ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПРИМЕСИ ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ МОНОКРИСТАЛЛОВ МЕТОДОМ БРИДЖМЕНА С ПОГРУЖЕННЫМ НАГРЕВАТЕЛЕМ

А.И. Федюшкин, Н.Г. Бураго

Институт Проблем Механики РАН, г.Москва
(E-mail: fai@ipmnet.ru)

Абстракт

В данной работе приведены результаты численного моделирования конвективного тепломассообмена и распределения примеси в кристалле германия с примесью сурьмы при выращивании методом вертикальной направленной кристаллизации с погруженным нагревателем.

В основе математической модели лежат двумерные нестационарные уравнения Навье-Стокса. Решение данных уравнений осуществляется методом конечных элементов.

Приведены результаты параметрических расчетов для наземных и космических условий. Исследованы влияния скорости роста, геометрии, вращения и начального распределения концентрации на распределение примеси в кристалле. Численно найдены режимы выращивания кристаллов германия, при которых продольное распределение примеси практически постоянно. Найдены оптимальные режимы с вращением и без вращения для наиболее однородного радиального распределения примеси. Показана возможность получения в земных условиях более однородного распределения примеси, чем в условиях невесомости.

1. ВВЕДЕНИЕ

Распределение примеси в расплавах полупроводниковых материалов зависит от многочисленных условий роста, в том числе от геометрических, тепловых и динамических воздействий, таких, как конвекция (гравитационная и негравитационная), вращение, вибрация и др. Известно, что эти зависимости распределения примеси обладают сильной чувствительностью от перечисленных факторов, о чем написано во многих работах, (см., например [1-10]). Основная цель всех исследований такого рода заключается в том, чтобы научиться управлять факторами, влияющими на распределение примеси. Для грамотного управления тепломассообменом необходимо знать гидродинамические механизмы происходящие в расплаве и уметь их классифицировать. Классификация методов управления процессами гидромеханики тепломассообмена при выращивании кристаллов и некоторые результаты параметрических расчетов приведены в [1].

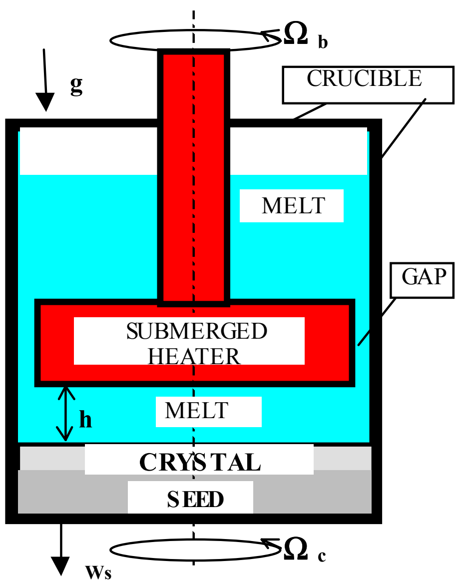


Рис 1 Схема установки метода Бриджмена с погруженным нагревателем

Настоящая работа посвящена численному исследованию влияния условий роста монокристаллов на продольное и поперечное распределение примеси при кристаллизации германия (Ge) легированного сурьмой (Sb) и галлием (Ga) методом Бриджмена с погруженным нагревателем [5,6]. Интерес к методу, являющимся, следуя классификации [1], совокупностью теплового и геометрического способов управления ростом кристаллов, обусловлен двумя причинами: с одной стороны он позволяет строго определять тепловые условия выращивания, что делает его перспективным для исследования процессов кинетики и механизма роста, с другой стороны использование метода позволяет выращивать монокристаллы в условиях подавленной естественной конвекции, получая на земле условия близкие к условиям микрогравитации.

Впервые работы по экспериментальному исследованию и численному анализу распределения примеси в объемных монокристаллах полупроводников в условиях подавленной естественной конвекции для наземных условий были выполнены А.Г.Острогорским с соавторами [4,8] и В.Д.Голышевым с соавторами [5-7]. Авторы использовали две модификации методов выращивания: метод погруженного нагревателя и метод погруженной перегородки. В своих исследованиях, посвященных условиям получения диффузионного режима переноса примеси, они пришли к выводу, что для примесей с величиной $\boldsymbol{k_o}$>0.1 для наземных условий эти методы не обеспечивают диффузионного режима переноса. Однако выполненных ими исследований недостаточно для определения закономерностей и условий получения воспроизводимых результатов по переносу примеси вблизи фронта кристаллизации в процессе роста в условиях слабого течения расплава получаемого при использовании перегородки. Авторы работ [5,6] экспериментально исследовали влияние величины разницы начальной концентрации примеси (в верхней и в нижней частях области) на распределение примеси при разных скоростях выращивания кристалла и контроле температур на погруженном нагревателе.

В данной работе представлены результаты численного моделирования на основе решения нестационарных двухмерных уравнений Навье-Стокса и уравнений переноса тепла и массы [10] в цилиндрической области. Использование нестационарных уравнений позволило находить распределение примеси и в выросшем кристалле. Численное решение уравнений Навье-Стокса осуществлялось методом конечных элементов с использованием комплекса программ ASTRA [11-13].

Целью данной работы является исследование влияния на поперечное и продольное распределение примеси ряда факторов, таких как, начальные значения концентраций в разных частях расчетной области и граничные условия, скорость выращивания кристалла, геометрия и величина силы тяжести.

Численно показано существование и найдены значения оптимальных параметров роста кристаллов (с точки зрения однородности распределения примеси) для наземных условий. Исследования показали, что, управляя параметрами роста кристалла (тепловыми условиями, скоростью роста и начальным распределением концентрации примеси), можно получить однородное продольное или радиальное распределения примеси в кристалле.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И МЕТОД РЕШЕНИЯ

2.1 Постановка задачи

На рис. 2 изображена схема расчетной области математической модели для метода Бриджмена с погруженным нагревателем, где приняты следующие обозначения:
1 - погруженный нагреватель,
2 - зона расплава над нагревателем,

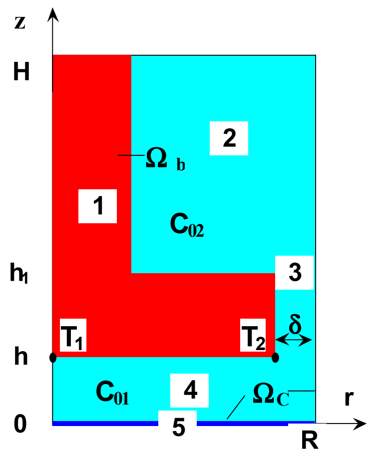


Рис.2. Схема расчетной области

3 - зазор между нагревателем и стенками тигля,
4 - рабочая зона между кристаллом и нагревателем,
5 - поверхность кристалла (z=0),
R - радиус тигля, δ - величина зазора, h - высота рабочей зоны, 0z - ось симметрии, T_1 и T_2 характерные температуры нагревателя, C_{01}, C_{02} - начальные концентрации в нижней и верхней областях расплава, Ω_b и Ω_C - скорости вращения погруженного нагревателя и тигля с кристаллом, соответственно.
В модели приняты следующие предположения: расчетная область обладает цилиндрической симметрией, высота h рабочей зоны 4, скорость кристаллизации и тепловые условия втечение всего процесса кристаллизации остаются постоянными, фронт кристаллизации 5 - предполагается плоским.

Математическая модель основана на решении системы двухмерных нестационарных уравнений Навье-Стокса для несжимаемой жидкости в приближении Буссинеска, которые следующий вид:

$$\frac{\partial u}{\partial r}+\alpha\frac{u}{r}+\frac{\partial w}{\partial z}=0$$

$$\frac{du}{dt}-\alpha\frac{v^2}{r}=-\frac{1}{\rho_0}\frac{\partial p}{\partial r}+\frac{1}{r^\alpha}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^\alpha\nu\frac{\partial u}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\nu\frac{\partial u}{\partial z}\right)-\alpha\nu\frac{u}{r^2}$$

$$\frac{dw}{dt}=-\frac{1}{\rho_0}\frac{\partial p}{\partial z}+\frac{1}{r^\alpha}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^\alpha\nu\frac{\partial w}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\nu\frac{\partial w}{\partial z}\right)+g\beta(T-T_0)$$

$$\frac{dv}{dt}+\alpha\frac{uv}{r}=\alpha\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\nu\frac{\partial u}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\nu\frac{\partial u}{\partial z}\right)-\nu\frac{u}{r^2}\right]$$

$$\frac{d\rho c_p T}{dt}=\frac{1}{r^\alpha}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^\alpha\lambda\frac{\partial T}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial z}\right)$$

$$\frac{dC}{dt}=\frac{1}{r^\alpha}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^\alpha D\frac{\partial C}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(D\frac{\partial w}{\partial z}\right)$$

Граничные условия имеют вид:
на оси симметрии:

$$r=0\ ,\ u=0,\ \frac{\partial w}{\partial r}=0,\ v=0,\ \frac{\partial T}{\partial r}=0,\ \frac{\partial C}{\partial r}=0;$$

