

А. Е. Аснис, В. Ф. Демченко, А. Б. Лесной,  
С. П. Заболотин

Институт электросваривания ім. Є. О. Патона НАНУ, Київ

**Математическое моделирование тепловых  
и гидродинамических процессов  
при электронно-лучевой бестигельной  
зонной плавке монокристалла кремния  
в условиях микрогравитации**

---

Методом комп'ютерного моделювання проведено порівняльний аналіз теплового і гідродинамічного стану в монокристалах кремнію, отримуваних методом електронно-променевого бестигельного плавлення в земних умовах і в умовах мікрогравітації.

---

В различных технологиях получения полупроводниковых материалов существенное влияние на степень физической и химической неоднородности выращиваемых монокристаллов оказывают [4] гидродинамические процессы, развивающиеся в расплаве под действием различных силовых факторов: архимедовой силы (тепловая и концентрационная конвекция), градиента сил поверхностного натяжения на свободной поверхности расплава (термокапиллярная и концентрационнокапиллярная конвекция), пондеромоторной силы, возникающей в жидкости при пропускании электрического тока и др. Достаточно проблематичной представляется возможность управлять гидродинамикой расплава, так как требования, предъявляемые к формированию кристалла (градиенты температур вблизи фронта кристаллизации и его геометрия, степень перегрева расплава, распределение легирующих и примесных элементов) вступают в противоречие с тепловыми условиями создания благоприятной гидродинамической обстановки. С этой целью в ряде технологий используется принудительное воздействие на течение расплава за счет вращения монокристалла, создания электромагнитной силы и др.

Чрезвычайно привлекательным представляется использование космического пространства как уникальной технологической среды для выращивания

полупроводниковых материалов, так как в условиях микрогравитации существенно подавляется тепловая конвекция, определяющая гидродинамику расплава в земных условиях.

В институте электросварки им. Е.О. Патона НАНУ проводятся работы [5] по созданию технологии и аппаратуры для получения совершенных полупроводниковых материалов методом электронно-лучевой бестигельной зонной плавки, при которой расплавленная зона удерживается силами поверхностного натяжения. Кольцевой электронно-лучевой нагреватель, осуществляющий нагрев и плавление цилиндрического образца, перемещается по образующей с постоянной скоростью. В конструкции установки предусмотрена возможность вращения переплавляемого кристалла, плавка в тепловом экране, пропускание постоянного тока вдоль образца, а также сканирование электронного луча с заданной частотой и амплитудой по свободной поверхности расплавленной зоны. Проведенные на опытной установке эксперименты свидетельствуют о том, что в земных условиях плавки обеспечивается устойчивое формирование монокристалла кремния  $\varnothing 10$  мм и поддержание высоты расплавленной зоны в диапазоне 8—10 мм.

С целью прогнозирования технологических результатов и отработки параметров режима плавки

в условиях микрогравитации разработана математическая модель тепловых и гидродинамических процессов, которая базируется на полной системе уравнений динамики вязкой несжимаемой жидкости и уравнении конвективно-кондуктивного переноса энергии в осесимметричной постановке. Тепловые процессы описываются уравнением энергии в энтальпийной формулировке, учитывающей выделение (поглощение) скрытой теплоты на фронте кристаллизации (плавления)

$$\frac{\partial W}{\partial t} + V_r \frac{\partial W}{\partial r} + V_z \frac{\partial W}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right), \quad (1)$$

$$r, z \in \Omega = \{0 < r < R, 0 < z < H\},$$

где  $W(T) = \int_{T_0}^T c\rho dT + \kappa\rho\eta(T)$  — энтальпия,  $\eta(T - T^*)$  — функция Хевисайда,  $T^*$  — температура кристаллизации,  $c(T)$ ,  $\rho(T)$  — удельная теплоемкость и плотность материала,  $\lambda(T)$  — коэффициент теплопроводности,  $\mathbf{v} = \{v_r, v_z\}$  — вектор скорости движения расплава. На внешней поверхности цилиндрического образца  $\Omega$  выписываются условия радиационного теплообмена со стенками камеры

