трех случаев модельных тепловых полей. Графики распределения средней по сечению кристалла температуры $\bar{T}_0(\bar{z})$ по длине стержня и ее второй производной $\bar{T}_0''(\bar{z})$ на начальном участке роста длиной 20 mm от фронта кристаллизации для этих полей показаны на рис. 1.

В первом случае зададим параболическое распределение температуры $\bar{T}_0(\bar{z})$. Тогда кривизна температурного поля $\bar{T}_0''(\bar{z})$ постоянна по всему кристаллу, а значит, и термоупругие напряжения в средней части стержня не будут зависеть от длины. Перераспределение компонент тензора напряжений вблизи фронта кристаллизации будет вызвано только влиянием пограничного слоя. Примем длину рассчитываемой части стержня от фронта кристаллизации до выхода из тепловых экранов 100 mm, температуру на выходе из экранов 1000°C, а максимальное отклонение распределения температуры от линейно-

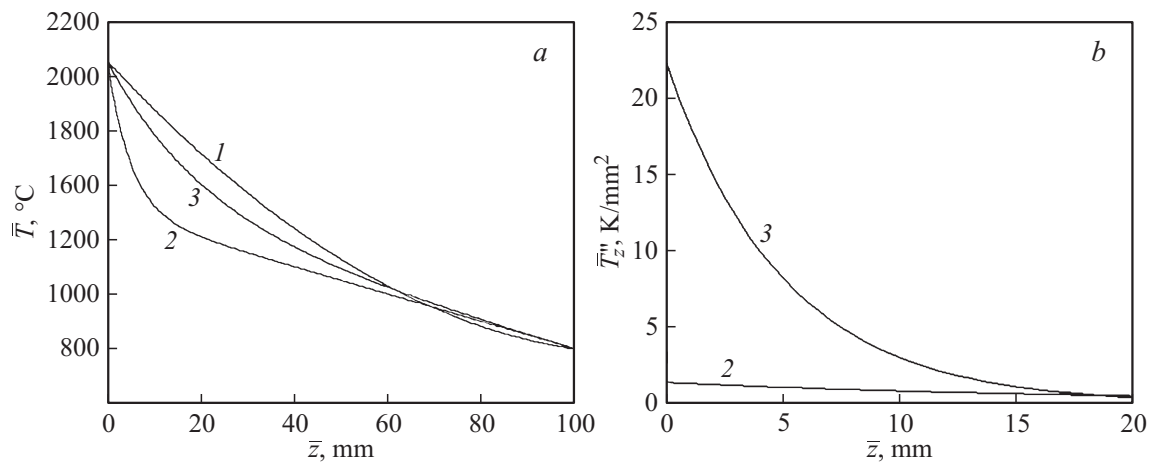


Рис. 1. Распределения средней по сечению кристалла температуры $\bar{T}_0(\bar{z})$ по длине стержня (a) и ее второй производной на начальном участке роста длиной 20 mm от фронта кристаллизации (b) для монокристаллического стержня сапфира диаметром 10 mm. Кривые 1–3 соответствуют заданным тепловым полям (8)–(10).

