А.И. Федюшкин

Институт проблем механики РАН, Москва, Россия

ГИДРОДИНАМИКА И ТЕПЛООБМЕН ПРИ ВИБРАЦИОННЫХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ НА РАСПЛАВ ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ МОНОКРИСТАЛЛОВ МЕТОДОМ ПЛАВАЮЩЕЙ ЗОНЫ

АННОТАЦИЯ

В работе приводятся результаты математического моделирования и анализа конвективного теплопереноса при вибрационных воздействиях на расплав применительно к выращиванию монокристаллов методом плавающей зоны. Моделирование осуществляется на основе численного решения уравнений Навье — Стокса и уравнения сохранения энергии [1]. Показано, что вибрации являются хорошим перемешивающим механизмом и могут уменьшать температурные пограничные слои для расплавов полупроводников с малым значением числа Прандтля.

1. ВВЕДЕНИЕ

Вибрации могут быть эффективным управляющим фактором в различных технологических процессах, в частности, при выращивании монокристаллов, влияющим на совершенство кристаллов, на распределение температуры (примеси) и на скорость кристаллизации. Управляемые вибрационные воздействия являются энергоэкономичными и более простыми, чем, например, гравитация и магнитное поле. Ранее в работах [2-4] было показано существенное влияние на толщину пограничных слоев для жидкостей с числом Прандтля больше единицы (Pr > 1), в данной работе показано, что данный эффект существует и для расплавов полупроводников (Pr = 0.01). В данной работе приводятся результаты математического моделирования и анализа гидродинамики и тепломассопереноса при вибрационных воздействиях применительно к процессу выращивания монокристаллов методом плавающей зоны. Выполнены численные расчеты конвективного теплопереноса для реальной криволинейной формы жидкой плавающей зоны с учетом и без учета следующих факторов: излучения, вращения, вибраций, гравитационной и термокапиллярной конвекции.

Показано что вибрации могут уменьшать температурный пограничный слой и увеличивать температурный градиент на фронте кристаллизации, что может интенсифицировать тепломассообмен и, в частности, скорость роста кристаллов.

2. МЕТОД ЗОННОЙ ПЛАВКИ

2.1. Постановка задачи

Численное моделирование конвективного теплопереноса для модели плавающей зоны (рис. 1) было проведено на основе решения двумерных уравнений Навье-Стокса в приближении Буссинеска с учетом осевой симметрии.



Рис. 1. Расчетная область метода плавающей зоны

На рис. 1 показана расчетная область радиусом R = 3 мм и высотой 5 мм, а также сетка, граничные условия и некоторые параметры расчетов. В данных расчетах рассматривалась только фиксированная жидкая зона, геометрия которой была определена предварительно, на основе расчетов уравнения равновесия при наличии силы тяжести и с учетом значения угла смачивания для кремния, равного 111 градусам. На фронтах плавления и кристаллизации задавалось постоянное значение температуры, равное температуре кристаллизации Т_{кр} = 1683 К. На свободной боковой поверхности задавался постоянный поток излучения с коэффициентом степени черноты, равным 0.3, и температурой источника излучения T $_{_\infty}$ = 2200 К. В данных расчетах рассматривались вибрации только нижней границы жидкой зоны (кристалла). Были проведены параметрические расчеты с разными амплитудночестотными характеристиками вибрационного воздействия co стороны нижней границы $x = A \sin(2\pi f t)$, но в данной работе представлены результаты для следующих параметров: частота f = = 3 кГц и амплитуда A = 10µm, скорости вращения кристалла и поликристалла имели противоположные направления ±30 rpm, остальные теплофизические параметры брались для расплава кремния Si (Pr = 0.01) при температуре, близкой к температуре кристаллизации.

Численное решение осуществлялось с помощью пакета программ Fluent [5]. При моделировании вибраций учитывалось перемещение вибрирующей границы и использовалась динамическая сетка.

2.2. Результаты расчетов

Результаты расчетов показали, что для зонной плавки так же, как и для метода Бриджмена, вибрации существенно уменьшают температурный пограничный слой около кристалла, т.е. увеличивают градиент температуры для малых чисел Прандтля. Ранее в работах [2—4] было показано, что при амплитудах $A<100\mu m$ и частотах до f<100 Гц, этот эффект не проявляется для расплавов полупроводников с малыми числами Прандтля.

Данные расчеты также подтвердили предположения автора [2—4] о том, что данный эффект существует и для Pr = 0.01, но при более больших вибрационных числах Рейнольдса (частотах или амплитудах). Кроме указанных расчетов также были проведены расчеты влияния на теплоперенос и течение расплава отдельных факторов: тепловой конвекции, конвекции Марангони, вращения кристалла и поликристалла.

<u>Теплопроводность</u>. На рис. 2 представлено начальное невозмущенное поле температуры расплава кремния, Pr = 0.01. Это случай теплопроводности без вращения, без конвекции и без вибраций при наличии лучистого потока сбоку.



Рис. 2. Начальное поле температуры

<u>Гравитационная конвекция</u> из-за малости геометрических размеров области имеет слабую интенсивность и практически не влияет на температурное поле расплава кремния.

<u>Вращение</u>. На рис. 3 показаны функции тока: слева — при вращении нижней границы области (кристалла) со скоростью 30 грт, справа — при противовращении верхней и нижней границ со скоростью ± 30 грт. Поле температур в этом случае так же, как и в случае гравитационной конвекции, остается практически неизменным и выглядит, как на рис. 2.