на поверхности кристалла:

$$z=0\ ,\ u=0,\ w=-W_S,\ v=2\pi r\Omega_C,\ T=T_m,\ D\frac{\partial C}{\partial z}=W_S C(1-k_0);$$

на стенке ампулы:

$$r=R,\ u=0,\ w=0,\ v=2\pi R\Omega_C,$$

$$\frac{\partial T}{\partial r}=0\ \ (0<z<h),\ T=T_h\ \ (h<z<H),\ \frac{\partial C}{\partial r}=0;$$

на погруженном нагревателе:

$$u=0\ ,\ w=0,\ v=2\pi r\Omega_b,\ \frac{\partial C}{\partial n}=0,\ \frac{\partial T}{\partial n}=0$$

(на нижней стенке нагревателя задавалась температура $T=T_b(r)$, где $T_b(r)$ линейная функция между значениями T_1 и T_2);
на верхней поверхности расплава:

$$z=H,\ u=0,\ \frac{\partial w}{\partial z}=0,\ v=0,\ T=T_h,\ C=C_0.$$

Начальные условия имеют вид:

$u_{t=0} = 0,\ v_{t=0} = 0,\ w_{t=0} = 0,\ T_{t=0} = T_m,\ C_0 = C_0(z)$,

где приняты следующие обозначения: u и w - компоненты вектора скорости в направлении r и z, соответственно, v -азимутальная скорость, W_s - скорость кристаллизации, T - температура, C - концентрация, ρ - плотность, $a = \lambda / \rho ca$ - теплопроводность, $a = \lambda / \rho c_p$ - температуропроводность, g - ускорение силы тяжести, β_T - коэффициент темплового расширения, ν - коэффициент кинематической вязкости, D - коэффициент диффузии, α - геометрический параметр, который равен 0 для плоской геометрии или 1 для осесимметричной цилиндрической геометрии, $\mathbf{C_o(z)=C_{o1}}$ - начальная концентрация под нагревателем (0< **z** <h) и $\mathbf{C_o(z)=C_{o2}}$ - начальная концентрация над нагревателем (**z** >h).

Задача характеризуется следующими безразмерными параметрами подобия: числом Прандтля $\mathbf{Pr} = \nu / a$, числом Рейнольдса $\mathbf{Re} = W_s / \nu$, числом Грасгофа $\mathbf{Gr} = g\,\beta_T\,\Delta\theta R^3/\nu^2$ и числом Шмидта $\mathbf{Sc} = \nu/\mathbf{D}$, **где** $\Delta\theta = T_r R$.

Для большинства случаев значения безразмерных параметров были равны: **Pr=0.01, Re=<10-10³ , Gr=10² -10⁶ , Sc=10.**

2.2 Метод решения.

Кратко наиболее существенные особенности используемого численного метода могут быть описаны следующим способом. Для типичного уравнения конвективного переноса

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{A} = k\nabla^2 \mathbf{A} + \mathbf{F}$$

используется неявный вариационный самосопряженный метод Бубнова-Галеркина со следующей конечно-разностной схемой по времени:

$$\int_{\mathbf{V}} \left(\frac{A^{n+1} - A^n}{\Delta t^n} + \mathbf{u}^n \cdot \nabla A^{n+1} \right) \left(\delta A + \Delta t^n \mathbf{u}^n \cdot \nabla \delta A \right) d\mathbf{V} =$$

$$= \int_{\mathbf{V}} \left(k_1 \nabla A^{n+1} \cdot \nabla \delta A + F^{n+1} \delta A \right) d\mathbf{V} + \int_{\mathbf{S}} k\mathbf{n} \cdot \nabla A^{n+1} \delta A d\mathbf{S},$$

для монотонизации численного решения здесь используется коррекция вязкости по А.А.Самарскому:

$$k_1 = k\left(1 + \frac{0.5\,max(Uh, U^2 \Delta t)}{k}\right) + 0.5\,max(Uh, U^2 \Delta t)$$

Используются линейные треугольные конечные элементы по пространству. Система линейных алгебраических уравнений решается нематричным методом сопряженных градиентов с преобуславливанием. Алгоритм безусловно устойчив, но для хорошей точности, шаг по времени не должен на много отличиться от значения временного шага, выбираемого из условия Куранта: $0.1\Delta t_C < \Delta t^n < 10\Delta t_C\ \ \Delta t_C = \min(h_i / U_i^n)$.

Для решения уравнений несжимаемой жидкости реализовано четыре метода: 1 - метод штрафа, 2 - схема расщепления с коррекцией давления, 3 - решение уравнений Навь-Стокса в переменных вихрь-функция тока, 4 - метод Чорина с искусственной сжимаемостью. Для всех четырех используемых методов результаты находятся в хорошем соответствии. Все четыре алгоритма включены в гидродинамический пакет программ комплекса “ASTRA” для 2-ой и 3-ой геометрии.

В данной работе использовался метод 3 с переменными вихрь-функция тока. Для вычисления завихренности на твердой границе использовался итерационный метод верхней релаксации. Для определения распределения концентрации в кристалле запоминалась история концентрации на фронте кристаллизации, которая потом пересчитывалась в концентрацию в кристалле по формуле $C_{cr}=k_oC$ (k_o - равновесный коэффициент распределения примеси).

2.3 Тестовые расчеты

В данной работе в качестве тестовых были проведены расчеты следующих трех задач: 1 - это задача о конвекции в квадратной области, подогреваемой сбоку и теплоизолированными горизонтальными стенками [14], 2 - тестовые расчеты вращательного течения задачи Виллера для метода Чохральского [ ], 3 - стационарная задача о распределении примеси в методе Бриджмена с погруженным нагревателе, опубликованной в работе А.Г.Острогорского [8]. Более подробно это сравнение опубликовано в [9].

В данном параграфе представим результаты первой тестовой задачи. Результаты третьей тестовой задачи обсуждены в работе [9] и частично представлены на рис. 4. Результаты решения первой тестовой задачи представлены на рис.3 и в таблице 1. В свое время данная задача являлась международным тестом, результаты более 30 авторов опубликованы в работе [14]. В этой же работе представленно наиболее точное решение, полученное экстраполированием на сетку с нулевым шагом решений, полученных конечно-разностным методом на разных сетках. В таблице 1 это решение названо “Эталон”.

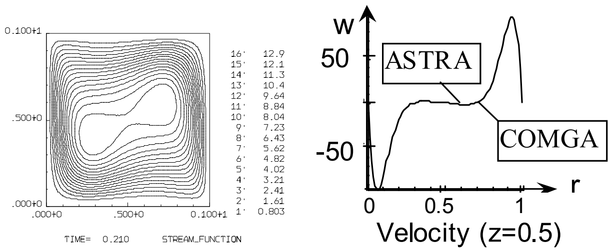


Рис. 3 Изолинии функции тока и профиль вертикальной компоненты скорости

На рис. 3 представлены изолинии функции тока и профиль вертикальной компоненты скорости в среднем горизонтальном сечении (z=0.5), полученные с помощью программы ASTRA на сетке 80x80 для первой тестовой задачи ($Ra=10^5$, Pr=0.71). Данная задача решалась в декартовых координатах, поэтому здесь r и z - это горизонтальная и вертикальная координаты.

В таблице 1 приведены значения максимума функции тока, максимумы горизонтальной и вертикальной компонент скорости в указанных средних сечениях, полученные для первой тестовой задачи ($Ra=10^5$, Pr=0.71) разными методами: “ASTRA” - решение получено конечно-элементным методом, описанным в п.2.2, с помощью програмы ASTRA [11-13] на сетке 80x80 элементов , “COMGA” - решение получено конечно-разностным методом с помощью программы COMGA [15] на сетке 65x65 узлов. Сравнение результатов показывает, что максимальное отличие результатов “ASTRA” от “эталон” не более 1.2%, а “COMGA” от “эталон” не более 2.6%.

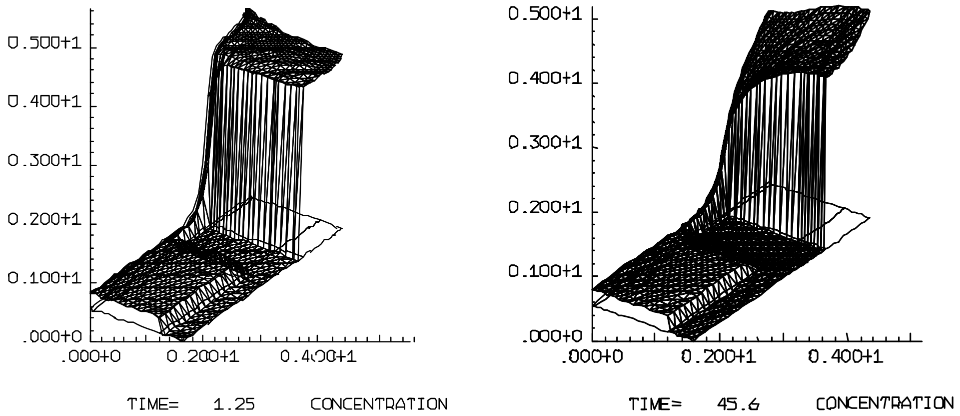
Таблица 1.

