

文章编号: 1006-4710(2012)04-0464-05

微重力下坩埚内熔体的对流分析

安涛, 高勇, 李杨, 张创

(西安理工大学 自动化与信息工程学院, 陕西 西安 710048)

摘要: 以 18 英寸坩埚(6 英寸单晶炉)为研究对象,利用有限元分析法,选用 RNG k - ϵ 湍流模型,对不同液面高度下坩埚内熔体的自然对流进行二维模拟分析;在熔体空间内引入横向磁场(微重力环境下)模拟分析其对熔体对流的影响,同时对引入的横向磁场强度进行优化。结果表明,随着液面高度的下降,熔体对流逐渐变弱,液面高度从 230 mm 下降到 140 mm 时,平均流速下降了近 3/4;引入横向磁场后熔体对流能够得到有效地抑制,当磁感应强度在 0.4 T 到 0.8 T 之间时,磁场对熔体的对流抑制作用最为明显。

关键词: 单晶炉; 横向磁场; 湍流模型; 自然对流

中图分类号: TM11

文献标志码: A

Analysis of Microgravity on Silicon Melt Convection

AN Tao, GAO Yong, LI Yang, ZHANG Chuang

(Faculty of Automation and Information Engineering, Xi'an University of Technology, Xi'an 710048, China)

Abstract: Taking 18 inches crucible (6 inches mono-crystal furnace) as the research object, basing on the finite element analysis method, using RNG k - ϵ turbulence model, the authors simulate and analysis two-dimensional natural convection of the silicon melt in different liquid surface height, the effect of transverse magnetic field on natural convection, and optimize magnetic field. The results show that with the liquid surface height declining, silicon melt convection situation gradually becomes weak, the average flow velocity decrease by nearly three quarters when liquid surface height drops from 230 mm to 140 mm down; transverse magnetic field can effectively restrain silicon melt convection, the convection can be obviously inhibited when the magnetic induction control in 0.4 T to 0.8 T; basing on the premise that the convection in silicon melt fully inhibit, the changing rule of the magnetic field strength in different liquid surface height can be known.

Key words: mono-crystal furnace; transverse magnetic field; turbulence model; natural convection

随着半导体行业的快速发展,硅单晶向着大直径、高均匀性、高完整性和高纯度的方向不断发展^[1-2]。直拉法生长半导体晶体是目前获得高质量大直径晶体最常用的工业化方法^[3]。由于熔体温度梯度和重力引起的自然对流、坩埚-晶体旋转引起的强迫对流和由表面张力引起的对流对熔体的作用会导致缺陷、杂质分布不均匀等情况出现从而影响硅单晶的质量,因此,抑制熔体对流是提高晶体质量的重要途径。目前,在地面生长晶体的过程中可以给熔体引入磁场,利用熔体流动在磁场所产生洛伦兹力增加熔体的粘滞系数以减小重力加速度,模拟等效太空微重

力环境以抑制对流,提高单晶质量^[4-5]。

本研究以 18 英寸坩埚为研究对象,采用有限元分析法,对坩埚内熔体的流场及其影响因素进行模拟分析,同时对引入磁场(等效太空微重力环境下)的熔体对流进行模拟分析,最终得到地表生长晶体的过程中磁场强度随液面高度的变化参数。

1 模型及相关条件选取

1.1 控制方程

依据流体基本理论可知,流体流动同样遵循着自然界中一些普遍的规律。如质量守恒、动量守恒、

收稿日期: 2012-04-22

基金项目: 陕西省教育厅专项科研计划基金资助项目(08JK374)。

作者简介: 安涛(1964-),男,陕西合阳人,副教授,研究方向为功率器件及功率集成。E-mail: antao@xaut.edu.cn。

能量守恒、热力学第二定律及状态方程等^[6],这些方程共同构成了流体动力学的基本方程组。其微分方程组可表示为:

$$\rho \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

$$\rho \left[\frac{\partial u_i}{\partial t} + (u_i \cdot \nabla) u_i \right] = \mu \nabla u_i - \nabla p + \rho g \quad (2)$$

$$\rho \frac{d}{dt} \left(\frac{u_i^2}{2} + \varepsilon \right) = \rho g u_i + \nabla \cdot (u_i \sigma_{ji}) - \nabla \cdot q \quad (3)$$

