

03;05

Влияние магнитного поля на гистерезисные переходы при выращивании кристаллов методом плавающей зоны

© Т.П. Любимова, Р.В. Скуридин, И.С. Файзрахманова

Институт механики сплошных сред УрО РАН, Пермь
E-mail: lubimova@psu.ru

Поступило в Редакцию 15 февраля 2007 г.

Исследовано влияние постоянного осевого магнитного поля на термо-концентрационно-капиллярную конвекцию в жидкой зоне в недеформируемой свободной поверхностью в условиях невесомости. В рассматриваемой ситуации в некотором диапазоне параметров возможно сосуществование нескольких устойчивых режимов конвекции в невесомости при разных значениях числа Гартмана. Показано, что осевое постоянное магнитное поле подавляет термо-концентрационно-капиллярную конвекцию, область неоднозначности сужается и сдвигается в сторону более высоких значений числа Марангони. Изучена зависимость структуры и интенсивности течения от отношения высоты зоны к ее радиусу.

PACS: 61.82.Fk, 81.10.-h, 81.10.Fq, 81.10.Mh, 87.50.Mn

1. Одним из методов получения высококачественных монокристаллов полупроводников является их выращивание из расплава с использованием метода плавающей зоны, позволяющее избежать нежелательного взаимодействия со стенками тигля. Конвективное течение в расплаве, ведущее к возникновению неоднородностей в распределении примесей и ухудшающее структуру кристалла, может быть в значительной степени устранено при осуществлении процесса в условиях микрогравитации. Однако в отсутствии силы тяжести могут возникать термо- и концентрационно-капиллярные конвективные движения, которые значительно влияют на однородность распределения примеси в выращенном кристалле. Одним из методов управления конвекцией в расплаве является магнитное поле. Имеется ряд работ по исследованию

влияния магнитных полей на термо- и концентрационно-капиллярную конвекцию в жидкой зоне (см., например, [1–4]). В работе [3] численно исследовано влияние сильного осевого магнитного поля на термокапиллярную и концентрационно-капиллярную конвекцию в жидкой зоне в поле тяжести. Найдено, что при некоторых значениях параметров сосуществуют два устойчивых стационарных режима.

В данной работе изучаются термо-концентрационно-капиллярные течения в жидкой зоне в условиях невесомости. Исследуются возникновение и эволюция гистерезисных переходов между режимами в зависимости от отношения высоты зоны к ее радиусу, а также влияние осевого постоянного магнитного поля конечной интенсивности на гистерезисные явления.

2. Процесс выращивания кристаллов методом плавающей зоны (ПЗ), в варианте печи с кольцевым нагревателем, представляет собой протягивание заготовки через нагреватель со скоростью u_{cr} . Для моделирования течений и тепломассобмена при выращивании кристаллов методом ПЗ рассмотрим цилиндрическую жидкую зону в условиях невесомости, удерживаемую капиллярными силами между двумя параллельными твердыми плоскими дисками одинакового радиуса R , расположенными на расстоянии L друг от друга, нижний диск ($z = 0$) представляет собой фронт кристаллизации, а верхний ($z = L$) — фронт плавления. Деформациями свободной поверхности пренебрегается, это накладывает ограничение на применимость результатов:

$$\gamma \gg \eta U, \quad (1.1)$$

где γ — поверхностное натяжение, U — характерная скорость жидкости, η — динамическая вязкость. Условие (1.1) означает, что вязкие напряжения на свободной поверхности заметно меньше поверхностных сил, т.е. движение жидкости оказывает слабое влияние на форму поверхности. Поверхностное натяжение γ предполагается линейно зависящим от температуры и концентрации примеси:

$$\gamma(T, C) = \gamma_0 - \gamma_T(T - T_0) + \gamma_C(C - C_0). \quad (1.2)$$

Считается, что расплав ведет себя как ньютоновская жидкость. Течения и тепломассоперенос в расплаве описываются системой уравнений Навье–Стокса, переноса тепла и примеси для несжимаемой жидкости, записанных в цилиндрических координатах с учетом протягивания заготовки в направлении оси z .

Для типичных материалов полупроводников, выращиваемых методом плавающей зоны, магнитное число Рейнольдса $Re_m = \mu_0 \sigma_{el} u_{cr} R$ составляет примерно 10^{-3} , что позволяет пренебречь индуцированными магнитными полями и выразить индуцированные электрические поля через градиент потенциала электрического поля [5]. Таким образом, для рассматриваемого случая осевого магнитного поля уравнение движения записывается с учетом силы Лоренца, которая в безразмерной форме имеет вид $\mathbf{F}_L = Na^2((\mathbf{u} \times \mathbf{e}_z) \times \mathbf{e}_z - \nabla\varphi \times \mathbf{e}_z)$, а потенциал электрического поля находится из уравнения Пуассона $\Delta\varphi = \nabla(\mathbf{u} \times \mathbf{e}_z)$ с граничными условиями $\frac{\partial\varphi}{\partial z} = 0$ при $z = 0, A$ и $\frac{\partial\varphi}{\partial r} = u_\varphi$ при $r = 1$.