Метод	max Ψ	max $u_{r=0.5}$	max $w_{z=0.5}$
"ASTRA"	13.703	49.958	96.421
"COMGA"	13.479	48.30	94.95
"Эталон"	13.538	49.592	95.894

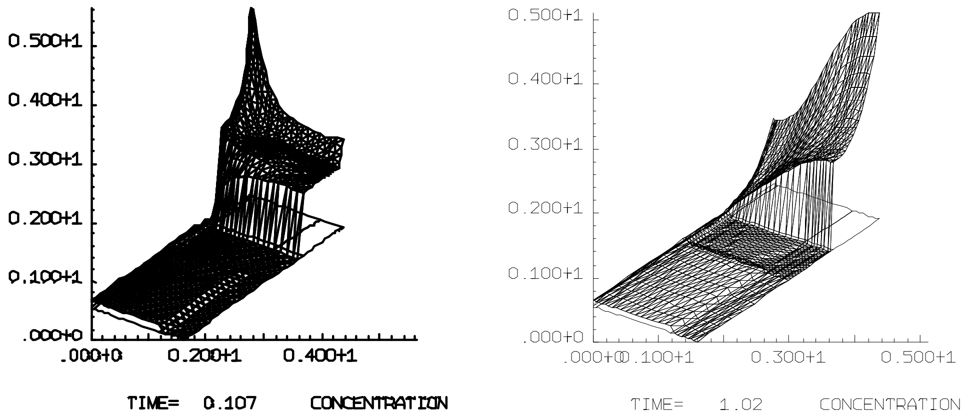
3. РЕЗУЛЬТАТЫ ПАРАМЕТРИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

3.1 Влияние ускорения силы тяжести и скорости кристаллизации на распределение примеси

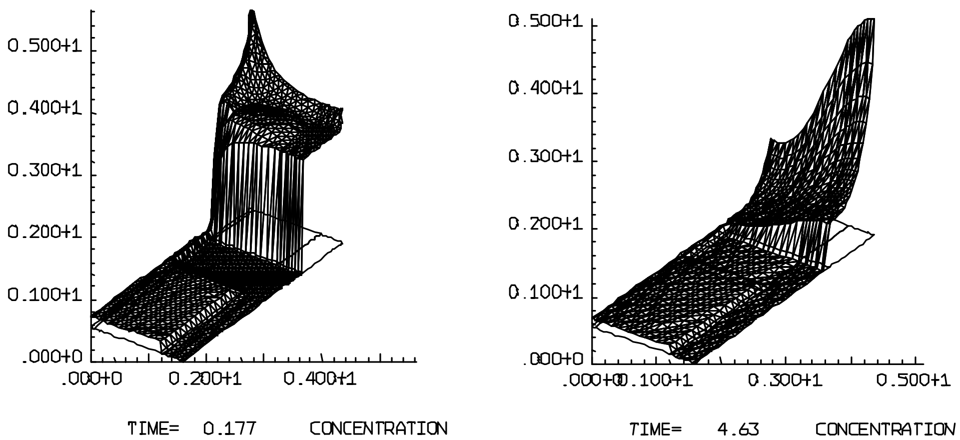
$g = g_o$ $\qquad\qquad$ $g = 0.001\ g_o$



$\boldsymbol{W_s}$ = 0.36 см/час



$\boldsymbol{W_s}$ = 1.8 см/час



$\boldsymbol{W_s}$ = 3.6 см/час

Рис. 4. Концентрация Ga в расплаве Ge в наземных условиях и в невесомости при разных скоростях роста кристалла
($g = g_o$ - левая колонка, $g = 0.001\ g_o$ - правая колонка,
$\boldsymbol{W_s}$ = 0.36 см/час - верхний ряд, 1.8 см/час - средний ряд, 3.6см/час - нижний ряд)

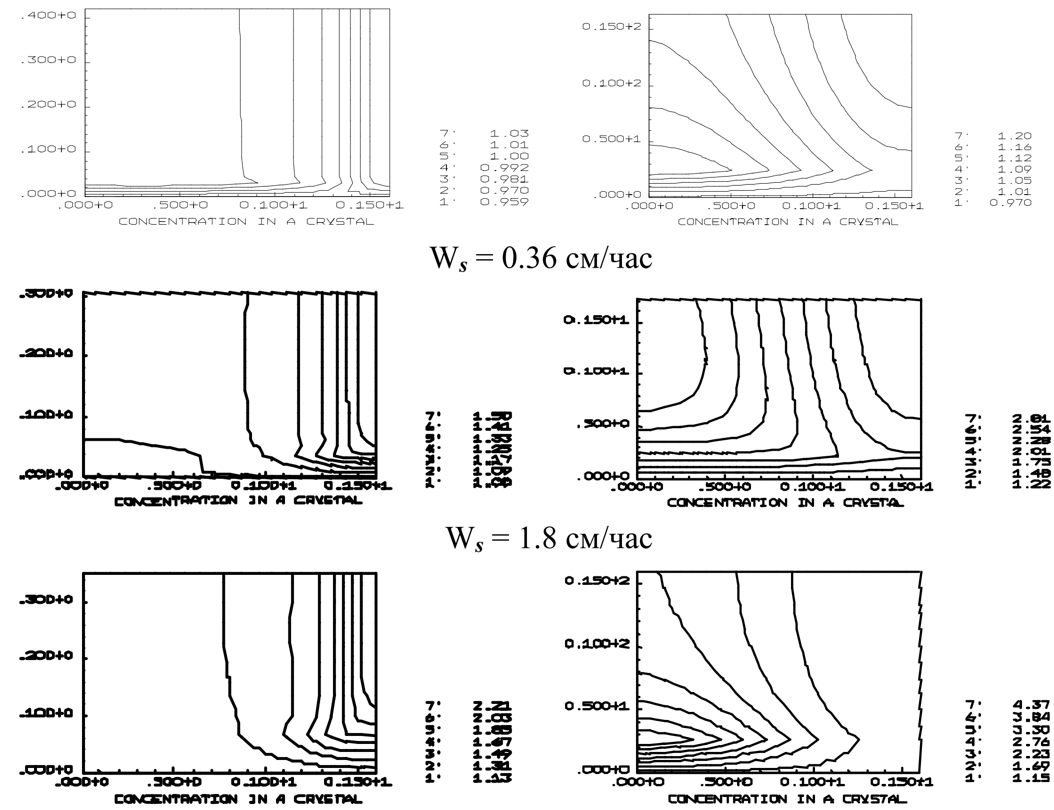
При сравнении результатов расчета третьей тестовой задачи были использованы следующие исходные данные [8]:

Параметры геометрии: R=1,6см ;h=0.8см ;δ =0.05см. Физические параметры: (расплав германия Ge с галлия Ga) : $\boldsymbol{\nu}$= 0.00135см^2/сек; $\boldsymbol{a}$=0.175см^2/сек; $\boldsymbol{\beta}$=0.000111 1/К ; $\boldsymbol{D}$=0.0002см^2/сек; $\boldsymbol{k_o}$=0.087. Были рассмотрены следующие значения скоростей кристаллизации : W_s = 0.36см/час , W_s=1.8см/час и $\boldsymbol{W_s}$ =3.6см/час для $g=g_o$, и $g=0.001g_o$.

Прежде всего отметим, что в отличие от работы [8], здесь задача решалась в полном объеме с учетом нестационарных членов уравнений, содержащих производные по времени. Это позволило найти зависимости концентрации от времени.

