

01

## Предельное распределение примеси при зонной очистке

© В.И. Бочегов, А.С. Парахин

Российский государственный педагогический университет  
им. А.Г. Герцена, Санкт-Петербург  
Курганский государственный университет  
E-mail: max\_vib@mail.ru

Поступило в Редакцию 25 ноября 2013 г.

Рассмотрена задача предельного распределения очищаемой примеси методом зонной плавки для различных коэффициентов распределения и размера расплавленной зоны. Предлагается аналитическое решение и рассмотрены некоторые примеры в приближении длинномерного слитка конечной длины постоянного сечения и постоянного размера расплавленной зоны.

В последнее время возобновился интерес к теории и практике зонной очистки [1–3]. В отличие от этих работ, а также фундаментального труда Пфана [4], в которых вопрос о предельном распределении либо совсем не обсуждается, либо дается расчет предельного распределения в приближении слитка полубесконечной длины, в данной работе предлагается аналитический расчет непосредственно предельного распределения (соответствующего бесконечному количеству проходов зоны) в очищаемом длинномерном слитке конечной длины постоянного сечения с постоянным размером расплавленной зоны. Предлагаемый метод решения не требует последовательного решения задачи для каждого прохода зоны отдельно и дает более точное распределение в области нормальной кристаллизации в конце слитка. Знание функции этого распределения дает возможность оценки необходимого (разумного) количества проходов зоны при зонной очистке того или иного материала от той или иной примеси. Кроме того, решение этой задачи совместно с методикой [3] позволило авторам создать программу, не требующую больших компьютерных ресурсов и позволяющую наглядно оценить необходимое количество проходов зоны при зонной очистке любому пользователю [5].

Для того чтобы найти непосредственно предельное распределение в слитке конечной длины, необходимо решить дифференциальное уравнение, справедливое для области  $0 \leq x \leq l_0 - 2l$ :

$$\frac{dc_s(x)}{dx} = \frac{k}{l} (c_s(x+l) - c_s(x)). \quad (1)$$

Здесь  $l_0$  — длина всего слитка,  $x$  — координата фронта кристаллизации, отсчитанная от начала слитка,  $k$  — коэффициент распределения примеси,  $c_s(x)$  — функция концентрации примеси от координаты  $x$  в твердой фазе,  $l$  — длина расплавленной зоны.

В отличие от работы [3] в данном дифференциальном уравнении справа от знака равенства оба слагаемых являются одной и той же искомой функцией, что и соответствует предельному распределению. И, кроме того, слиток по длине разбивается только на 3 области, независимо от количества проходов: 1)  $0 \leq x \leq l_0 - 2l$ , 2)  $l_0 - 2l < x \leq l_0 - l$ , 3)  $l_0 - l < x \leq l_0$ . Решение уравнения (1) может быть получено аналитически в виде выражения

$$c_{sI}(x) = Ae^{Bx}, \quad (2)$$

и справедливо оно, как уже сказано, только для первой области. Здесь  $A$  и  $B$  — некоторые константы,  $c_{sI}(x)$  — функция распределения примеси в первой области. Константа  $B$  должна удовлетворять одновременно (1) и (2), что соответствует уравнению

$$B = \frac{k}{l} (e^{Bl} - 1). \quad (3)$$

Оно может быть решено только численно относительно  $B$ . Так, для  $k = 0.5$   $Bl = 1.25643121$ , для  $k = 2$   $Bl = -1.59362426$ .

Константа  $A$  определяется из условия нормировки

$$c_{sr}l_0 = \int_0^{l_0-2l} c_{sI}(x)dx + \int_{l_0-2l}^{l_0-l} c_{sII}(x)dx + \int_{l_0-l}^{l_0} c_{sIII}(x)dx, \quad (4)$$

где  $c_{sr}$  — исходная (средняя по длине слитка) концентрация примеси,  $c_{sII}$ ,  $c_{sIII}$  — распределение концентрации во второй и третьей области соответственно.

Третья область должна удовлетворять уравнению

$$\frac{dc_{sIII}}{dx} = \frac{1-k}{l_0-x} c_{sIII}, \quad (5)$$

соответствующему нормальной кристаллизации.