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial n} = \varepsilon_{\text{пр}} \sigma_0 (T^4 - T_k^4), \quad (2)$$

где  $\varepsilon_{\text{пр}}$  — приведенная степень черноты,  $T$ ,  $T_k$  — температура поверхности формирующегося монокристалла и вакуумной камеры. Дополнительно к (2) при плавке в тепловом экране модель предусматривает возможность радиационного теплообмена боковой поверхности образца с теплозащитным экраном, расположенном ниже фронта кристаллизации и перемещающимся вместе с источником электронно-лучевого нагрева. По длине экрана решается одномерная нестационарная задача теплопроводности с учетом лучистого теплообмена поверхностями экрана с образцом и стенками камеры.

На оси образца записывается условие симметрии температурного поля

$$\left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=0} = 0. \quad (3)$$

Плотность теплового потока электронно-лучевого нагревателя  $q(r, t)$  предполагается распределенной вдоль образующей образца по нормальному закону: центр пятна нагрева в регулярном режиме плавки перемещается с постоянной скоростью  $v_e$ . Параметры гауссовского закона распределения мощности

нагрева выбирались таким образом, чтобы 90 % мощности выделялось в кольцевом пятне заданной высоты. Для оценки влияния теплоты испарения взвешивали образцы до и после плавки. В результате проведенных измерений установлено, что потери массы не превышают 0.3 %, поэтому затратами тепла на испарение можно пренебречь.

Гидродинамические процессы в расплавленной зоне описываются системой нестационарных уравнений Навье—Стокса движения вязкой несжимаемой жидкости в приближении Обербека—Буссинеска:

$$\frac{\partial V_r}{\partial t} + V_r \frac{\partial V_r}{\partial r} + V_z \frac{\partial V_r}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial r} + \nu \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial V_r}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 V_r}{\partial z^2} - \frac{V_r}{r^2} \right), \quad (4)$$

$$\frac{\partial V_z}{\partial t} + V_r \frac{\partial V_z}{\partial r} + V_z \frac{\partial V_z}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} + \nu \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial V_z}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 V_z}{\partial z^2} \right) + F_z, \quad (5)$$

$$\frac{\partial V_z}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r V_r) = 0, \quad (6)$$

где  $P$  — давление,  $\nu$  — коэффициент кинематической вязкости,  $F_z = g\beta_T T$  — архимедова сила,  $g$  — ускорение свободного падения,  $\beta_T$  — коэффициент термического объемного расширения расплава.

На фронтах  $\Gamma_f$  плавления и кристаллизации задаются условия прилипания и непроницаемости

$$V_n \Big|_{\Gamma_f} = V_\tau \Big|_{\Gamma_f} = 0,$$

где  $V_n$ ,  $V_\tau$  — нормальная и касательная к границе составляющие вектора скорости.

На свободной поверхности выполняется условие Марангони, в соответствии с которым тангенциальные напряжения, возникающие в поверхностном слое жидкого металла, уравниваются градиентом сил поверхностного натяжения:

$$\nu \frac{\partial V_r}{\partial r} \Big|_{r=R} = -\frac{1}{\rho} \beta_\sigma \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{r=R}, \quad (8)$$

где  $\beta_\sigma$  — коэффициент поверхностного расширения. Для нормальной составляющей вектора скорости задаются условия непроницаемости

$$V_z(r, 0, t) = 0. \quad (9)$$

Уравнения гидродинамики интегрируются в двумерной области, которая ограничена с одной стороны свободной поверхностью, с другой — фронтами

кристаллизации и плавления, геометрия которых подлежит определению из решения тепловой задачи. Незначительной деформацией свободной поверхности металлической ванны будем пренебрегать. В начальный момент времени  $t = 0$  задается температура монокристалла и положение центра электронно-лучевого нагрева.