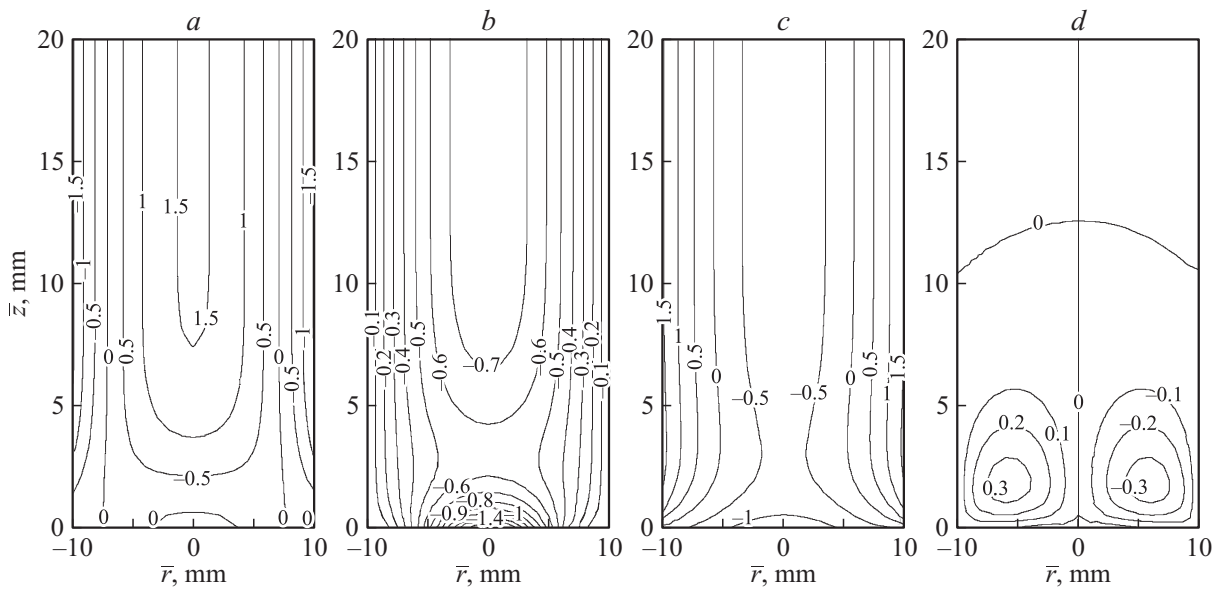


Рис. 2. Эпюры распределения компонент тензора термоупругих напряжений ($\bar{\sigma}_z$ — a, $\bar{\sigma}_r$ — b, $\bar{\sigma}_\theta$ — c, $\bar{\tau}_{rz}$ — d) вблизи фронта кристаллизации (на длине 20 mm) для монокристаллического стержня сапфира диаметром 10 mm в случае температурного поля (8). Цифры на линиях — величины напряжений в мегапаскалях.

го 200°C. Температуру на фронте кристаллизации будем считать равной температуре плавления и в результате получим в первом случае следующее распределение температуры:

$$\bar{T}_0(\bar{z}) = 2050 - 18.5\bar{z} + 0.08\bar{z}^2. \quad (8)$$

Здесь $\bar{T}_0'' = \text{const} = 0.16 \text{ K/mm}^2$, и на рис. 1, b этот график не приводится.

Для анализа влияния резкого спада температуры во втором случае зададим $\bar{T}_0(\bar{z})$ в виде суммы линейного снижения и экспоненциального спада вблизи фронта кристаллизации с постоянной экспоненты, равной ради-

усу стержня:

$$\bar{T}_0(\bar{z}) = 1500 - 5\bar{z} + 550 \exp(-\bar{z}/5). \quad (9)$$

Наконец, в третьем случае выбираем $\bar{T}_0(\bar{z})$ аналогично второму случаю, но с более плавным экспоненциальным спадом температуры при удалении от торца стержня (с постоянной экспоненты, равной 20 mm):

$$\bar{T}_0(\bar{z}) = 1500 - 5\bar{z} + 550 \exp(-\bar{z}/20). \quad (10)$$

На рис. 2 приведены эпюры компонент тензора термоупругих напряжений на длине 20 mm от фронта кристаллизации, рассчитанные с использованием распределения температуры (8). Из рисунка видно, что по