Концентрации примеси в расплаве показаны на рис. 4. Данные результаты

$g=g_o$ $g=0.001g_o$



W_s = 0.36 см/час

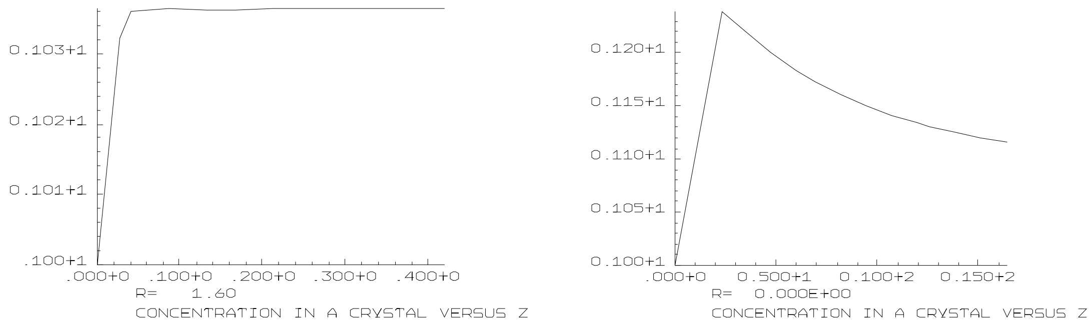
W_s = 1.8 см/час

W_s = 3.6 см/час

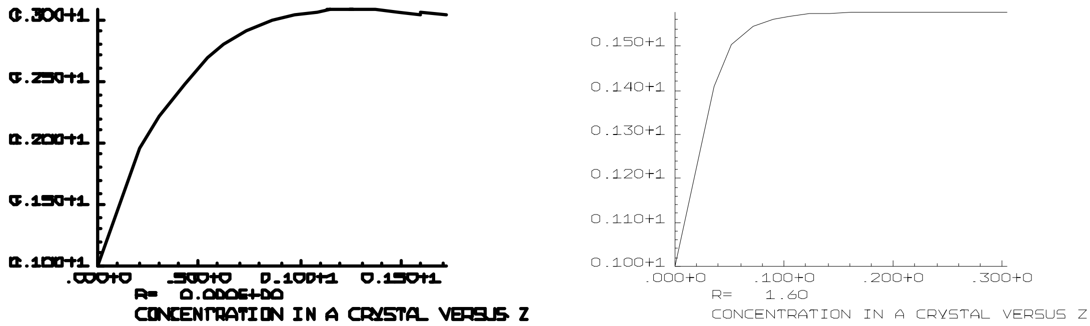
Рис.5 Распределение концентрации Ga в кристалле Ge для шести случаев, как функция скорости роста (W_s = 0.36 см/час - верхний ряд, 1.8см/час - средний ряд, 3.6см/час - нижний ряд) и ускорения силы тяжести ($g= g_o$ - левая колонка и $g=0.001\, g_o$ - правая колонка).

хорошо согласуются с соответствующими результатами авторов статьи [8]. Следует отметить только, что график, полученный в работе [8], соответствующий нижнему левому графику на рис.4, не содержит плато невозмущенного уровня концентрации в зоне расплава над нагревателем, которое здесь для стационарного состояния должно иметь высоту примерно $\boldsymbol{k_o}$ от среднего уровня концентрации в расплаве на фронте кристаллизации. Можно предположить, что уровень концентрации для этого случая в работе [8] сильно завышен (как минимум раз в 10, поскольку плато не просматривается) или это ошибка построения аксонометрической проекции.

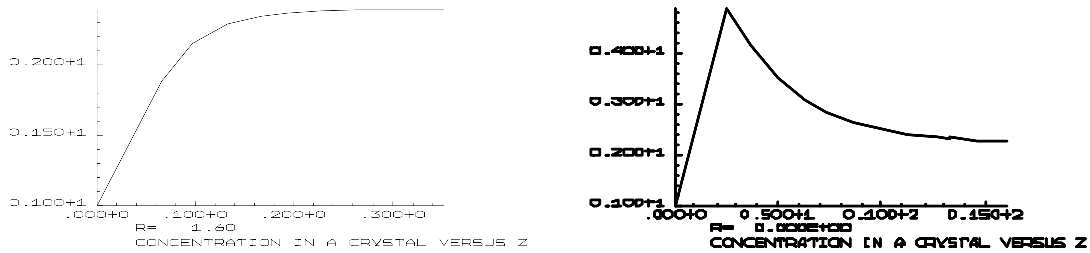
Как было показано в работе [9], структура и скорости конвективного течения устанавливаются за несколько минут, поле температур устанавливается за несколько секунд. Однако концентрация примеси постоянно меняется в течение всего процесса и для нее стационарного значения не существует (т.к. $k_0 \neq 1$), а существует g=g_o g=0.001g_o



W_s = 0.36 см/час



W_s = 1.8 см/час



W_s = 3.6 см/час

Рис.6 Продольное распределение (по времени) максимальной в поперечном сечении концентрации Ga в кристалле Ge для шести случаев: как функция скорости роста (W_s = 0.36 см/час - верхний ряд, 1.8см/час - средний ряд, 3.6см/час - нижний ряд) и ускорения силы тяжести (g= g_o - левая колонка и g=0.001 g_o - правая колонка).

квазистационарный процесс, который наступает через несколько часов. Для случая тестовой задачи 3 на рис.5 показано распределение примеси в кристалле в зависимости от скорости роста и ускорения силы тяжести. Эти зависимости показывают, что даже в условиях слабой естественной конвекции, ее влияние на характер распределения примеси больше, чем влияние скорости кристаллизации.

3.2 Влияние начального распределения концентрации и величины зазора δ на распределение примеси

Кроме ускорения силы тяжести и скорости кристаллизации на распределение примеси оказывают температурные условия величина зазора δ и начальное распределение примеси. Для выявления влияния указанных параметров на распределение примеси в кристалле были проведены параметрические расчеты задачи, описанной в п.3.1 при следующих исходных данных: радиус тигля - R=1,6см; высота рабочей зоны - **h**=0.8см; температура кристаллизации - $\mathbf{T}_o$=936°C. Были просчитаны варианты, представленные в таблице 2, где первая колонка - номер варианта; $\boldsymbol{\delta}$ –

величина зазора; ***Ws*** - скорость кристаллизации; $\boldsymbol{C_{o1}}$ - начальная концентрация под нагревателем (0< z <h, область 4, см. рис.4) и $\boldsymbol{C_{o2}}$ - начальная концентрация над нагревателем (z >h, область 2); ***sign dC/dt*** - знак производной концентрации по времени (длине кристалла) в указанной точке в момент времени $\boldsymbol{t = t_{max}}$, указанный в последней колонке. В варианте #1 $\mathbf{T_1} = \mathbf{T_2}$=944°C (на нагревателе поддерживалась постоянная температура), во всех других вариантах $\mathbf{T_1}$=942°C, $\mathbf{T_2}$=945°C; расплав германия Ge с примесью галлия Ga ($\boldsymbol{k_o}$=0.087); вариант #2 соответствует условиям пониженной гравитации ($\mathbf{g/g_o}=10^{-2}$), а вариант #3 невесомости ($\mathbf{g/g_o}$=0), во всех других вариантах ускорение силы тяжести равно ускорению силы тяжести Земли ($\mathbf{g/g_o}$=1).

Таблица 2.

Таблица 2		δ	W_s	C_{01}	C_{02}	sign dC/dt	t_{max}
Вариант	№	см	см/час	внизу	наверху	(r=1,z=0,t=tmax)	час
T_h=const	**1**	0,1	3,60	1	0,087	-	1,5
$g/go=10^{-2}$	**2**	0,1	1	1	0,087	-	4,7
g/go=0	**3**	0,1	1	1	0,1	+	3,29
	4	0,1	0,01	1	0,087	-	8,2
	5	0,1	0,01	1	0,5	-	0,47
	6	0,1	10	1	0,087	-	1,32
	7	0,1	10	1	0,87	-	1,11
	8	0,1	1	1	0,87	+	1,29
	9	0,1	1	1	0,2	+	1,11
	10	0,1	1	1	0,087	-	1,38
	11	0,1	1	1	0,1	0	1,09
	12	0,1	3,6	1	0,1	-	1,16
	13	0,1	0,5	1	0,087	-	1,12
	14	0,05	0,5	1	0,087	-	0,938
	15	0,05	3,6	1	0,087	-	0,5

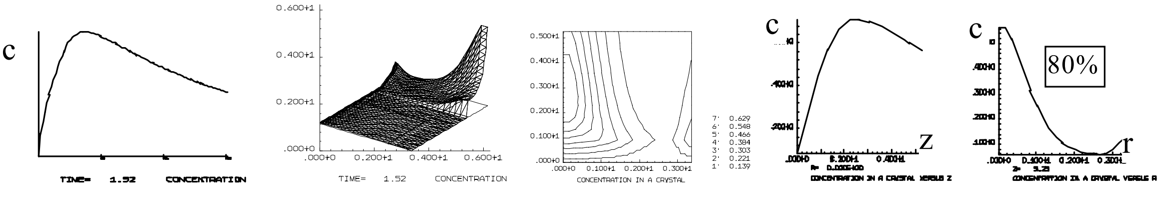
При такой постановке задачи интенсивность конвективного течения в области 4 может быть на 3-4 порядка меньше, чем в области 2 (рис.4), а при специальном подборе граничных условий по температуре естественная ковекция в области 2 может быть практически сведена до нуля. Следует отметить, во всех вариантах течение происходит в направлении по часовой стрелке. Направление течения можно поменять, если сделать $\mathbf{T_1 > T_2}$.