Решение этого уравнения есть функция вида

$$c_{sIII}(x) = D(l_0-x)^{k-1}, \quad (6)$$

где  $D$  — некоторая константа, получаемая из условия

$$c_{sII}(l_0-l) = c_{sIII}(l_0-l). \quad (7)$$

Вторая область должна удовлетворять уравнению

$$\frac{dc_{sII}}{dx} = \frac{k}{l}(D(l_0-x-l)^{k-1} - c_{sII}(x)), \quad (8)$$

решение которого имеет вид

$$c_{sII}(x) = \frac{k}{l} D e^{-\frac{kx}{l}} \int e^{\frac{kx}{l}} (l_0-x-l)^{k-1} dx + F e^{-\frac{kx}{l}}, \quad (9)$$

где  $F$  — константа, определяемая из условия

$$c_{sI}(l_0-2l) = c_{sII}(l_0-2l). \quad (10)$$

С учетом сказанного выше получаем распределение во всех областях. Для первой области — формула (2), для второй области

$$c_{sII}(x) = \frac{A e^{B(l_0-2l)}}{S(l_0-2l) + l^{k-1} e^k} S(x) + \frac{A e^{B(l_0-2l)}}{S(l_0-2l) + l^{k-1} e^k} l^{k-1} e^{\frac{k(l_0-l-x)}{l}}. \quad (11)$$

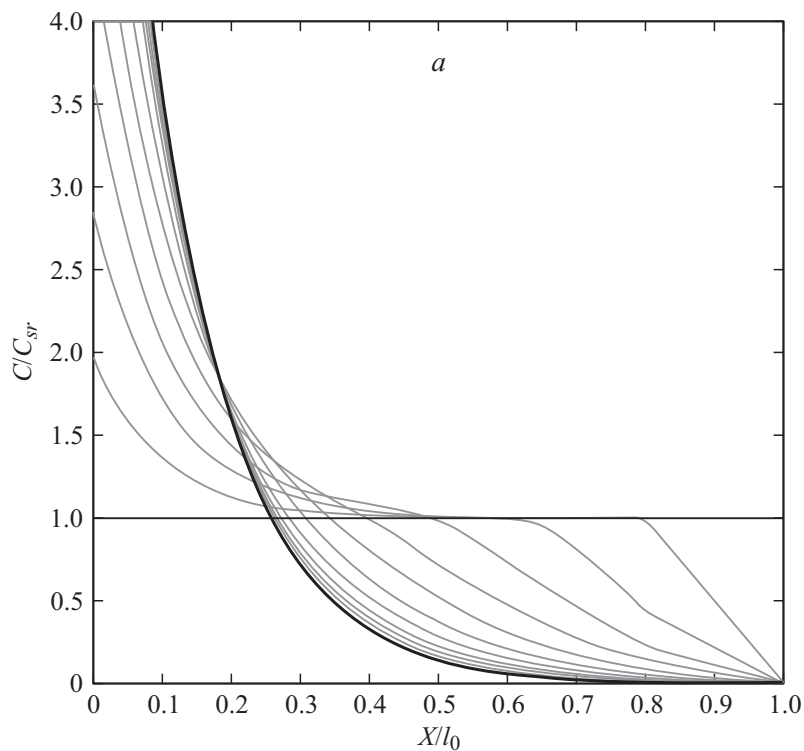
Для третьей области

$$c_{sIII}(x) = \frac{A e^{B(l_0-2l)}}{S(l_0-2l) + l^{k-1} e^k} (l_0-x)^{k-1}. \quad (12)$$

$S$  определяется выражением

$$S(x) = -\frac{k}{l} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{k}{l}\right)^n \frac{(l_0-x-l)^{k+n}}{k(k+1)(k+2)\dots(k+n)},$$