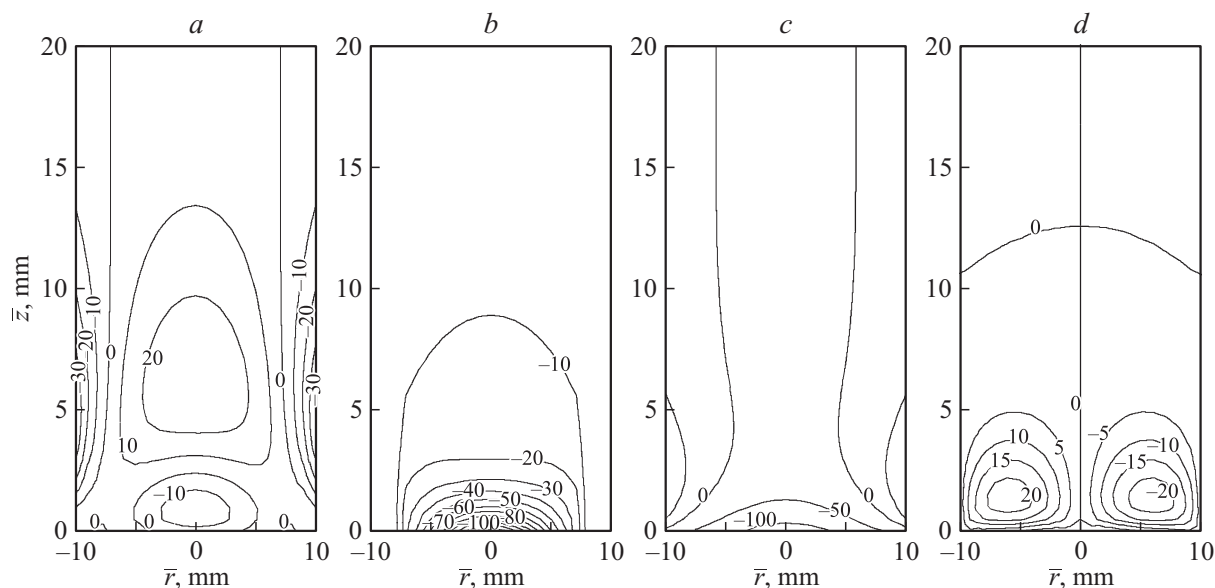


Рис. 3. Эпюры распределения компонент тензора термоупругих напряжений ($\bar{\sigma}_z$ — *a*, $\bar{\sigma}_r$ — *b*, $\bar{\sigma}_\theta$ — *c*, $\bar{\tau}_{rz}$ — *d*) вблизи фронта кристаллизации (на длине 20 мм) для монокристаллического стержня сапфира диаметром 10 мм в случае температурного поля (9). Цифры на линиях — величины напряжений в мегапаскалях.