Сопряженная задача гидродинамики и теплообмена решается в естественных переменных методом сеток с использованием неявных разностных схем. Для аппроксимации уравнений конвективно-кондуктивного переноса энергии и импульса используется совместный лагранжево-эйлеровский метод [1, 3], основная идея которого состоит в аппроксимации на локальных лагранжевых сетках конвективных членов в уравнениях энергии и движения вместе с субстанциональными производными. Проведенные нами теоретические исследования и вычислительные эксперименты, выполненные на тестовых задачах, показали [2], что предложенный метод позволяет проводить расчеты с высокой точностью на достаточно грубых временных сетках благодаря подавлению эффектов счетной диссипации. Системы сеточных уравнений решаются при помощи высокоэффективной вычислительной процедуры ORTOMIN.

Расчеты проводились для образца  $\varnothing 1$  см и длиной 10 см на сетке  $30 \times 300$  узлов; мощность  $Q$  электронно-лучевого нагревателя и скорость его

перемещения  $v_e$  варьировались в пределах:  $Q = 260 \dots 300$  Вт,  $v_e = 2 \dots 10$  см/ч.

На рис. 1, а представлено температурное поле и картина течения расплава рис. 1, б при зонной плавке монокристалла кремния в земных условиях для  $Q = 280$  Вт,  $v_e = 35$  мм/ч; источник электронно-лучевого нагрева сфокусирован в пятно высотой  $h = 3$  мм. В этом случае гидродинамическое состояние расплавленной зоны формируется преимущественно под воздействием архимедовой силы: на свободной поверхности возникает восходящий поток расплава, который вблизи фронта плавления разворачивается в радиальном направлении, образуя тороидальный вихрь, центр которого смещен к фронту плавления. Наибольшая скорость течения наблюдается на свободной поверхности в зоне максимального тепловыделения луча, а также в осевых участках жидкого расплава (эффект цилиндричности образца). Интенсивным течением охватывается большая часть центральных объемов расплавленной зоны. Вдоль фронта кристаллизации конвективные потоки имеют наименьшую интенсивность, особенно в осевой и приповерхностной зоне, где характерная скорость течения составляет  $0.08$  см/с.

Тепловое состояние образца характеризуется близкой к плоской геометрией фронта кристаллизации (изотерма 3, рис. 1, б), что благоприятным образом сказывается на формировании монокристалла с высокой однородностью свойств. Вычисли-