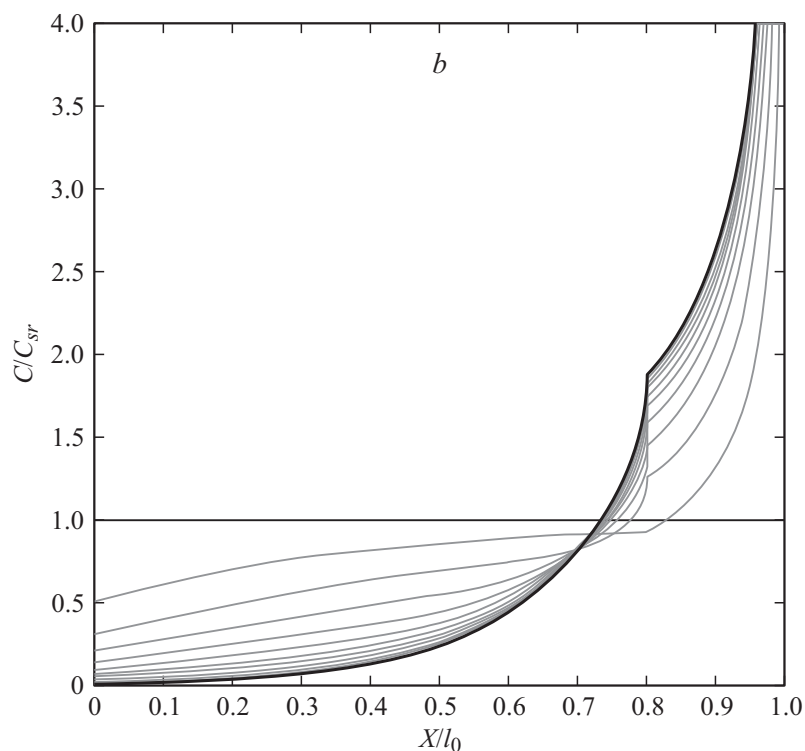
где  $n$  — число проходов зоны.



Предельное распределение (жирная линия) для случая размера расплавленной зоны, выраженного в долях длины слитка  $l = 0.2$  и коэффициенте распределения примеси  $k = 2$  (а) и  $k = 0.5$  (б). По вертикальной оси отложено отношение концентрации примеси к начальной (средней) ее концентрации  $C/C_{sr}$ , а по оси горизонтальной — координата, отсчитанная от начала слитка, выраженная так же в долях длины слитка  $X/l_0$ . Менее жирные линии соответствуют распределению с конечным количеством проходов, номера которых увеличиваются с приближением линий к предельному распределению.

Авторы доказали, что ряд (13) является сходящимся при любых  $k$ . На рисунке представлены примеры предельного распределения примесей для  $k = 2$  ( $k > 1$ ) и  $k = 0.5$  ( $k < 1$ ).

Для пользователей, как уже было сказано, авторами создана программа [5], с помощью которой можно рассчитать распределение при любом количестве проходов зоны, в том числе и предельное, для любых



Продолжение рисунка.

комбинаций коэффициента распределения и размера расплавленной зоны. Программа позволяет оптимизировать процесс очистки с точки зрения энергетической и временной экономичности. Так, например, из представленных графиков (см. рисунок, *a*, *b*) видно, что в случае  $l = 0.2$  и  $k = 2$  после десяти проходов зоны распределение удаляемой примеси становится практически предельным, а в случае  $l = 0.2$  и  $k = 0.5$  для практического приближения к предельному распределению требуется не менее 7 или 8 проходов зоны. В предлагаемой программе осуществляется расчет не только предельного распределения по описанной выше методике (представленного на графиках в виде жирной линии), но и распределения примеси после каждого прохода зоны по методике [3] (менее жирные линии на графике).

## Список литературы

- [1] *Cheung T., Cheung N., Tobar C.M.T., Caram R., Garcia A.* // *Materials and Manufacturing Processes*. 2011. N 26. P. 493–500.
- [2] *Cheung T., Cheung N., Garcia A.* // *J. Electronic Materials*. 2010. V. 39. N 1. P. 49–55.
- [3] *Бочегов В.И., Парахин А.С.* // *Вестник Курганского государственного университета. Сер. Естественные науки*. 2012. № 3. В. 5. С. 83–88.
- [4] *Пфани В.* *Зонная плавка*. М.: Мир, 1970. 367 с.
- [5] *Бочегов В.И., Парахин А.С.* *Предельное распределение [Электронный ресурс]* Режим доступа:  
[http://infima.kgsu.ru/index.php?option=com\\_content&view=article&id=102:2013-07-26-06-19-29&catid=34:2013-07-26-05-54-26&Itemid=38](http://infima.kgsu.ru/index.php?option=com_content&view=article&id=102:2013-07-26-06-19-29&catid=34:2013-07-26-05-54-26&Itemid=38)