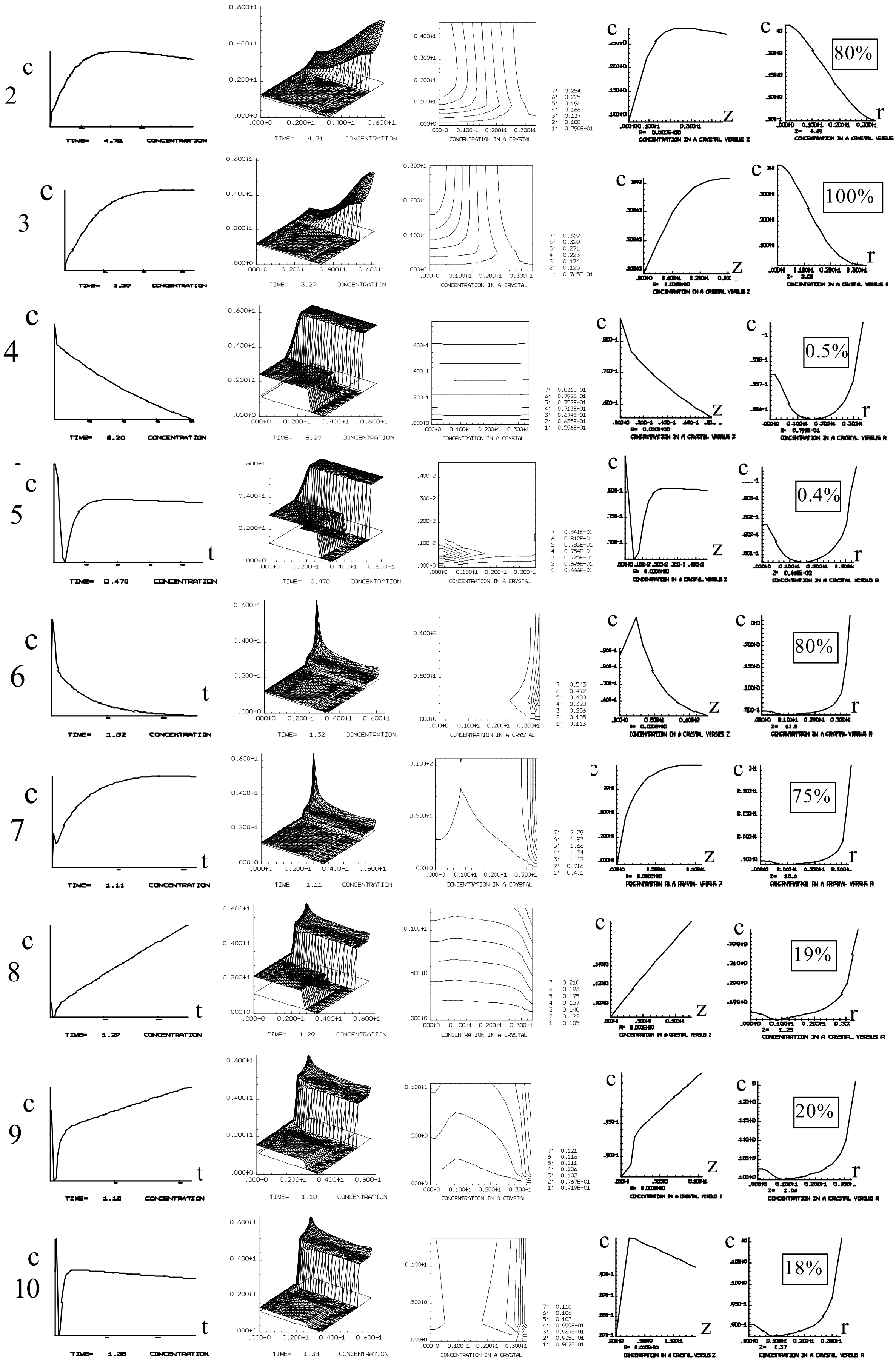
Цель параметрических расчетов заключается в том, чтобы найти условия при которых продольное распределение примеси в кристалле будет постоянным при минимальной радиальной сегрегации.

При проведении параметрических расчетов были рассмотрены следующие диапазоны параметров: минимальная скорость роста кристалла ***Ws*** = 0.01см/час - (варианты #4 и 5), максимальная скорость ***Ws*** =10см/час (варианты # 6 и 7); минимальное отношение концентраций $\boldsymbol{n = C_{o1} / C_{o2}}$ = 1.667 (варианты # 7 и 8), максимальное отношение концентраций $\boldsymbol{n}$ = 16.67 (варианты # 1,4,6,10,13,14,15); минимальный размер зазора $\boldsymbol{\delta}$= 0.05см (варианты # 14 и 15) во всех других вариантах $\boldsymbol{\delta}$= 0.1см; минимальное значение перегрузки $\mathbf{g/g_o}$=0 (варианты # 3), в варианте #2 $\mathbf{g/g_o}=10^{-2}$, во всех других вариантах $\mathbf{g/g_o}$=1.

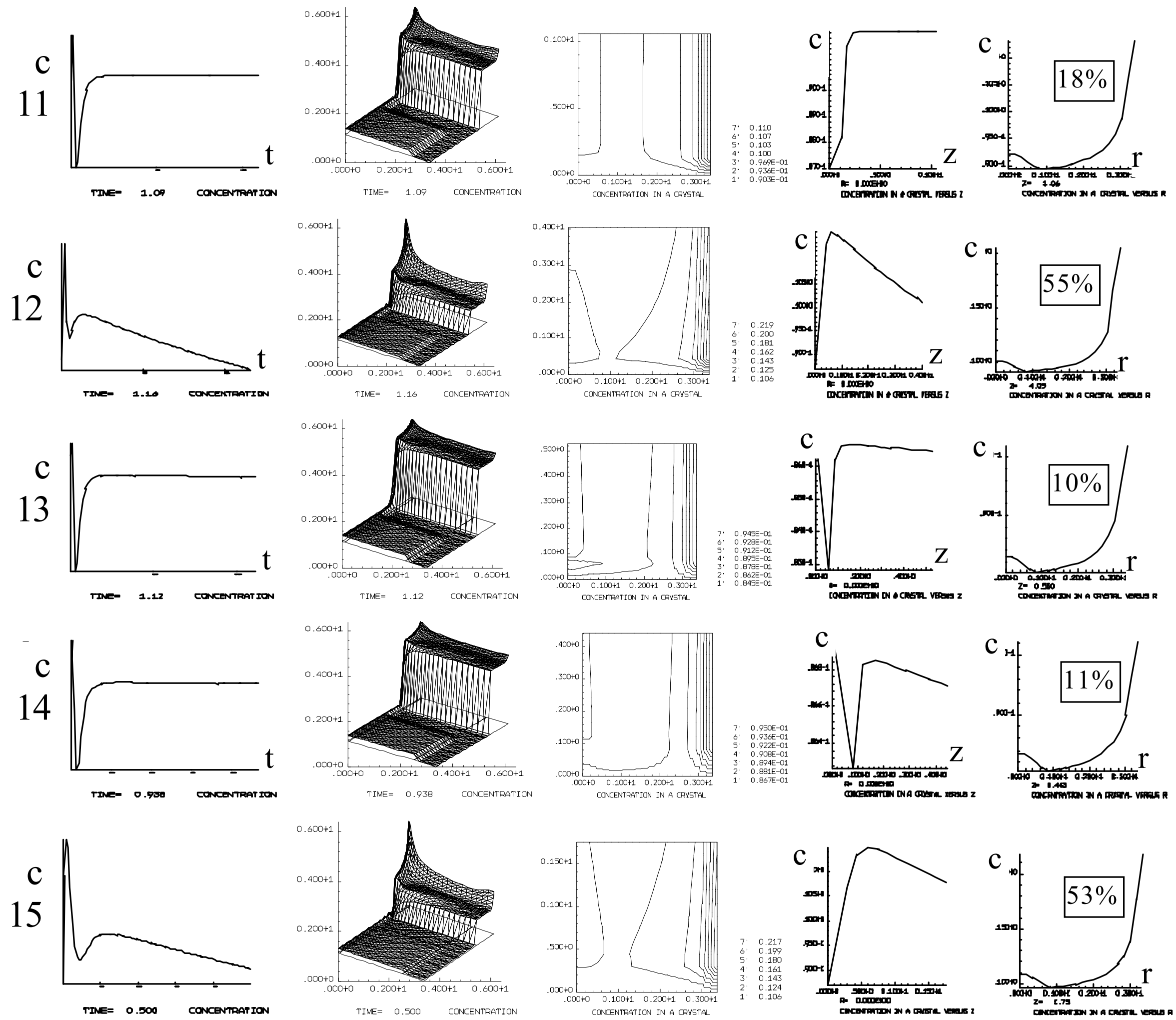
На рис.8 представлены результаты параметрических расчетов, варианты которых указаны в таблице 2 (на рисунке нумерация вариантов слева).

1





2
80%
3
100%
4
0.5%
5
0.4%
6
80%
7
75%
8
19%
9
20%
10
18%
c
t
z
r
CONCENTRATION
CONCENTRATION IN A CRYSTAL



а) б) в) г) д)

Рис. 7. Распределение примеси (Ga) в Ge в момент времени **t= t$_{max}$**, результаты параметрических расчетов (номера вариантов из таблицы 2, указаны слева), а)- зависимости концентрации в расплаве от времени в точке (**r=1, z=0**) (на графиках **t$_{max}$**- соответствует точкам крайним справа), б)- аксонометрические проекции концентрации в расплаве (**t= t$_{max}$**), в)- линии равных концентраций в кристалле (**t= t$_{max}$**), г)- распределение примеси по длине кристалла (**r=0**), д)-радиальное распределение примеси (**t= t$_{max}$**) (в процентах указана максимальная радиальная неоднородность).