其中, ρ 为流体密度, u_i 为流体 x, y, z 方向上的速度分量, μ 为流体的粘度系数, p 为压力及其它外力之和, g 为重力加速度, ε 为比内能, σ 为应力张力, q 为热量。

1.2 湍流模型

在流体力学理论中根据雷诺系数的大小,可以将流体的流动分为层流和湍流两种状态。层流是指流体分层流动,相邻两层流体只做相对滑动,流层间互不混杂;湍流是指当流速超过一定数值后,流体不再保持分层流动,相互间开始混杂,并可能出现漩涡。近十几年来,许多学者采用层流模型对坩埚内熔体的流动进行了分析模拟。Kobayashi 等人^[7]的研究结果表明,当葛拉晓夫数 $Gr > 10^8$ 时,采用层流模型进行模拟时除非选用很大的粘性系数,否则得不到收敛解。就湍流模型而言,仅有美国、德国、日本等少数国家的学者进行了研究,国内鲜有。Lipchin 等人^[7]的研究表明,采用低雷诺系数的 k - ε 模型的模拟结果令人满意。故本研究采用湍流模型研究坩埚内熔体的流场。

本研究探讨的是湍流状态,因此需要引入湍流模型来使上述控制方程封闭。常用的湍流模型主要有, S - A 模型、标准 k - ε 模型、RNG k - ε 模型、标准 k - ω 模型、压力修正 k - ω 模型,等。其中, S - A 模型主要用来处理动力漩涡的黏性问题;标准 k - ω 模型、压力修正 k - ω 模型主要用于模拟分析自由剪切流动、绕流及放射状喷射流动;标准 k - ε 模型属于半经验公式,适用范围广,精度合理,主要用于对高雷诺系数且整个流体都具有湍流性质的模拟;RNG k - ε 模型不仅具有标准 k - ε 模型的优点,且有更高的精度并能应用于低雷诺系数的流动;本研究选取高精度的 RNG k - ε 湍流模型,对熔体的流动进行分析模拟。该模型中的湍动能 k 以及耗散率 ε 的输运方程分别为:

湍流能 K 方程:

$$\frac{\partial(\rho K)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho K u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(a_k \mu_{\text{eff}} \frac{\partial K}{\partial x_j} \right) + G_K + G_b - \rho \varepsilon \quad (4)$$

耗散率 ε 方程:

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \varepsilon u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(a_\varepsilon \mu_{\text{eff}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + C_{1\varepsilon}^* \frac{\varepsilon}{K} (G_K + G_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{K} \quad (5)$$

$$\mu_{\text{eff}} = \mu + \mu_i$$

$$\mu_i = \rho C_\mu \frac{K^2}{\varepsilon}$$

$$C_{1\varepsilon} = C_{1\varepsilon}^* - \frac{\eta(1 - \eta/\eta_0)}{1 + \beta\eta^3}$$

$$\eta = (\alpha E_{ij} E_{ij})^{1/2} \frac{K}{\varepsilon}$$

$$E_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

$$G_K = \mu_i \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$$

式中, ρ 为流体密度, μ 为粘度系数, G_k 为平均速度梯度引起的湍动能, G_b 为浮力影响引起的湍动能, E_{ij} 为时均应变率。 $C_{1\varepsilon}$ 、 $C_{2\varepsilon}$ 、 C_μ 、 α_K 、 α_μ 、 η_0 均为模型常数,其值分别为 $C_{1\varepsilon} = 1.42$, $C_{2\varepsilon} = 1.68$, $C_\mu = 0.0845$, $\alpha_K = \alpha_\mu = 1.39$, $\eta_0 = 4.377$, $\beta = 0.012$ 。