Ограничимся рассмотрением стационарных осесимметричных решений. В этом случае удобно ввести функцию тока ψ и завихренность $\Omega = \text{rot}_\varphi\{\mathbf{u}\}$ с помощью соотношений:

$$u_r = \frac{1}{r} \frac{\partial\psi}{\partial z}, \quad u_z = -\frac{1}{r} \frac{\partial\psi}{\partial r}, \quad \Omega = \frac{\partial u_r}{\partial z} - \frac{\partial u_z}{\partial r}.$$

Для осесимметричного стационарного течения в отсутствие азимутальной компоненты скорости задача для потенциала φ сводится к уравнению Лапласа с однородными граничными условиями, решение которого тривиально и означает отсутствие индуцированного электрического поля. Таким образом, сила Лоренца порождает дополнительное слагаемое в уравнении для завихренности, имеющее в терминах функции тока вид — $Na^2 \frac{1}{r} \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}$.

На свободной поверхности ставится условие непроницаемости $\psi = 0$, условие баланса касательных напряжений, которое в терминах завихренности имеет вид $\Omega = Ma_T Pr^{-1} \left(\frac{\partial\theta}{\partial z}\right) - Ma_C Sc^{-1} \left(\frac{\partial C}{\partial z}\right)$, для температуры используется условие Био $\frac{\partial\theta}{\partial r} = -Bi(\theta - \theta_a)$, где $\theta_a = \exp[-(2z - L)^2]$ — внешнее распределение температуры, моделирующее наличие кольцевого нагревателя. Для концентрации на фронте кристаллизации ставится условие $\frac{\partial C}{\partial z} = -V_g Sc(1 - k)C$, на фронте плавления — $\frac{\partial C}{\partial z} = V_g Sc(1 - C)$, вытекающие из условия баланса вещества, на свободной поверхности — условие отсутствия потока вещества $\frac{\partial C}{\partial r} = 0$.

Рассматриваемая задача характеризуется следующими безразмерными параметрами — числом Прандтля $Pr = \nu/\chi$, числом Шмидта $Sc = \nu/D$, безразмерная скорость кристаллизации $V_g = u_{cr}R/\nu$, число Био $Bi = hR/\chi$, безразмерная высота жидкой зоны $A = L/R$, тепловое

число Марангони $Ma_T = \gamma_T \Delta T R / (\rho \nu \chi)$, концентрационное число Марангони $Ma_C = \gamma_C C_0 R / (D \nu \rho)$ и число Гартмана $Ha = (\sigma_{el} / \rho \nu)^{1/2} R B_0$, где χ — коэффициент температуропроводности, D — коэффициент диффузии, k — равновесный коэффициент распределения примеси (коэффициент сегрегации), h — коэффициент теплоотдачи материала.

3. Задача решалась численно методом конечных разностей. Для производных по координатам использовалась схема второго порядка точности; граничные условия также аппроксимировались конечно-разностными выражениями второго порядка точности. В расчетах использовались как равномерная, так и неравномерная (сгущающаяся к свободной поверхности по радиусу и к твердым торцам по осевой координате) сетка. Стационарные решения получались методом простых итераций. Для тестирования вычислительного кода было проведено сравнение с результатами, приведенными в [6].

Расчеты показали, что изменение чисел Прандтля, Шмидта, Био и скорости протяжки в пределах, характерных для выращивания полупроводниковых кристаллов, не меняют качественно структуру и интегральные характеристики течения. Ниже приведены результаты расчетов для фиксированных чисел Прандтля и Шмидта $Pr = 0.00771$, $Sc = 22.5$, $k = 4.2$, соответствующих германию, легированному кремнием (GeSi); $Bi = 2.0$, $V_g = 0.02$, выбор параметров определялся удобством сопоставления с результатами работы [6].

В силу особенностей характера зависимостей поверхностного натяжения от температуры и от концентрации примеси, а также различия в граничных условиях для температуры и концентрации, в случае чисто термокапиллярного течения ($Ma_C = 0$) возникает двухвихревое течение, направленное вдоль свободной поверхности от середины жидкой зоны к торцам, а в противоположном предельном случае $Ma_T = 0$ возникает одновихревое течение, направленное вдоль свободной поверхности от фронта кристаллизации к фронту плавления. Структура течения при отличных от нуля значениях обоих чисел Марангони зависит от соотношения параметров и, как показали вычисления, может быть неоднозначной.