Характерным распределением примеси при преобладаниии вынужденного течения являются случаи, изображенные на рис.7#1, 7#2, 7#3 (после знака # указан номер варианта (строки), обозначенный на рисунке слева). Все остальные варианты, изображенные на рис.7, можно отнести к случаю взаимодействия вынужденной и естественной конвекции. Сравнения численных результатов с экспериментальными данными [4-7] показали хорошую точность модели.

Продольное распределение примеси, изображенное на рис.3в, можно соотнести с расчитанными данными, изображенными на рис. 7#10г. Следует отметить, что на рис.7#10г продольная неоднородность на всем выросшем кристалле не превосходит 5%. Продольные распределения концентраций, изображенные на рис. 7#9г (максимальная сегрегация 1.5%) и рис.7#10г (максимальная сегрегация 50%) имеют такой же характер распределения примеси, как и на рис.3в, но в этих вариантах отношение концентраций в верхней и нижней областях отлично от n=16.67, как это было в эксперименте. Обратим внимание на два момента, первый - это то, что в экспериментах, перед кристаллизацией расплав выдерживался несколько часов, а в расчетах движение фронта начиналось сразу же с момента t=0, второй - это то, что в эксперименте в процессе роста высота h прикристальной области 2 (рис.4) изменялась, а в расчетах она была постоянной.

Сравнивая результаты варианта #1 рис.7#1.б (постоянная температура основного нагревателя) и варианта #4 рис.7#3.б (невесомость) можно сделать вывод, что при выращивании кристаллов методом Бриджмена с погруженным нагревателем, управляя тепловым полем, можно на земле получить условия близкие к невесомости. Наличие слабой конвекции даже в случае варианта #1 можно видеть на рис.7#1.б в виде пика концентрации около стенки тигля в области 2, чего нет на рис.7#3.б.

Случай отсутствия естественной конвекции (рис.7#3) не является лучшим для метода с погруженным нагревателем, с точки зрения равномерного распределения примеси, вследствие того, что вынужденная конвекция (струя расплава из области 2 через зазор δ втекает в область 4), вызванная вытягиванием кристалла при неподвижном основном нагревателе, нарушает однородное распределение примеси в прикристальной области. Слабая (**Ra>1**) естественная конвекция (без вынужденной) также нарушает однородность расплава, так как примесь (**Sc=10**) является очень чувствительной к конвективным течениям. Таким образом, существуют такие оптимальные условия, при которых струя расплава, поступающая из зазора δ будет компенсироваться подъемным течением, вызванным естественной конвекцией. Эти условия зависят от скорости кристаллизации, величины зазора δ, тепловых условий и начальных концентраций C_{o1} и C_{o2}. В процессе расчетов такие условия были найдены - это вариант #11 (рис.7#11).

Результаты параметрических расчетов, приведенные на рис.7, можно систематизировать следующим образом:

1. Концентрация по времени (по длине кристалла) на квазистационаре увеличивается (**dC/dt>0**) в вариантах #3,8 и 9, в варианте #7 - остается практически постоянной, во всех других вариантах она уменьшается (**dC/dt<0**).
2. Слабое влияние величины зазора δ на распределение примеси можно видеть, сравнивая варианты #13 (δ**=0.1**) и вариант #14 (δ**=0.05**), при этом изменении δ скорость струи в зазоре увеличилась почти в два раза при той же скорости кристаллизации).
3. Влияние скорости роста ***Ws*** на распределение примеси можно видеть, сравнивая результаты в четырех группах вариантов: #4 (***Ws*** = 0.5), #13 (***Ws*** = 0.5), #10 (***Ws***=1) и #6 (***Ws*** = 10); #11 (***Ws*** = 1) и #12 (***Ws*** = 3.6); #8 (***Ws*** = 1) и #7 (***Ws*** =10); а также варианты #14 (***Ws*** = 0.5) и #15 (***Ws***=3.6). При увеличении скорости роста радиальная неоднородность увеличивается - это видно на рис.7б и рис.7д.
4. Зависимость неоднородности распределения примеси от отношения начальных концентраций $n = C_{o1} / C_{o2}$ показывает сравнение результатов в следующих трех группах вариантов: #8 (***n*=1.667**), #9 (***n*=5**), #11 (***n*=10**) и #10 (***n*=16.67**); #5 (***n*=2**) и #4 (***n*=16.67**); #7 (***n*=1.667**) и #6 (***n*=16.67**). При увеличении значения ***n*** модуль производной dC/dt (или dC/dz) уменьшается (на квазистационаре, например, при $t = t_{max}$).
5. Влияние силы тяжести можно увидеть, сравнивая результаты вариантов #2 (g/g_o=10^{-2}), #4 (g/g_o=0) и #11 (g/g_o=1). В данном случае однородность лучше при g/g_o=1.
6. Сравнивая результаты вариантов #1 (T_h=T_1=T_2=944°C=const) и варианта #15 (T_1=942°C, T_2=945°C) можно видеть сильное влияние тепловых условий на поперечное и продольное распределение примеси.
7. Поперечная неоднородность минимальна в вариантах #4 и #5, максимальна в варианте #3, продольная неоднородность минимальна в варианте #11.

3.3 Влияние вращения на распределение примеси

Исследования влияния вращения погруженного нагревателя и ампулы с кристаллом на распределение примеси были выполнены при следующих значениях параметров: $W_s = 1\ cm/hour$, $C_{01} = C_{02} = 1$. Все другие параметры были такими же, как в предыдущем параграфе. Значениях частот вращения погруженного нагревателя и ампулы с кристаллом приведены в таблице 3 (нумерация вариантов расчетов в этом параграфе своя по умолчанию с #1 по #12, при обращении к таблице 2 будет указано специально). В таблице 3 обозначено: N - номер вариантов, разность концентрации - $\Delta C = \max_r(C(r,z=0)) - \min_r(C(r,z=0))$ и t_{max} - максимальное время расчета.

Таблица 3. Перечень вариантов.

N	g/g_0	Ω_b	Ω_c	f	ΔC	t_{max}
		rps	rps	Hz		Sec
1	1	0	0	0	0.198	3880
2	0	0	0	0	0.275	17100
3	1	0.05	0	0	0.263	5330
4	0	0.05	0	0	0.077	1940
5	1	0.3117	0	0	0.192	3650
6	0	0.3117	0	0	0.100	1030
7	1	0.6217	0	0	0.077	1410
8	1	0	0.3117	0	0.061	3640
9	1	0.05	0.3117	0	0.075	2310
10	1	-0.05	0.3117	0	0.049	3630
11	1	-0.3117	0.3117	0	0.054	2440
12	1	0.3117	0	0.68	0.279	1620

<u>Случай отсутствия вращения и конвекции (невесомость).(вариант 2).</u> В этом случае при $k_0 = 1$ и $C_{01} = C_{02}$ концентрация примеси не будет именяться и будет наблюдаться всегда однородное распределение примеси. При $k_0 \neq 1$ до момента времени $t < \frac{h}{W_s}$ распределение примеси на фронте кристаллизации будет практически однородным, но с увеличением времени $t > \frac{h}{W_s}$ неоднородность будет возрастать и может быть существенной (рис.9б). В этом случае концентрация примеси больше у стенок тигля (под зазором 3 рис.2), чем в центре области.

Для выравнивания концентрации необходимо перемешивание расплава в нижней части расплава тигля под погруженным нагревателем. Это может быть естественноконвективное и/или вынужденное перемешивание, например вращение тигля или погруженного нагревателя.

<u>Наличие конвекции без вращения (вариант #1)</u>. Естественная конвекция, как известно, выравнивает концентрацию в области около фронта кристаллизации. Этот случай был подробно рассмотрен в предыдущем параграфе для случаев $C_{01} \neq C_{02}$. На рис. 9а показаны изолинии концентрации примеси в кристалле для наземного случая (g/g0=1). Видно, что в этом случае концентрация примеси больше в центре области, чем на периферии, не так, как было при g/g0=0 (рис.9б). Здесь следует отметить, что в данном случае конвективный поток в области под нагревателем имеет направление по

часовой стрелке (такое же, как и в верхней части области). Очевидно, что это конвективное перемешивание не является оптимальным с точки зрения равномерного распределения примеси по радиусу кристалла. Расчеты показали, что, изменяя температуру на нижней части нагревателя, можно получить конвективный поток под ним другой интенсивности, другого направления и распределение примеси, как в условиях невесомости и более однородное.