2 模拟结果与分析

2.1 有限元分析过程

本研究采用有限元分析法,对单晶炉 18 英寸坩埚内熔体的流场进行了模拟分析。具体步骤为,首先根据单晶炉的几何参数和条件创建物理环境,即,定义不同区域的单元类型、坐标系、单元实常数及单位、说明材料特性等。其次建立有限元实体模型,划分网格结构,施加边界条件及载荷,求解出有限个单元的流场数据。最后对结果进行后处理,得出流场分布。在流场分布的基础上给坩埚内熔体施加磁场,分析流场分布和最大流速以及平均流速随施加磁场强度的变化。

2.2 条件确立及参数选取

图 1 为 CZ 炉的总体结构图。其中,炉子直径为 910 mm,总高为 1 500 mm,坩埚的内直径为 440 mm,高为 380 mm,厚度为 10 mm。炉体外壁为恒定温度 ($T_0 = 300$ K),熔体热辐射系数 $\gamma = 0.3$,坩埚热辐射系数 $\gamma = 0.5$,石墨热辐射系数 $\gamma = 0.8$,熔体热传导系数 $\alpha = 67 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$,坩埚热传导系数 $\alpha = 3.2 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$,石墨热传导系数 $\alpha = 41.9 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$,熔体比热容 $C = 1\,000 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$,熔体密度 $\rho = 2\,510 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$,熔体运动粘度 $\mu = 0.0007 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$,熔体热膨胀系数 $\beta = 0.00015$,熔点温度 $T = 1\,683 \text{ K}$,磁导率 $\mu = 4\pi \times 10^{-7} \text{ H} \cdot \text{m}^{-1}$,电导率

$\sigma = 1.29 \times 10^6 \Omega^{-1} \cdot m^{-1}[8]$, 加热器温度 $T = 2\,300\text{ K}$ 。

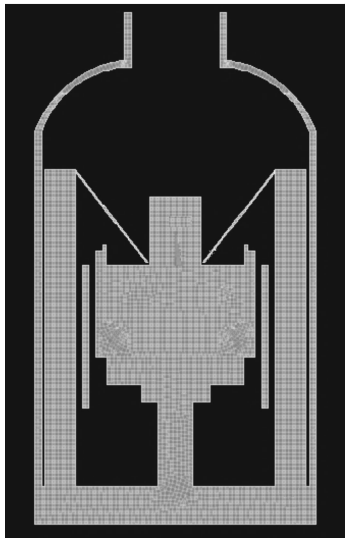


图 1 CZ 炉的总体结构
Fig. 1 General structure of CZ furnace

由于模拟过程中参数繁多不利于求解,为了使问题相对简化,做出假设为:

- ①自然对流中,熔体密度采用 boussinesq 近似;
- ②硅熔体为不可压缩的、牛顿的、粘性的流体;
- ③硅熔体生长界面处的温度为 $1\,683\text{ K}$;
- ④炉内为真空环境;
- ⑤忽略 Maragoni 对流的影响;
- ⑥忽略磁场引入的感应磁场。

3 模拟结果与分析

3.1 自然对流

在实际拉晶过程中,晶体质量并不是仅受自然对流的影响,而是由自然对流、强迫对流、毛细对流共同作用的,因而熔体的流动非常复杂,分析也较为困难。Wilcox, Kobayashi, Langlois 和 Shir 等学者采用了计算机模拟的方法对直拉单晶炉中熔体的流动进行了模拟分析,总结出拉制单晶过程中的一般变化规律。他们一致认为自然对流在熔体流动中起主要作用,强迫对流次之。本研究主要探讨坩埚内熔体的自然对流。

图 2 为加热器温度 $2\,300\text{ K}$ 时,坩埚内熔体自然对流的流速矢量图。由图 2 可以看出,坩埚内壁附近熔体的流速最大,最高可达 $1.959 \times 10^{-5}\text{ m/s}$,是坩埚中心处熔体流速的几十倍甚至几百倍。这是由于坩埚内壁附近的熔体温度最高,其受热后快速膨胀,密度逐渐减小,同时熔体所受浮力的作用亦不断增强。当所产生的浮力克服自身重力后,熔体便会沿着坩埚壁向上运动。当熔体运动到液面处时,