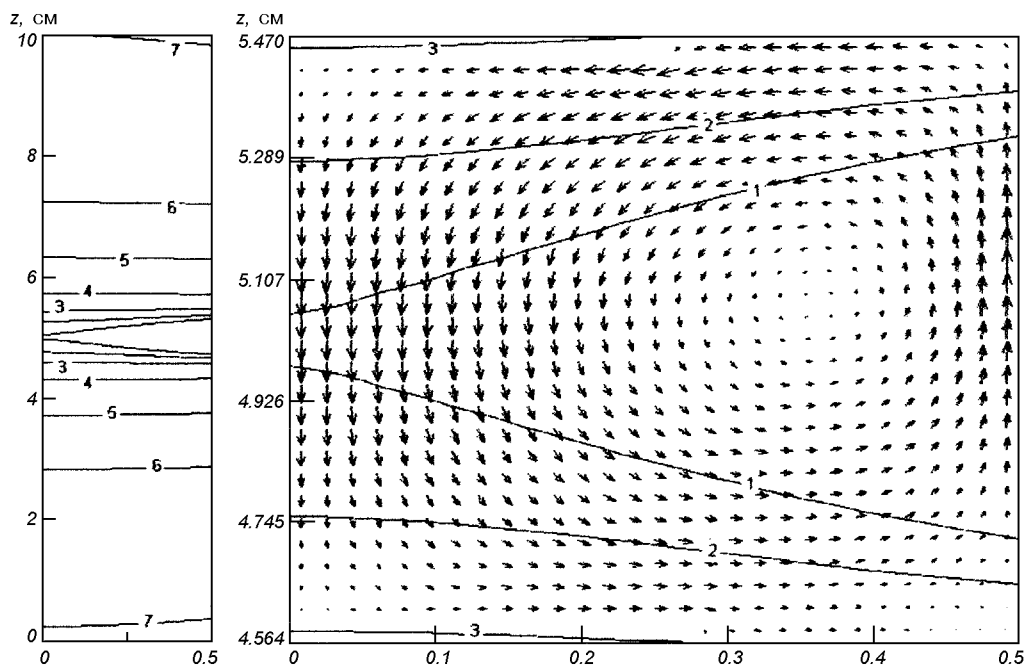


Рис. 1. Поле температур и течение расплава в земных условиях

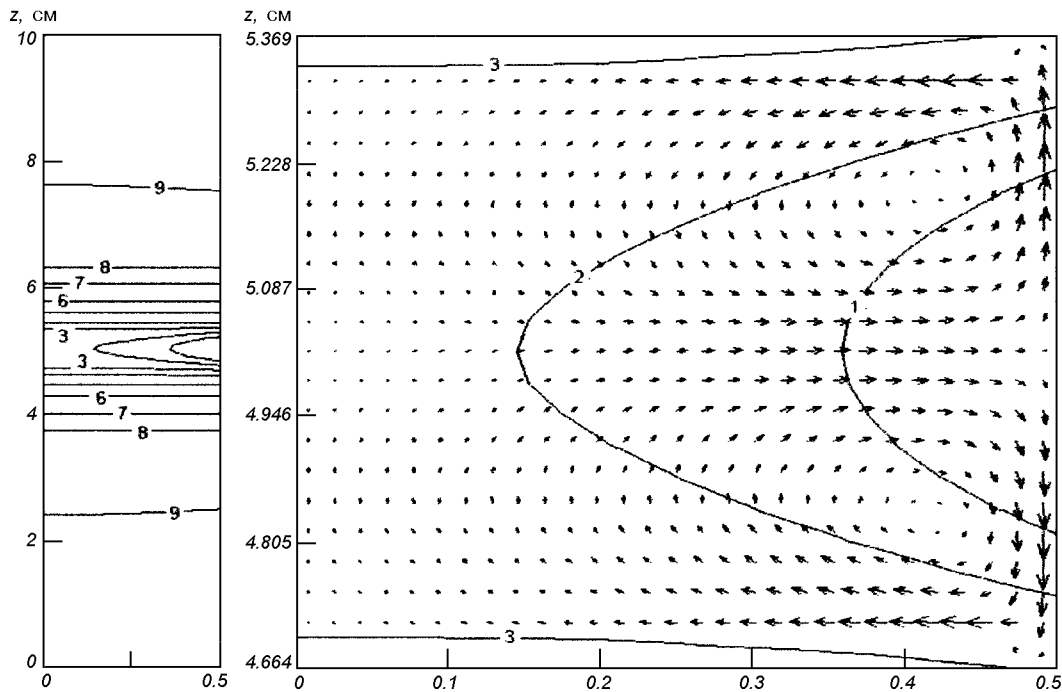


Рис. 2. Поле температур и течение расплава в условиях микрогравитации

тельный эксперимент по исследованию влияния режимов плавки на размер расплавленной зоны показал, что высота зоны определяется мощностью электронно-лучевого нагрева и практически не зависит от скорости  $v_e$  перемещения источника нагрева в диапазоне скоростей плавки 1—10 см/ч. Последнее объясняется низкими значениями (порядка 0.001) теплового критерия Пекле, рассчитанного по значению  $v_e$ . Эти результаты вычислений хорошо согласуются с данными экспериментов; при этом рассчитанная высота зоны расплава отличается от экспериментальной на 5—7 %. Существенное влияние на перегрев расплава выше температуры кристаллизации, а следовательно, и на интенсивность конвекции в расплавленной зоне имеет степень сосредоточенности источника электронно-лучевого нагрева. Так, при  $h = 9$  мм максимальный перегрев расплава на свободной поверхности ванны не превосходит  $60^\circ\text{C}$ , соответственно этому уменьшаются скорости течения расплава.

