

文章编号:1000-582X(2002)03-0097-04

微重力下单晶硅生长中热毛细对流的控制研究^{*}

李杰¹, 杨志刚¹, 毛科², 李明伟¹

(1. 重庆大学 动力工程学院, 重庆 400044; 2. 四川省电力试验研究设计院, 成都 610072)

摘要:在微重力条件下用浮区结晶法生长半导体单晶硅独具优势,但自由界面的温度梯度所诱发的热毛细对流对晶体质量的影响却更为突出。文中提出一种抑制热毛细对流的新方法——表面截割法,即通过适当改变自由表面的状况来抑制热毛细对流;在建立了半浮区(液桥)热毛细对流的数学模型的基础上,利用有限元法对不同截割方式下的流场、温度场做了数值模拟分析。结果表明,表面截割对浮区内的热毛细对流有很好的抑制作用,适当增加截割次数,可使热毛细对流削弱70%以上。

关键词:热毛细对流;浮区法;表面截割;微重力;有限元法

中图分类号: O782

文献标识码: A

无坩埚的浮区法是工业生产半导体单晶的重要的且独具优势的生长方法,由于避免了坩埚材料对熔体的污染和对所生长单晶熔点的限制,有利于高熔点和熔体化学性质比较活泼的半导体单晶的生长,目前,20%工业应用的高质量硅单晶均通过浮区法生长以满足特殊的品质要求。

众所周知,单晶硅熔体生长中,对流会引起熔质分凝而形成杂质条纹,严重影响生长晶体的质量。利用微重力环境,人们将浮力对流的影响减小到最低限度。然而,在浮区法中,热毛细对流不但未被削弱,而且变得十分突出,eyer等人的空间实验证实,热毛细对流引起明显的生长条纹^[1]。为抑制热毛细对流,人们利用了不同的方法,如表面敷层、气流剪切、外加磁场等。在TEXUS-12火箭和D-1空间站进行的辐射加热硅单晶生长实验中,采用表面敷层技术成功地抑制了热毛细对流的产生^[2],理论分析和数值计算的结果也表明表面敷层对热毛细对流的抑制是明显和可行的^[3,4]; Dressler等也实验证实了气流剪切可抑制热毛细对流^[5];而在D-2空间GaAs单晶生长实验中则采用了外加磁场技术,使生长界面接近于平面,消除了晶体中的杂质条纹,位错密度减少了一个数量级以上,达到了理想的晶体生长效果^[6]。

笔者提出一种新的抑制热毛细对流的方法——表面截割法,所谓表面截割,是指依靠某种方法(比如通过将薄的环状固体物与熔体自由表面接触)将连续的自由表面分割为若干份,在分割处熔体的速度为零。已知热毛细对流是一种与重力无关的对流,它发生在

具有自由表面的液体中,只要该液体表面存在由温度差或浓度差引起的表面张力梯度,该梯度便将通过粘性诱发主流体运动。可见,自由表面(界面)的表面张力梯度是热毛细对流产生的根源,这使人想到是否可通过适当改变自由表面的状况来抑制热毛细对流?本文拟从控制热毛细对流产生的根源——自由表面着手,研究自由表面状况改变时热毛细对流的一些数值特征,从而为所提出的控制热毛细对流的新方法——表面截割法提供理论数据依据。

1 数学物理模型

1.1 物理模型

如图1所示的长为0.015 m,半径 r_c 为0.01 m的半浮区硅液桥,上下两平滑端面维持10 K的温差,硅

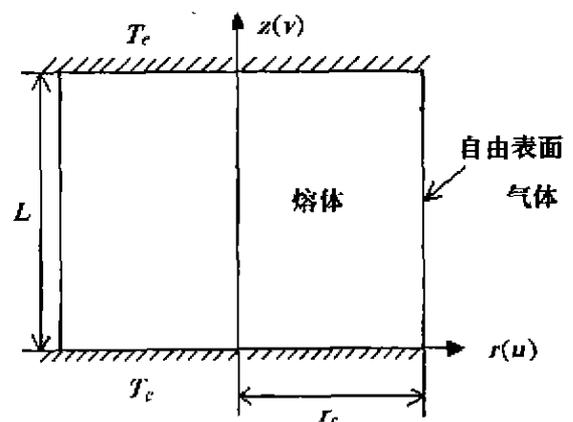


图1 物理模型

* 收稿日期:2001-12-17

作者简介:李杰(1977-),男,河北深州人,重庆大学硕士生。主要从事非平衡热力学研究。

物性参数见文献[7],而其中的表面张力温度系数取为 1.15×10^{-5} 。

模拟中作了如下假设:

- 1) 熔体浮区的圆柱形自由表面是平滑且不变形的;
- 2) 硅熔体是不可压缩的牛顿流体,流动为定常的轴对称层流。

由于浮区是轴对称的,我们取半浮区的过对称轴的截面的一半来进行研究。

1.2 数学模型

1.2.1 基本方程

分别用 $r_c, T_m, \frac{v}{r_c}$ 和 $\frac{\alpha^2}{r_c^2}$ 作为长度、温度、速度和压

力的无量纲尺度量,对各守恒方程进行无量纲化处理,得到如下的无量纲方程组:

$$\text{连续性方程: } \frac{1}{r} \frac{\partial(ru)}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} = 0 \quad (1)$$

$$\text{动量方程: } u \frac{\partial u}{\partial r} + v \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial r} + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - \frac{u}{r^2} \right) \quad (2)$$

$$u \frac{\partial v}{\partial r} + v \frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{\partial^2 v}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) \quad (3)$$

$$\text{能量方程: } Pr \left(u \frac{\partial T}{\partial r} + v \frac{\partial T}{\partial z} \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad (4)$$

方程中, (u, v) 分别为径向和轴向速度分量; T 为流体的温度; p 为压力; ρ 为熔体的密度; ν 为熔体的运动粘度; Pr 为普朗特数, $Pr = \frac{\nu}{\alpha}$; 同时, T_m 为硅的熔点温度 ($T_m = 1683 \text{ K}$)。

1.2.2 边界条件

为了使控制方程组(1)~(4)封闭,应满足如下的边界条件:

在上下两固体边壁:

$$z=0, \quad u=v=0, \quad T=1 \quad (6)$$

$$z=1.5, \quad u=v=0, \quad T=1.00594177 \quad (7)$$

在熔体自由表面处:

$$r=1, \quad u=0 \quad (8)$$

$$\frac{\partial v}{\partial r} = -Ma \frac{\partial T}{\partial z}, \quad -\frac{\partial T}{\partial r} = Bi [T - T_s(z)] \quad (9)$$

在轴心处:

$$r=0, \quad u=0, \quad \frac{\partial v}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (10)$$

在表面截割处:

$$u=v=0 \quad (11)$$

其中, Ma 为 Marangoni 数, $Ma = \frac{\gamma T_m r_c}{\rho \nu}$; Bi 为 Biot

数, $Bi = \frac{\alpha r_c}{\lambda}$, 本文计算中暂取 $Bi = 0$; μ 为熔体的动力

粘性系数; γ 为熔体的表面张力温度系数, $\gamma = -\frac{\partial \sigma}{\partial T}$, σ 为表面张力。

2 数值方法

本文采用伽辽金(Galerkin)有限元法,用 $r \times z = 40 \times 60$ 的非均匀四边形单元离散计算区域。各单元中的速度矢量、温度和压力通过试算函数 ϕ 和 x_i 线性插值得到:

$$v(r, z) = \sum \phi_i v_i \quad (12)$$

$$T(r, z) = \sum \phi_i T_i \quad (13)$$

$$p(r, z) = \sum x_i p_i \quad (14)$$

将式(12)~(14)代入控制方程和边界条件,应用 Galerkin 方法,将原微分方程组转化为一组非线性代数方程,用牛顿-辛普生方法求解该非线性方程组。

3 结果分析

图2,图3给出了熔体流场和温度场。从流场图可以看出一个顺时针的大热毛细对流涡胞占据绝大部分区域,熔体表面最大无量纲速度 V_{\max} 为 894.95, 对应有量纲速度为 0.0247 m/s , 全域均方根速度 V_{qur}

大小为 394.43, $V_{\text{qur}} = \frac{\sum_{i=1}^N \sqrt{u_i^2 + v_i^2}}{N}$, 式中, i 表示节点

下标 $N = n_r \times n_z$, n_r 为 r 方向熔区所取节点总数, n_z 表示 z 向熔区所取节点总数。由等温线图可以看出:温度场出现了较大的扭曲。从图4至图9给出的自由表面被1次、2次和4次截割时(图中箭头所指处为截割位置)熔体的流场和温度场图可以看出,1)熔体内的热毛细对流被大大抑制,熔体表面最大速度和熔体内均方根速度在1次截割时分别为 457.81 和 125.47; 2次截割时为 316.94 和 79.72; 4次截割时为 255.56 和 50.21。2)与被削弱的热毛细对流相对应,等温线的扭曲程度也减弱了许多。除1次截割时熔体中形成了2个涡胞外,2次以上截割时基本上维持单涡胞流动。

图10给出了 V_{\max} 与截割次数的关系,显然第1次截割对流动的抑制作用最突出,进一步增加截割次数,虽有抑制作用,但效果越来越不明显。图11给出了不同截割次数下局域均方根速度 V_{qur} 沿径向 r 的分布,