<u>Конвекция Марангони.</u> Термокапиллярная конвекция преобладает над слабой гравитационной конвекцией, имеет сложную структуру течения и изменяет поле температуры, как показано на рис. 4.

Следует отметить, что в случае вращения, гравитационной конвекции и термокапиллярной конвекции вид поля температуры остается таким же, как на рис. 4.



Рис. 3. Функция тока при вращении нижней (слева) и обеих (справа) границ области



Рис. 4. Функция тока (слева) и изотермы (справа) в случае термокапиллярной конвекции

Вибрации. На рис. 5 показаны функция тока (слева) и изотермы (справа) в случае поступательных вибраций нижней границы (кристалла) для установившегося режима. Результаты моделирования показывают существенное изменение поля температуры и понижение среднемассовой температуры расплава.







Рис. 5. Функция тока и изотермы в случае вибрации нижней границы (кристалла)

На рис. 6 показаны изолинии функции тока и изотермы для случая совместного действия тепловой, термокапиллярной конвекций, вращения и вибраций.

Анализ численных результатов показал, что при указанных выше параметрах наиболее интенсивное течение вызывается вибрацией, затем по интенсивности идут конвекция Марангони, тепловая гравитационная конвекция и вращение. Данные результаты представлены в табл. 1, где приведены максимальные значения функции тока для разных видов течения.

На рис. 7 представлены профили температуры в вертикальном сечении (r = 0.005 м) для двух случаев: 1 — термокапиллярная и гравитационная конвекция, 2 — вибрации с вращением, с термокапиллярной и гравитационной конвекциями.



Рис. 6. Функция тока и изотермы в случае совместного действия гравитационной и термокапиллярной конвекций, вращения и вибраций нижней границы

Таблица 1. Значения функции тока и числа Нуссельта для различных видов конвекции

Тип конвекции	Максимум функции тока (грамм/сек)	Число Нус- сельта Nu
Вращение	4.10^{-4} - 2.5.10^{-3}	0.42—16
Гравитационная конвекция	$3 \cdot 10^{-4}$	0.16
Конвекция Маранго- ни	0.4	6.7
Вибрации (f = 3 кГц, A =10 µм)	16	8.3



Рис. 7. Профили температуры в вертикальном сечении (r = 0.005 м): 1 — термокапиллярная и гравитационная конвекция; 2 — вибрации с вращением, с термокапиллярной и гравитационной конвекциями

Данные профили показывают на то, что благодаря вибрациям температура внутри расплавленной зоны становится однородной и понижается. Структура теплового поля (рис. 6) говорит о том, что благодаря вибрациям формируются тонкие температурные пограничные слои, и для того, чтобы размеры расплавленной зоны оставались прежними, необходимо увеличивать подводимый тепловой поток извне.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Анализ численных результатов показал, что высокочастотные вибрации с малыми амплитудами могут быть доминирующим источником перемешивания расплава по сравнению с существующими конвективными течениями

Математическое моделирование показало, что вибрации могут уменьшать температурный пограничный слой и, как следствие, увеличивать температурный градиент на фронте кристаллизации. Это может интенсифицировать темпломассообмен на фронте кристаллизации и скорость роста кристаллов.

Расчеты показали, что при существенном влиянии вибраций на пограничные слои они могут практически не влиять на изменения температурного поля в течение периода колебаний вибратора (кристалла). Для установившегося квазистационарного режима показано, что максимальные изменения температуры в течение одного периода колебаний кристалла незначительны, таким образом, можно ожидать, что данные вибрационные воздействия не окажут негативного влияния на качество растущих кристаллов.

Данная работа была поддержана следующими грантами: РФФИ-ГФЕН № 04-01-39021 и РФФИ № 05-08-50162.

СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ

- R радиус зоны, м;
- Н высота зоны, м;
- х, r координаты , м;
- t время, с;
- f частота вибраций, Гц;
- A амплитуда вибраций, µм;
- Т_{кр} температура кристаллизации, К;
- Т_{ср} средняя температура, К;
- Т_w температура стенки, К;
- v вязкость, м²/с;
- a температуропроводность, m^2/c ;
- Pr число Прандтля, Pr = v/a;
- Nu среднее число Нуссельта на фронте кристаллизации Nu =qR/k(T_w- *T*_{cp});
- q поток тепла на фронте кристаллизации, BT/m^2 ;
- *k* коэффициент теплопроводности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Математическое моделирование конвективного тепло и массообмена на основе уравнений Навье-Стокса / В.И. Полежаев и др. М.: Наука, 1987.
- Федюшкин А.И., Бураго Н.Г., Полежаев В.И., Жариков Е.В. Влияние вибраций на гидродинамику и тепломассообмен в расплаве при выращивании кристаллов методом Бриджмена //Сб. трудов VII Российского симпозиума "Механика невесомости. Итоги и перспективы фундаментальных исследований гравитационночувствительных систем". М.: ИПМ РАН, 2001. С. 365—392.
- Fedyushkin A. The gravitation, rotation and vibration controlling factors of the convection and heat — mass transfer // Proc. of 4th ICCHMT, Paris, FRANCE, 2005.
- Fedyushkin A., Bourago N., Polezhaev V., Zharikov E. The influence of vibration on hydrodynamics and heat-mass transfer during crystal growth // J. Crystal Growth. 2005. V. 275. P. e1557—e1563.
- 5. Manual of FLUENT 6.2. // User's Guides, Fluent.Inc. 2005. Vol. 1, 2, 3.