受到坩埚壁及自由表面的双重作用,熔体减速流向坩埚中心处。所以坩埚自由表面中心处附近的熔体流速最低,仅有 10^{-9} m/s 。而自由表面处的熔体由于温度较低,密度较大,会在重力作用下流向坩埚底,填补由于坩埚边缘受热浮起部分所留下的空隙。然后又被坩埚底加热进而又一次沿着坩埚壁面上升,形成一个循环。上述熔体的流动过程即为自然对流。

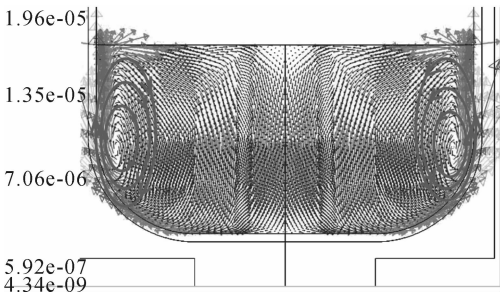


图 2 自然对流的流速矢量图
Fig. 2 The vector diagram of natural convection

3.2 液面高度变化对熔体热对流的影响

在直拉单晶的生长过程中,随着晶体高度不断增加,坩埚内熔体不断减少,液面高度也随之降低。随着液面高度的变化,坩埚内熔体对流也受到一定影响。图 3 为坩埚底与液面温差随液面高度的变化曲线。

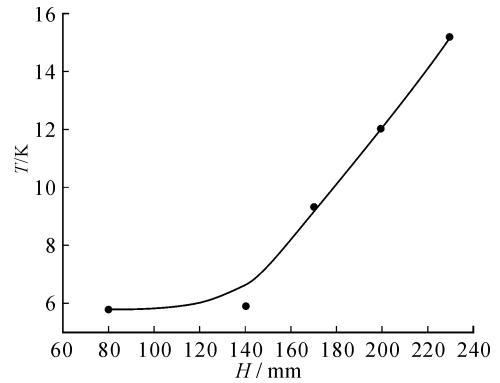


图 3 坩埚底与液面温差随液面高度的变化
Fig. 3 The influence of the temperature between crucible bottom and surface in different liquid height

由图 3 可看出,随着液面高度的降低,温差将逐渐减小。在液面高度从 230 mm 下降到 140 mm 的过程中,温差呈线性下降,从 15 K 左右下降到 6 K 。当液面高度小于 140 mm 时,温差变化很小,仅有 5 K 左右。温差的变化将直接影响硅熔体内的热对流,随着温差的降低,硅熔体内的热对流也逐渐变弱。

图 4 为熔体液面从 230 mm 下降到 80 mm 的过

程中,自然对流的 最大流速 及 平均流速 矢量的变化曲线。

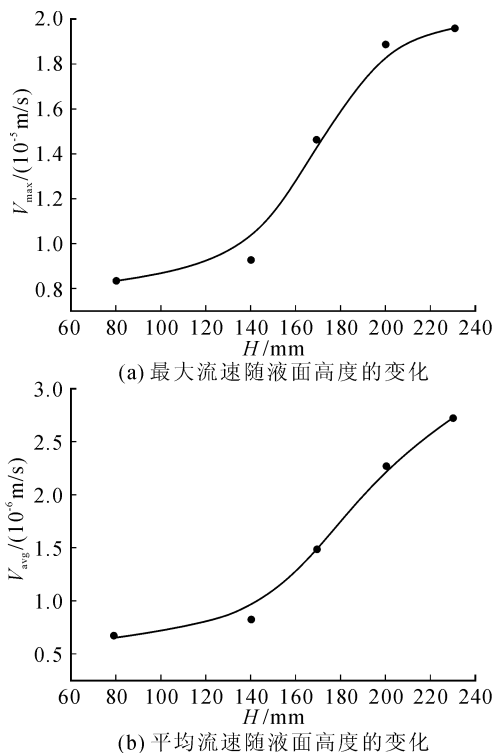


图4 最大及平均流速矢量随液面高度的变化

Fig.4 The influence of maximal velocity and average velocity vector diagram in different liquid height