Влияние вращения. (варианты #3 - #12) Естественноконвективное перемешивание, вращение тигля и вращение погруженного нагревателя создают разные структуры течения расплава. Так, например, только при вращении погруженного нагревателя, создаваемые потоки над ним и под ним имеют разные направления и интенсивности. На рис.5 показаны изолинии функций тока для случая без вращения (рис.5а) и с вращением погруженного нагревателя ($\Omega_b = 0.3117$ rps) (рис.5б).

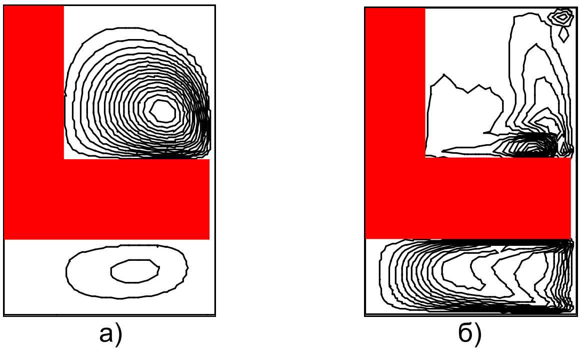


Рис.8 Изолинии функции тока при условии $g/g_0 = 1$.

а) без вращения (вариант #1, см. таблицу 3),

б) с вращением погруженного нагревателя (вариант #5).

Вращение тигля создает течение расплава, совпадающее по направлению с естественноконвективным течением. Вращение погруженного нагревателя создает под ним течение, противоположно направленное конвективному потоку. Следует отметить, что в подобласти над погруженным нагревателем конвективное течение и течение, вызванное вращением, имеют одинаковое направление и дополняют друг друга. В общем случае эти течения не складываются, а существуют отдельно, взаимодействуя друг с другом. Например, в структуре течения на рис. 8б визуально можно выделить потоки, создаваемые вращением и конвекцией. Их взаимодействие приводит к колебательному режиму течения расплава.

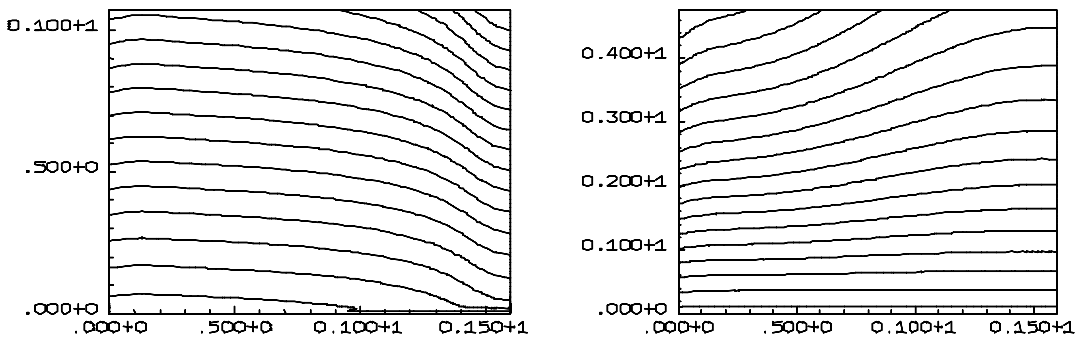
При вращении погруженного нагревателя, создаваемое им течение, противоборствует конвективному потоку в нижней подобласти около фронта кристаллизации. Управляя противоборством этих потоков у фронта кристаллизации, можно создать условия для наиболее однородного распределения примеси в кристалле. Вращение погруженного нагревателя приводит к распределениям примеси, показанным на рис. 10, 11 и 12а. Увеличение скорости вращения погруженного нагревателя приводит к выравниванию радиального распределения примеси (рис. 11).

Однако расчеты показали, что вращение тигля является более эффективным, чем вращение погруженного нагревателя. Это видно, если сравнить распределения примеси в кристалле при вращении погруженного нагревателя (рис. 12а) и при вращении тигля (рис. 12б). Видно, что более медленное вращение тигля приводят к более однородному распределению примеси в кристалле, чем при более быстром вращении погруженного нагревателя.

Однородность может быть улучшена, если применить одновременное вращение погруженного нагревателя и тигля (рис. 13а). Лучшая однородность распределения примеси наблюдается, если тигель и погруженный нагреватель вращаются в противоположные стороны (рис. 13б и рис.14а). Для лучшей однородности нагреватель не должен вращаться слишком быстро (рис.14а), поскольку при быстром вращении течение расплава принимает колебательный характер, что негативно сказывается на однородности. Например, при частоте $\Omega_b = 0.6217 rps$ течение расплава имеет колебательный характер.

Иногда для гомогенизации расплава применяют осциллирующее или ускоренно-замедленное вращения. В данной работе были проведены расчеты с осциллирующим вращением погруженного нагревателя (с частотой вращения $\Omega_b = 0.05 rps$ и частотой осцилляций f=0.68 Гц). Для данного случая распределение примеси в кристалле представлено на рис.14.б. Результаты расчетов осциллирующего вращения показали следующее, во-первых, то, что данные параметры не являются оптимальными с тоски зрения однородности, а, во-вторых, осцилляции вращения погруженного нагревателя сказываются на распределении примеси. Другими словами кристалл "чувствует" осцилляции.

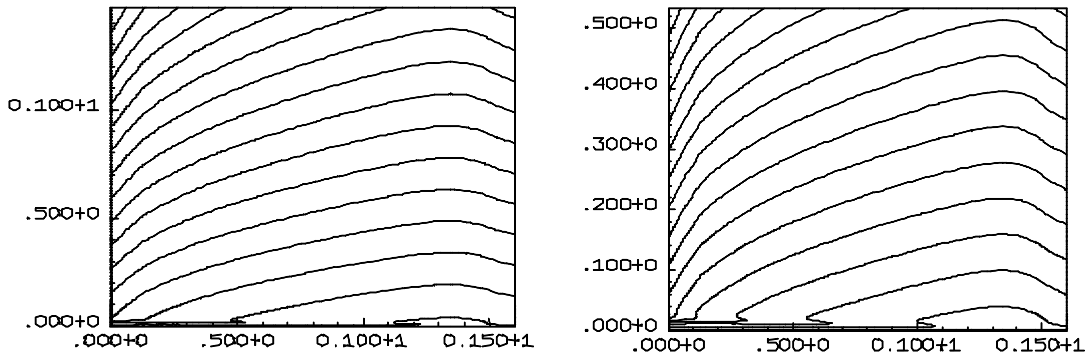
Однако, следует отметить, что для эффективного применения осциллирующих вращений, также как и вибраций необходимы дополнительные исследования этих видов течений.



а) б)

Рис. 9. Распределение примеси в кристалле без вращения.

а) на Земле $g/g_0 = 1$ (вариант #1), б) в невесомости $g/g_0 = 0$ (вариант #2).

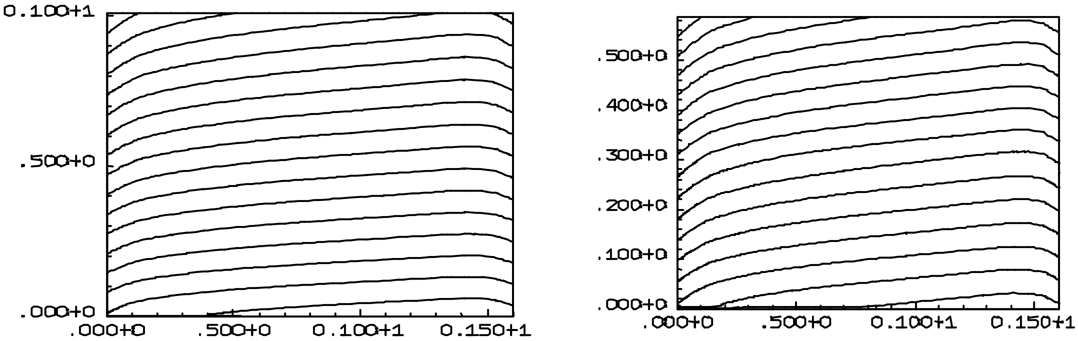


а) б)

Рис.10 Распределение примеси в кристалле (варианты #3,4).