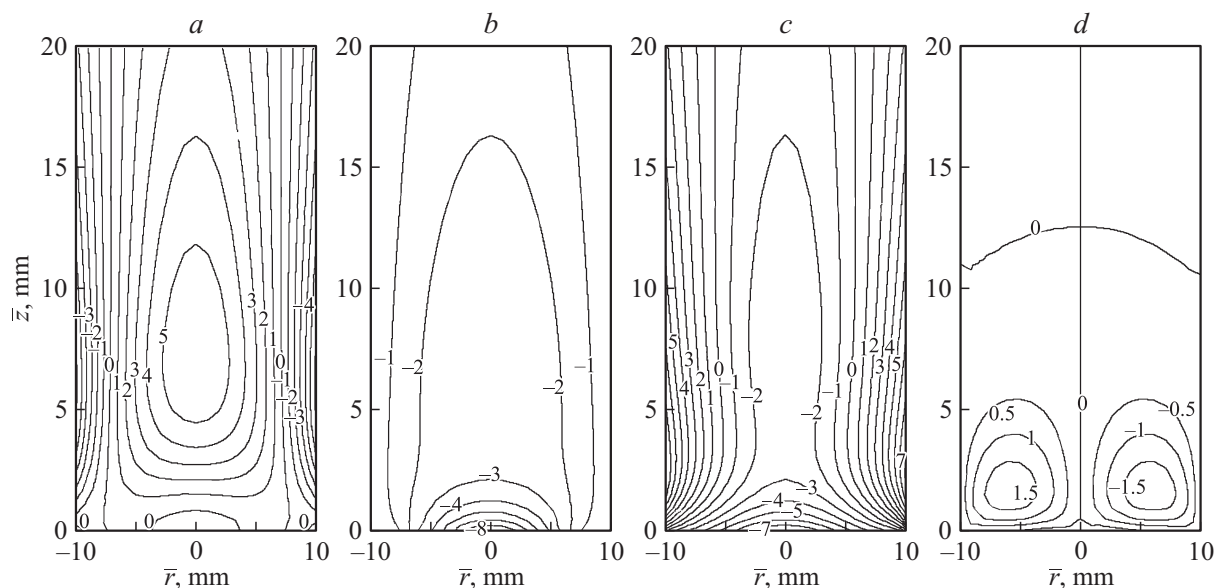


Рис. 4. Эпюры распределения компонент тензора термоупругих напряжений ($\bar{\sigma}_z$ — *a*, $\bar{\sigma}_r$ — *b*, $\bar{\sigma}_\theta$ — *c*, $\bar{\tau}_{rz}$ — *d*) вблизи фронта кристаллизации (на длине 20 мм) для монокристаллического стержня сапфира диаметром 10 мм в случае температурного поля (10). Цифры на линиях — величины напряжений в мегапаскалях.

мере приближения к фронту кристаллизации компонента $\bar{\sigma}_z$ плавно убывает, как того и требует граничное условие $\bar{\sigma}_z(r, 0) = 0$. Так как приведенные выше формулы являются приближенными, максимальное значение этой компоненты на торце отлично от нуля и равно ~ 0.05 МПа, что составляет 3.5% от максимального значения в средней части стержня. Это характеризует точность определения напряжений. Что же касается компонент $\bar{\sigma}_r$ и $\bar{\sigma}_\theta$, лежащих в плоскости поперечного сечения, то они при приближении к торцу сначала

несколько убывают, а затем значительно увеличиваются, достигая значений примерно вдвое больших, чем в средней части. Изменяется и характер их распределения, что особенно заметно на эпюре компоненты $\bar{\sigma}_\theta$: исчезает смена знака при движении по радиусу от оси стержня к его поверхности. Касательная компонента $\bar{\tau}_{rz}$, отсутствующая (в данном приближении) в средней части стержня, имеет в пограничном слое характерный всплеск, что связано с выполнением условий равновесия при изменении значений нормальных компонент. Максимальные

значения этой компоненты достигаются на расстоянии от фронта, примерно равном половине радиуса стержня, и не превышают четверти от максимальных значений нормальных напряжений.

Эпюры компонент тензора напряжений, рассчитанные для распределения температуры (9), приведены на рис. 3. Их характерной особенностью является практически полное отсутствие напряжений на расстоянии более 10–15 мм (две-три постоянных экспоненты) от торца стержня. В отличие от первого случая компонента $\bar{\sigma}_z$ не просто убывает к фронту кристаллизации, а проходит через область с противоположным знаком. Ее максимальное значение в этой области располагается на оси стержня на высоте, примерно равной половине постоянной экспоненты. Смена знака в радиальном направлении, характерная для средней части стержня, в этой области отсутствует. Выше от торца стержня имеется область с распределением компоненты $\bar{\sigma}_z$, аналогичным случаю параболического поля, но с убывающими значениями. На эпюрах компонент $\bar{\sigma}_r$ и $\bar{\sigma}_\theta$ не наблюдаются области снижения напряжений, характерные для предыдущего случая. При приближении к фронту кристаллизации эти напряжения возрастают очень быстро. Их эпюры сильно „прижаться“ к торцу стержня, а максимальные значения $\bar{\sigma}_r$ и $\bar{\sigma}_\theta$ значительно превышают значения $\bar{\sigma}_z$.