由图4(a)可以看出随着液面高度的下降,熔体最大流速不断减小。当液面高度在230~220 mm之间时,曲线变化较缓。当液面高度在220~140 mm之间时,曲线变化明显。熔体最大流速从在液面高度220 mm时的 $1.915 \times 10^{-5} \text{ m/s}$ 下降到液面高度140 mm时的 $0.837 \times 10^{-5} \text{ m/s}$,下降了大约1/2。当液面高度小于140 mm时,最大流速随着液面高度的变化曲线趋于平缓,随着拉晶的结束,其最大流速已经变得很小了。由图4(b)可以看出随着液面高度的下降,坩埚内熔体的平均流速不断减小。液面高度从230 mm下降到140 mm的过程中,硅熔体的平均流速从 $2.732 \times 10^{-6} \text{ m/s}$ 下降到 $0.660 \times 10^{-6} \text{ m/s}$,下降了近3/4。当液面高度小于140 mm时,平均流速随液面高度的变化曲线趋于平缓。

3.3 磁场对坩埚内硅熔体对流的影响

随着坩埚尺寸和投料量的不断增加,熔体的对流将变得更为剧烈,易出现湍流等不稳定流动。这些流动将引起熔体内的温场波动,干扰晶体生长界面的稳定性。目前,最常用的方法就是在晶体生长过程中引入磁场来抑制熔体的对流,从而达到提高单晶质量的目的。

图5为引入横向磁场后熔体最大流速及平均流速的变化曲线。

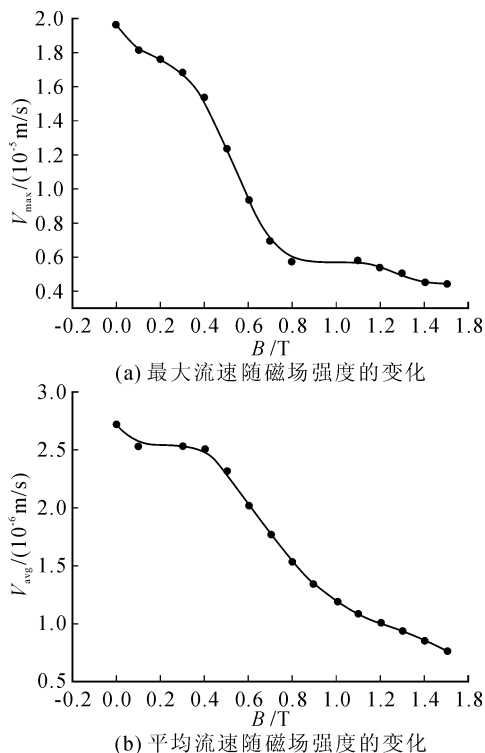


图5 最大及平均流速随磁场强度的变化

Fig.5 The influence of maximal velocity and average velocity vector diagram in different magnetic field strength

从图5(a)可以看出,当磁感应强度从0 T增大到1.5 T时,熔体的最大流速从 $1.959 \times 10^{-5} \text{ m/s}$ 降低到 $0.447 \times 10^{-5} \text{ m/s}$,仅为原流速的1/5,自然对流得到很好地抑制。磁感应强度从0 T增大到0.4 T时,熔体的最大流速下降较少。磁感应强度从0.4 T增大到0.8 T,熔体的最大流速下降很明显。磁感应强度继续增大,最大流速下降极为缓慢。在实际拉晶过程中,磁场装置的耗能很大。当磁场强度大于0.8 T后,随着磁场装置功耗的增大,硅熔体的对流并没有进一步得到有效地抑制。因此,通常可将磁场强度控制在0.4 T到0.8 T之间。在这个范围内,磁场对熔体的影响极为明显。从图5(b)可以看出随着磁场强度的增大,坩埚内硅熔体的平均流速持续不断地减小。

3.4 磁场强度的优化

在实际拉晶的过程中磁场装置的耗能很大。就横向磁场而言,其功耗通常可达到几个到几十个千瓦。随着磁场强度的增大耗散功率增加。因此,在保证对流得到充分抑制的前提下,应尽量降低磁场强度。由图4可知,在拉晶过程中,随着晶体长度的增加,坩埚内熔体不断减少,液面高度随之降低,而