На рис. 1, а показаны зависимости максимального и минимального значений функции тока от Ma_T для фиксированных значений параметров Ma_C , отношения сторон $A = 1$ и различных значений числа Гартмана Ha . Как видно из рисунка, при малых Ma_T величина ψ_{\min} близка к нулю, т.е. реализуется одновихревой режим течения, с

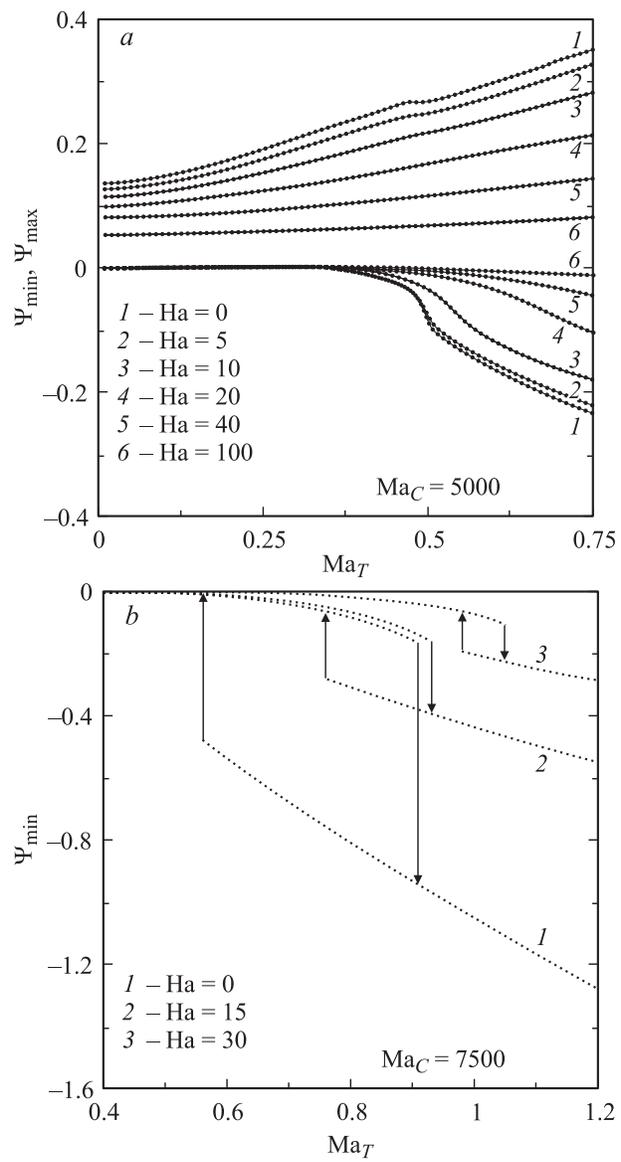


Рис. 1.

увеличением Ma_T развивается второй вихрь и течение становится двухвихревым. Перестройка от одновихревого к двухвихревому режиму течения при выбранных значениях параметров сопровождается резким изменением максимального и минимального значений функции тока, однако зависимости ψ_{\max} и ψ_{\min} от Ma_T остаются однозначными. Осевое постоянное магнитное поле снижает интенсивность течения и сглаживает переход между одновихревым и двухвихревым режимами.

На рис. 1, *b* показаны зависимости минимального значения функции тока от Ma_T для $Ma_C = 7500$, отношение сторон $A = 2$. Как видно, при этих значениях параметров, в отличие от предыдущего случая, перестройка от одновихревого к двухвихревому режиму течения сопровождается гистерезисом. Постоянное осевое магнитное поле сужает область гистерезиса и сдвигает область неоднозначности в сторону больших значений Ma_T .

На рис. 2, *a* изображены границы смены режимов на плоскости параметров (Ma_T, Ma_C) для $A = 2$ и нескольких значений числа Na . Для каждого значения Na имеются две ветви: верхняя соответствует переходу от одновихревого режима к двухвихревому, нижняя — обратному переходу. Область сосуществования двух устойчивых стационарных режимов расширяется с увеличением Ma_C . С ростом Na диапазон бистабильности сужается и сдвигается в область больших Ma_T .