这里 V_{qur} 定义为: $V_{\text{qur}} = \frac{\sum_{i=1}^{n_r} \sqrt{u_i^2 + v_i^2}}{n_r}$; 从图中可以看

出,与自由表面最大速度 V_{\max} 变化趋势一样,随着截割次数的增加,速度 V_{qur} 呈递减的趋势,即熔体内的热

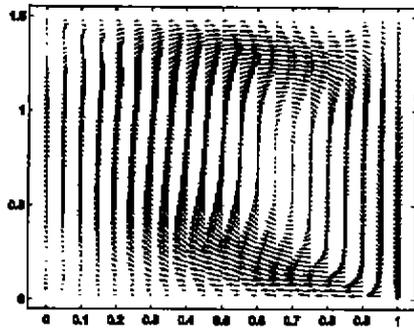


图 2 表面无截割时的流场

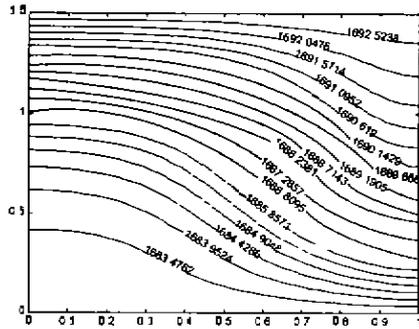


图 3 表面无截割时的温度场

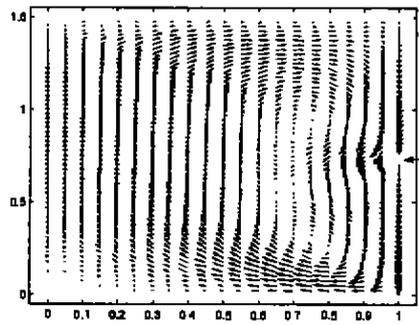


图 4 表面 1 次截割时的流场

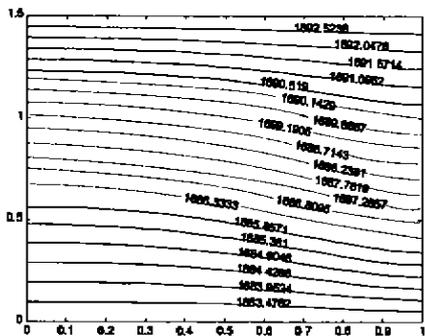


图 5 表面 1 次截割时的温度场

毛细对流随着截割次数的增加而减小。同时随着截割次数的增加, V_{min} 最小值出现位置有向右移动的趋势, 这是因为随着截割次数的增加, 自由表面由热毛细对流引起的熔体轴向速度减小, 由这个速度引起的熔体中流动的涡胞的中心更靠近自由表面。

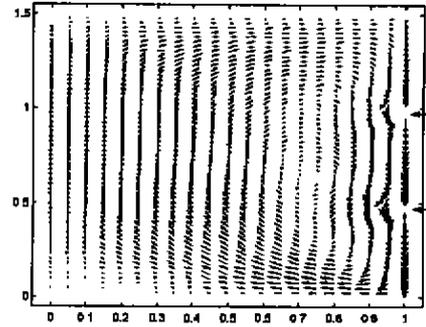


图 6 表面 2 次截割时的流场

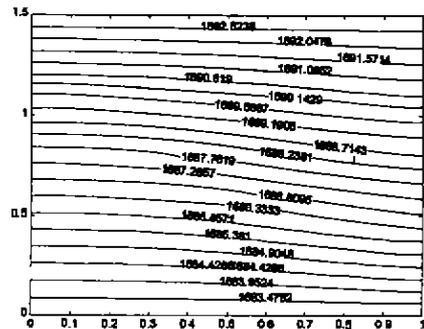


图 7 表面 2 次截割时的温度场

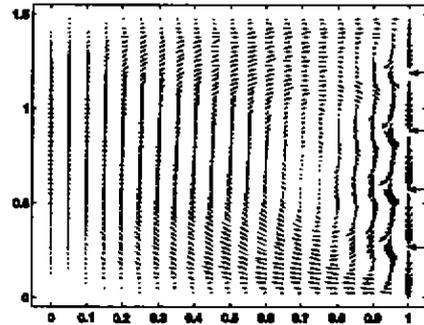


图 8 表面 4 次截割时的流场

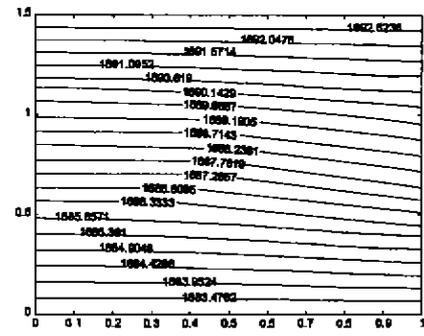


图 9 表面 4 次截割时的温度场

4 结论

1) 提出了一种抑制热毛细对流的新思路——表面截割法;