坩埚内熔体的对流也会随着液面高度的降低而减弱。因此,可以在保证硅熔体的对流得到充分抑制的前提下,逐渐降低所引入磁场的强度,进而达到降低功耗的目的。

表 1 为熔体对流得到充分抑制时磁场强度随液面高度的变化数据。

表 1 磁感应强度随液面高度的变化

Tab. 1 The magnetic field strength in different liquid height

<i>H</i> /mm	<i>V</i> max /(10 ⁻⁵ m/s)	<i>B</i> /T
230	0. 574	0. 80
200	0. 598	0. 78
180	0. 582	0. 52
140	0. 591	0. 23
80	0. 576	0. 10

由表 1 可以看出,在保证熔体最大流速为低流速状态的情况下,随着熔体液面的下降,磁场强度不断减小。当液面高度从 230 mm 降至 80 mm 时,横向磁场强度也从 0. 8 T 降到 0. 1 T,而最大流速几乎没有变化。当液面高度小于 80 mm 时拉晶过程逐步结束。

4 结 论

- 1) 坩埚内壁附近熔体流速最大,最高可达 1. 959 × 10⁻⁵ m/s,是坩埚中心处熔体流速的几十倍甚至几百倍;
- 2) 随着液面高度的下降,熔体的对流逐渐变弱,液面高度从 230 mm 下降到 140 mm 时平均流速下降了近 3/4;
- 3) 引入横向磁场后熔体对流能够得到有效抑制,当磁感应强度在 0. 4 T 到 0. 8 T 之间时,磁场对熔体对流的抑制作用最为明显,同时还得到了在拉晶过程中熔体对流得到充分抑制时磁场强度随液面高度的变化规律。

参考文献:

[1] Jiang Ronghua, Xiao Shunzhen. Development and trend of semiconductor Si material[J]. Semiconductor Technology, 2002, 27(2): 3-6.

[2] Xu Yue sheng. Progress in Czochralski Silicon growth[J]. Journal of Hebei University of Technology, 2004, 33(2): 52-58.

[3] 魏唱蕾. TDL-150 型单晶炉炉体设计及炉内温度和氩气流场的数值模拟[D]. 西安:西安理工大学,2007:3-4. Wei Changlei. Design of TDL-150 CZ-Si single crystal furnace and numerical simulation of thermal field & argon gas flow field in the furnace[D]. Xi'an: Xi'an University of Technology, 2007:3-4.

[4] 安涛,高勇,刘飞航,等. 单晶炉横向磁场的设计优化与实现[J]. 人工晶体学报,2009,38(1):261. An Tao, Gao Yong, Liu Feihang, et al. Optimum design and realization of transverse magnetic field in single crystal furnace[J]. Journal of Synthetic Crystals, 2009, 38,(1): 261.

[5] Zhang T, Ladeinde F, Zhang H. A comparison of turbulence models for natural convection in enclosures applications to crystal growth processes[J]. Processor 31st National Heat Transfer Confessor, HTD,1996,323;17.

[6] Takano K, Shiraishi Y. Globe simulation of the CZ Silicon crystal growth up to 400 mm in diameter [J]. Crystal Growth, 2001,229:26-30.

[7] Yu Huiping, Sui Yunkang, Zhang Fengyi, et al. Numerical simulation of oxygen transportation in 300 mm diameter CZ Si crystal growth under cusp Magnetic field[J]. Chinese Journal of Semiconductors,2005,26(3),517.

[8] 宇慧平,隋允康,张峰翊,等. 勾形磁场下提拉法生产单晶硅的数值模拟[J]. 人工晶体学报,2004,33,(2):217. Yu Huiping, Sui Yunkang, Zhang Fengyi, et al. Numerical simulation in czochralski Si melt under a cusp Magnetic field[J]. Journal of Synthetic Crystals,2004,33,(2):217.

(责任编辑 李虹燕)