На рис. 2, *b* изображены границы смены режимов на плоскости параметров (A, Ma_T) . Как видно, для коротких зон зависимость $\psi_{\max, \min}(Ma_T)$ однозначна (при не слишком больших значениях Ma_C). При увеличении A возникает область неоднозначности, с дальнейшим увеличением A эта область расширяется. Под действием магнитного поля диапазон бистабильности сужается и сдвигается в область больших значений Ma_T . В результате действия постоянного осевого магнитного поля конвективные вихри смещаются к свободной поверхности — образуется пограничный слой толщиной $\delta \sim O(Na^{-1/2})$.

Поле температуры испытывает лишь слабое влияние магнитного поля, так как число Прандтля мало. Изолинии концентрации практически заморожены в поле скорости, поскольку число Шмидта достаточно велико: изолинии концентрации изгибаются под действием течения.

Заключение. Численно исследовано влияние постоянного осевого магнитного поля на термо- и концентрационно-капиллярную конвекцию в жидкой зоне в условиях невесомости. Рассмотрено влияние отношения высоты зоны к ее радиусу на перестройку структуры

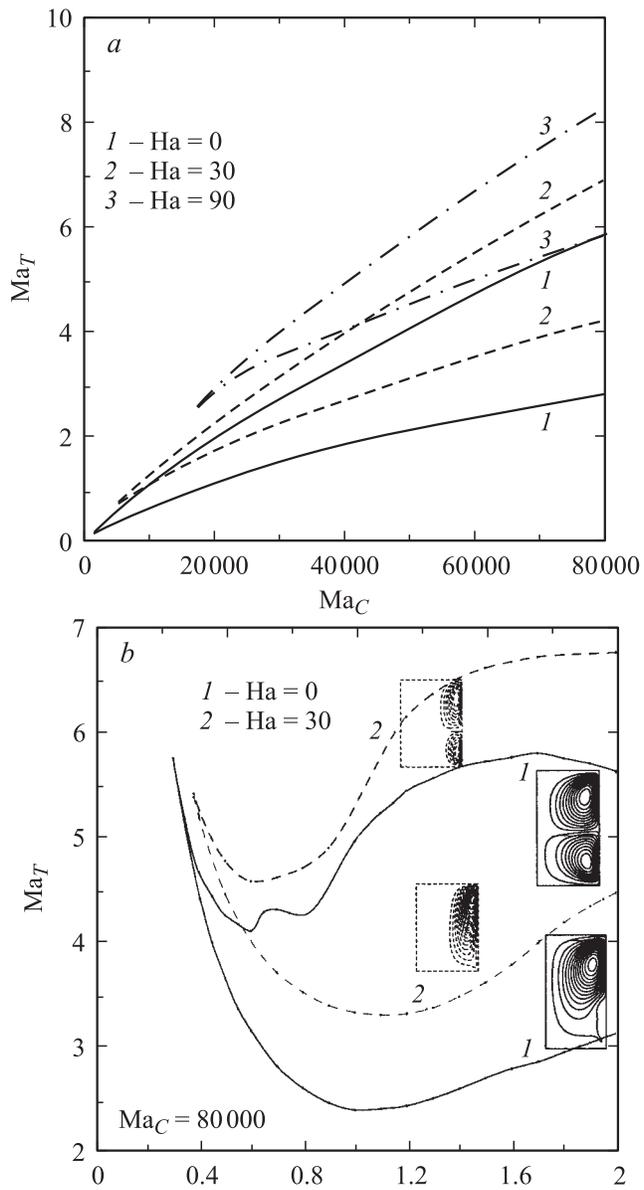


Рис. 2.

течения. Показано, что для коротких зон смена режимов при изменении теплового числа Марангони происходит без гистерезиса, для больших значений высоты появляется область бистабильности, которая тем шире, чем длиннее зона. Найдено, что постоянное осевое магнитное поле приводит к сужению области гистерезиса и сдвигу ее в область больших значений Ma_T . Таким образом, осевое магнитное поле существенно влияет на термо- и концентрационно-капиллярные течения в жидкой зоне и может быть использовано для управления течениями в процессах выращивания кристаллов методом плавающей зоны.

Список литературы

- [1] Prange M., Wanschura M., Kuhlmann H.C., Rath H.J. // J. Fluid Mech. 1999. V. 394. P. 281–302.
- [2] Lan C.W., Yeh B.C. // Journal of Crystal Growth. 2004. V. 262. P. 59–71.
- [3] Walker J.S., Dold P., Croell A., Volz M.P., Szofran F.R. // Int. J. Heat and Mass Transfer. 2002. V. 45. P. 4695–4702.
- [4] Munakata T., Someya S., Tanasawa I. // Journal of Crystal Growth. 2002. V. 235. P. 167–172.
- [5] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982. 620 с.
- [6] Witkowski L.M., Walker J.S. // Phys. Fluids. 2002. V. 14. N 8. P. 2647–2656.