Эпюры компонент тензора термоупругих напряжений для третьего случая модельного распределения температуры (10) приведены на рис. 4. Как и следовало ожидать, на них можно найти особенности распределения напряжений, характерные как для параболического поля, так и для случая экспоненты с малой постоянной. При приближении к фронту кристаллизации значения компоненты $\bar{\sigma}_z$ убывают быстрее, чем в первом случае распределения температуры, но область с противоположным знаком отсутствует. Что касается эпюр компонент $\bar{\sigma}_r$ и $\bar{\sigma}_\theta$, то на высоте 10–20 мм от фронта они качественно аналогичны эпюрам этих компонент для параболического поля. При приближении к фронту также можно отметить некоторое снижение напряжений $\bar{\sigma}_r$ и $\bar{\sigma}_\theta$, но затем они резко возрастают и непосредственно у фронта их эпюры аналогичны эпюрам для случая короткой экспоненты, но с меньшим общим уровнем напряжений.

Заключение

Приближенные формулы, полученные методом асимптотического интегрирования с учетом погранслойных поправок, дают возможность рассчитывать термоупругие напряжения вблизи торца стержня. Это позволяет анализировать напряженное состояние стержня во всем его объеме. В качестве примера использования этих формул выполнен расчет термоупругих напряжений для случая выращивания из расплава цилиндрического монокристалла сапфира кругового сечения. Рассмотрены три модельных температурных поля. Показано, что учет

погранслойных поправок оказывает существенное влияние как на величину, так и на распределение компонент тензора напряжений. Установлено, что именно у фронта кристаллизации термоупругие напряжения достигают максимальных значений.

Список литературы

- [1] Антонов П.И., Затуловский Л.М., Костыгов А.С. и др. Получение профилированных монокристаллов и изделий способом Степанова / Под ред. В.Р. Регеля, С.П. Никанорова. Л.: Наука, 1981. 280 с.
- [2] Антонов П.И., Бахолдин С.И., Васильев М.Г. и др. // Изв. РАН. Сер. физ. 1994. Т. 58. № 9. С. 72.
- [3] Мамедов В.М., Юферев В.С., Бахолдин С.И. и др. // Изв. РАН. Сер. физ. 2009. Т. 73. № 10. С. 1441.
- [4] Зино И.Е., Тропп Э.А. Асимптотические методы в задачах теории теплопроводности и термоупругости. Л.: Изд-во ЛГУ, 1978. 224 с.
- [5] Галактионов Е.В., Тропп Э.А. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1976. Т. 40. № 7. С. 1399.
- [6] Антонов П.И., Бахолдин С.И., Галактионов Е.В., Тропп Э.А. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1980. Т. 44. № 2. С. 255.
- [7] Бахолдин С.И., Галактионов Е.В., Тропп Э.А. // ЖТФ. 2010. Т. 80. Вып. 11. С. 1.
- [8] Прокопов В.К. // ПММ. 1949. Т. 12. № 2. С. 135.
- [9] Лурье А.И. Пространственные задачи теории упругости. М.: ГИТТЛ, 1955. 490 с.
- [10] Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами / Под ред. М. Абрамовица, И. Стиган. М.: Наука, 1979. 828 с.
- [11] Галактионов Е.В., Златин А.Н. Процедура вычисления корней характеристического уравнения Шиффа. Сб. Алгоритмы и математическое обеспечение для физических задач. № 3 / Под ред. Я.С. Уфлянда. Л.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР, 1978. С. 93.
- [12] Warren W.E., Roark A.L. // AIAA J. 1967. Vol. 5. N 8. P. 1484.
- [13] Хантингтон Г. // УФН. 1961. Т. 3. С. 461.
- [14] Рубин и Сапфир / Под ред. М.В. Классен-Неклюдовой, Х.С. Багдасарова. М.: Наука, 1974. 236 с.
- [15] Кржижановский Р.Е., Штерн З.Ю. Теплофизические свойства неметаллических материалов. Л.: Энергия, 1973. 333 с.