В отличие от земных условий плавки, течение расплава в условиях микрогравитации (рис. 2) формируется преимущественно под действием термокапиллярной силы, в результате которой в расплаве образуется два встречных глобальных торoidalных вихря, центры которых также смещены к фронту плавления и свободной поверхности распла-

ва. Интенсивное перемешивание расплава возникает только в приповерхностной зоне, удаленной от свободной поверхности на половину радиуса образца, в то время как в центре расплава наблюдается слабоинтенсивное течение.

Максимальные скорости течения оказываются в 5-6 раз меньшими, чем в земных условиях. Вследствие этого интенсивность отвода тепла конвективными потоками из зоны электронно-лучевого нагрева уменьшается — это приводит к повышению температуры перегрева свободной поверхности расплава и снижению теплоусвоения образцом мощности электронно-лучевого нагревателя за счет более высоких потерь тепла на излучение с боковой поверхности образца. По сравнению с земными условиями высота расплавленной зоны уменьшается на 10—15 %, и образуется более выпуклый фронт кристаллизации с величиной прогиба 0.35 мм. Поэтому в конструкции полетного варианта установки предусматривается возможность регулирования распределением плотности теплового потока электронно-лучевого нагрева, а также специальные средства целенаправленного воздействия на лучистый теплообмен образца с камерой, позволяющие поддерживать практически плоский фронт кристаллизации при невысокой степени перегрева расплава.

Исследования, проведенные в настоящей работе, показывают, что технология электронно-лучевой бестигельной зонной плавки позволяет в определенных пределах управлять интенсивностью термокапиллярной конвекции, возникающей в результате действия поверхностной силы, в отличие от других способов принудительного воздействия на течение расплава, например, электромагнитной силы, распределение которой имеет объемный характер и трудно поддается регулированию.

1. Демченко В. Ф., Лісний О. Б. Лагранжево-ейлеровий метод чисельного розв'язку багатовимірних задач конвективної дифузії // Доп. НАН України.—2000.—№ 11.—С. 71—75.
2. Демченко В. Ф., Лісний О. Б. Порівняльний аналіз дисипативних властивостей різницевого схем для багатовимірних задач конвективної дифузії // Математическое моделирование.—2000.—№ 1(6).—С. 20—24.
3. Ляшко И. И., Демченко В. Ф., Вакуленко С. А. Вариант метода расщепления уравнений динамики вязкой жидкости

на лагранжево-эйлеровых сетках // Докл. АН УССР. Сер. А.—1981.—С. 43—47.

4. Мильвидский М. Г., Картавых А. В., Раков В. В. Выращивание монокристаллов из расплавов в условиях космического полета // Поверхность.—2001.—№ 9.—С. 17—35.
5. Патон Б. Е., Лапчинский В. Ф. Сварка и родственные технологии в космосе. — Киев: Наук. думка, 1998.—182 с.

---

**MATHEMATICAL MODELLING OF THERMAL AND HYDRODYNAMIC PROCESSES IN THE ELECTRON BEAM FLOATING-ZONE MELTING OF SILICON MONOCRYSTAL UNDER MICROGRAVITY CONDITIONS**

A. E. Asnis, V. F. Demchenko,  
A. B. Lesnoi, and S. P. Zabolotin

Using computer modelling, we carried out the comparative analysis of thermal and hydrodynamic situation in the silicon monocrystals produced by electron beam floating zone melting under the terrestrial and microgravity conditions.