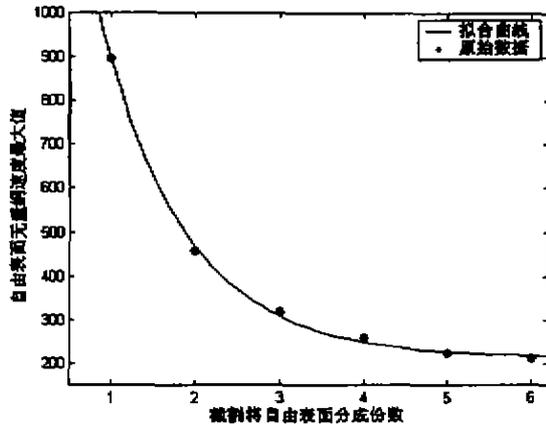


图 10 自由表面最大速度 V_{max} 变化关系图

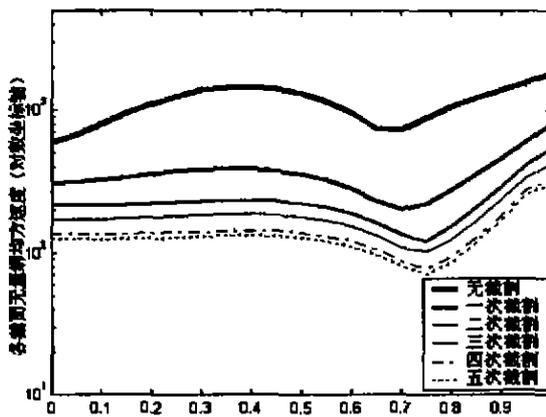


图 11 不同切割次数时 V_{max} 沿径向变化情况

2)建立了半浮区(液桥)热毛细对流的数学模型;
 3)改变表面状况即表面切割后,热毛细对流得到显著抑制,削弱程度达 70% 以上,最初一二次切割抑制作用最为突出。

参考文献:

- [1] EYER A, LEISTE H, NITSCHKE R. Floating zone growth of silicon under microgravity in a sounding rocket [J]. Crystal Growth, 1985, 71: 173 - 182.
- [2] CROLL A, MULLER W, NITSCHKE R. Floating - zone growth of surface - coated silicon under microgravity [J]. Crystal Growth, 1986, 79: 65 - 70.
- [3] LI MINGWEI, ZENG DANLING. The effect of liquid encapsulation on the Marangoni convection in a liquid column under microgravity conduction[J]. Heat Mass Transferr, 1996, 39(17): 3 725 - 3 732.
- [4] LI MINGWEI, ZENG DANLING, ZHU TINGXIA. Instability of the Marangoni convection in a liquid bridge with liquid encapsulation under microgravity condition[J]. Int. of Heat and Mass Transfer, 2002, 45: 157 - 164.
- [5] R F DRESSLER, N S SIVAKUMARAN. Non - contaminating to reduce marangoni convection in microgravity Float Zones[J]. Crystal growth, 1988, 88: 148 - 158.
- [6] HURLE D T J, MULLER G, NITSCHKE R. Fluid sciences and materials science in space. Chap 10[M]. Berlin: Springer - Verlag, 1987.
- [7] LI MINGWEI, LI YOURONG, NOBUYUKI IMAISHI, et al. Global simulation of a silicon Czochralski furnace[J]. Crystal Growth, 2002, 234: 32 - 46.

Study on the Reduction of Thermocapillary Convection of the Single-crystal Growth of Silicon under Microgravity

LI Jie¹, YANG Zhi-gang¹, MAO Ke², LI Ming-wei¹

(1. college of Thermal Power Engineering, chongqing University, Chongqing 400044, China;

2. The reseanh mstitute of eleceric power test, sichuan prounce, chengdu 610072, China)

Abstract: Float - zone method for growth of semi - conductor silicon is considering very promising under microgravity, but the effect of thermocapillary convection induced by surface tension gradient on the crystal quality is quite highlight. In the present work, a nwe method referred to as surface - cut method is suggested to reduce the melt flow. A mathematical model to describe the thermocapillary convection in a half float - zone with surface - cut is proposed and numerical simulation for the temperature and the flow field under different surface - cut way is conducted using the finite element method. The results show that the effective reduction can be achieved and the flow will be weakened by 70% by proper increase of the surface - cut time.

Key words: thermocapillary convection; float-zone method; surface-cut; microgravity; finite element method

(责任编辑 陈移峰)