а) на Земле, вращающийся погруженный нагреватель $\Omega_b = 0.05 rps$;

б) в невесомости, вращающийся погруженный нагреватель $\Omega_b = 0.05 rps$;

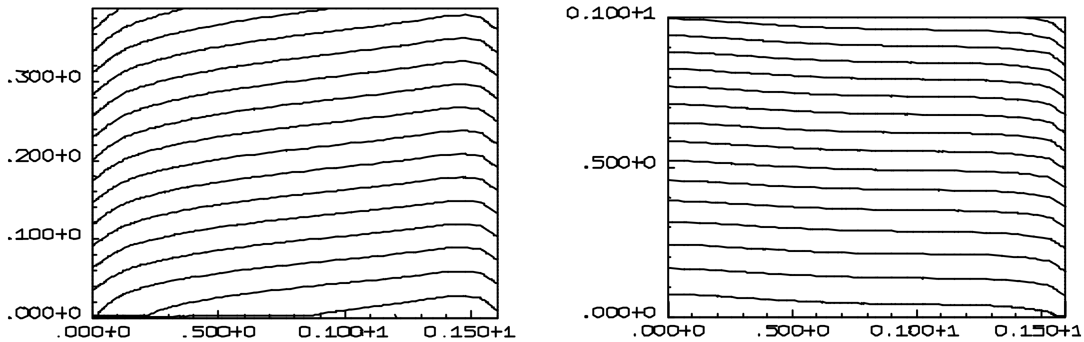


а) б)

Рис.11 Распределение примеси в кристалле (варианты #5-6).

a) на Земле, вращающийся погруженный нагреватель $\Omega_b = 0.3117 \text{rps}$;

b) б)в невесомости, вращающийся погруженный нагреватель $\Omega_b = 0.3117 \text{rps}$;

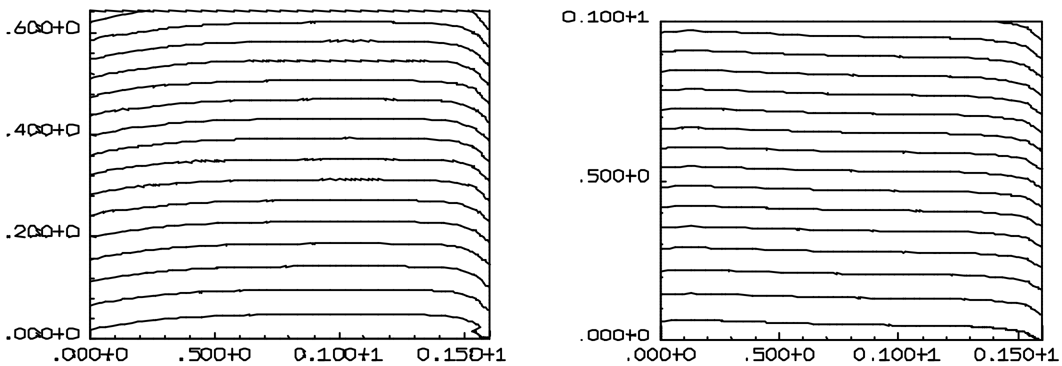


а) б)

Рис.12 Распределение примеси в кристалле (варианты #7-8).

a) На Земле, вращающийся погруженный нагреватель $\Omega_b = 0.6217 \text{rps}$;

b) б) На Земле, вращающийся тигель $\Omega_C = 0.3117 \text{rps}$;

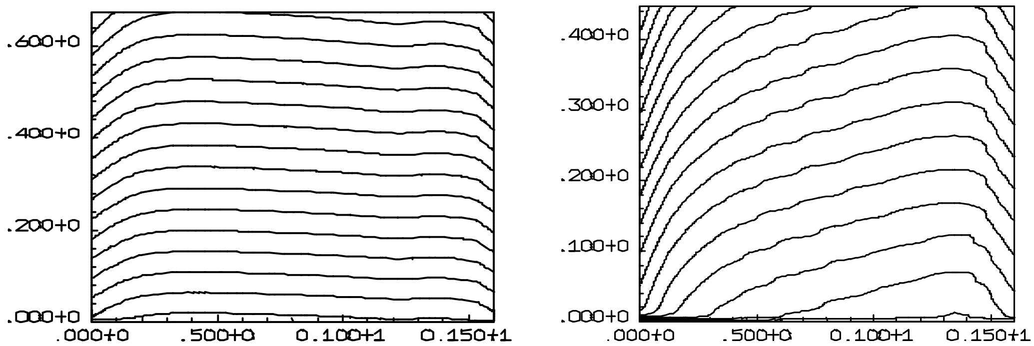


а) б)

Рис.13 Распределение примеси в кристалле (варианты #9-10).

а) на Земле, вращающийся погруженный нагреватель $\Omega_b = 0.05 \text{rps}$ и тигель $\Omega_C = 0.3117 \text{rps}$;

б) на Земле, вращающийся погруженный нагреватель $\Omega_b = -0.05 \text{rps}$ и тигель $\Omega_C = 0.3117 \text{rps}$;



а) б)

Рис.14 Распределение примеси в кристалле (варианты #11-12).
а) на Земле, вращающийся погруженный нагреватель $\Omega_b = -0.3117$ rps и тигель $\Omega_C = 0.3117$rps;
б) Осциллирующее вращение погруженного нагревателя с частотой f=0,68 Гц., на Земле, вращающийся погруженный нагреватель $\Omega_b = 0.05$ rps и тигель $\Omega_C = 0$.

4. ВЫВОДЫ

Сравнение результатов расчетов с тестовыми и с экспериментальными данными показало ее адекватность и эффективность данной математической модели при проведении многопараметрических расчетов.

Численно найдены режимы выращивания кристаллов германия с примесью Ga методом Бриджмена с погруженным нагревателем, при которых продольное распределение примеси практически постоянно (рис.7#11).

Показано влияние определяющих параметров на продольное и поперечное распределение примеси в кристаллах, выращиваемых методом Бриджмена с погруженным нагревателем.

Найдены оптимальные режимы с вращением и без вращения для наиболее однородного радиального распределения примеси. Показана возможность получения в земных условиях более однородного распределения примеси, чем в условиях невесомости.

5. **ЛИТЕРАТУРА**

1. V.I.Polezhaev Modeling of hydrodynamics, heat and mass transfer processes on the basis of unsteady Navier-Stokes equations. Applications to the material sciences at earth and under microgravity. Comput. Methods Appl. Mech. Eng. 115, 1994, 79-92
2. S.A.Nikitin, V.I.Poleshaev and A.I.Fedyushkin. Mathematical simulation in crystals prepared under microgravity conditions. J.Crystal Growth,52,(1981), pp.471-477.
3. E.V.Zharikov, L.V.Prihod’ko, N.R.Storozhev. Fluid flow formation resulting from forced vibration of a growing crystal. J.Crystal Growth,99,(1990), pp.910-914.
4. S.Meyer, A.G.Ostrogorsky. Forsed convection in vertical Bridgman configuration with the submerged heater. J.Crystal Growth 171(1997) 566-576.
5. V.D.Golyshev, M.A.Gonik.Method of large single crystals growth from melt with given shape of melt-crystal interface. Hydromech. and heat/mass transfer in ace Congr., Moscow, August 16-17,1994,-Moscow,1991, pp.489-494.
6. V.D.Golyshev, M.A.Gonik.Terrestrial experimental researh of new method features of large single crystal growth. In: Proc. Microgravity sci. and aplications session, Int. Aerospace Congr., Moscow, August 16-17,1994,Moscow,1995, pp.167-171.
7. Н.Г.Бураго, В.Д.Голышев, М.А.Гоник, В.И.Полежаев, А.И.Федюшкин, В.Б.Цветовский. Характер вынужденной и естественной конвекции и его влияние на

распределение примеси в кристалле при росте методом ОТФ1а. Александров. III Международная конференция “Кристаллы: рост, свойства, реальная структура, применение”, г. Александров. Труды конференции, т.2, с.116-131, 1997.
8. A.G.Ostrogorsky, Z.Dragojlovic. Model of Convection and Segregation During Growth by the Submerged Baffle Method. In:Proc. Microgravity sci. and applications session, Intern. Aerospace Congr., Moscow, August 16 - 17 , 1994 , Moscow , 1995, pp 127-133
9. N.G.Bourago, A.I.Fedyushkin, V.I.Polezhaev. Modelling of unsteady submerged heating crystal growth in ground-based and microgravity environment. Physical sciences in microgravity. Proceedings of joint Xth European and VIth Russian Symposium on Physical sciences in microgravity. St. Peterburg, Russia, 15-21 June 1997 , vol. II, pp.170-173, 1997.
10. В.И.Полежаев и др. Математическое моделирование конвективного тепло и массообмена на основе уравнений Навье-Стокса. М.,Наука,1991.
11. N.G.Bourago and V. N. Kukudzhanov, Numerical Simulation of Elastic Plastic Media by Finite Element Method, Preprint IPMech AS USSR, N.326, 1988, pp. 1-63.Second edition in "Computer Mechanics", issue 2, 1991,pp. 78-122.
12. N.G.Bourago. Computer Code "ASTRA" for Non-linear Problems in Continuous Mechanics.in "Abstracts of 7th Nordic Seminar on Computational Mechanics", Trondheim, 1994.
13. N.G.Bourago. Numerical methods for non-linear processes in elastic plastic media. in “Lechers of FEM-94 Seminar”, Gothenberg, 1994, pp. 1-15.
14. de Vahl Davis, I.P.Jones. Natural convection in square cavity: A comparison exercise. Intern. J. Numer. Meth. Fluids. 1983. Vol. 3, pp. 227-248.
15. M.K.Ermakov, V.L.Griaznov, S.A.Nikitin et al. A PC-based System for Modelling Convection in Enclosures on the basis of Navier-Stokes Equations, Intern. Journal Numer. Methods in Fluids, 1992, v.15, pp.975-984.
16. Willer TECT!!!!!!!