

О ВЛИЯНИИ ЧАСТОТЫ ВРАЩЕНИЯ МОНОКРИСТАЛЛА НА ТОЛЩИНУ ДИФфуЗИОННОГО СЛОЯ НА ФРОНТЕ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ В МЕТОДЕ БЗП

Запорожская государственная инженерная академия

Вивчено вплив теплової, відцентрової, термокапілярної та електродинамічної конвекції, які формуються в зоні розплаву під час безтигельного зонного плавлення кремнію, на розподіл температури та домішки. Встановлено, що розподіл домішки в зоні розплаву відповідає розподілу швидкості руху розплаву. Рух розплаву змінює товщину дифузійного шару на фронті кристалізації та ефективний коефіцієнт розподілу домішки.

Изучено влияние тепловой, центробежной, термокапиллярной и электродинамической конвекций, которые формируются в зоне расплава при бестигельной зонной плавке кремния, на распределение температуры и примеси. Установлено, что распределение примеси в зоне расплава соответствует распределению скорости движения расплава. Движение расплава изменяет толщину диффузионного слоя на фронте кристаллизации и эффективный коэффициент распределения примеси.

Введение. Одним из факторов, влияющих на качество выращиваемых монокристаллов кремния методом индукционной бестигельной зонной плавки (БЗП), являются конвективные потоки различной природы, развивающиеся в зоне расплава [1,2]. При выращивании монокристаллов в зоне расплава формируются течения, вызванные тепловой, центробежной, термокапиллярной и электродинамической конвекциями. В результате взаимодействия этих течений формируется основное течение, занимающее центральную часть объема зоны расплава. Основное влияние на формирование основного течения оказывают тепловая и центробежная конвекция, так как вызываемые ними течения непосредственно взаимодействуют с кристаллизующимся монокристаллом. Термокапиллярная и электродинамическая конвекции развиваются в поверхностных областях зоны расплава и вызываемые ими течения взаимодействуют с основным течением расплава [2, 3].

Вид потоков и их скорость движения зависят от технологических параметров (скорости перемещения зоны расплава вдоль стержня, скорости вращения монокристалла, температуры нагрева и т.д.). На практике управление конвективными потоками осуществляют путем контроля частоты вращения монокристалла. При высоких частотах вращения в зоне расплава преобладающим становится вызванное центробежной конвекцией течение, которое определяет доставку легирующих элементов и вредных примесей к фронту кристаллизации. Таким образом, качество выращиваемых монокристаллов напрямую зависит от частоты вращения монокристалла.

Постановка задачи. Целью настоящей работы является установление зависимости толщины диффузионного слоя и эффективного коэффициента распределения примесей на фронте кристаллизации от частоты вращения монокристалла в методе БЗП.

Выполнение исследований и обсуждение результатов. При проведении исследований изучали область зоны расплава, представленную на рис. 1. Для определения эпюры распределения скорости движения расплава и концентрации было рассмотрено уравнение Навье-Стокса в приближении Буссинеска совместно с уравнениями переноса тепла и массы:

– уравнение Навье-Стокса

$$\begin{aligned} -\eta \cdot \nabla^2 U + \rho \cdot (U \nabla) \cdot U + \nabla P = F; \\ \nabla U = 0 \end{aligned} \quad (1)$$

– уравнение теплопереноса

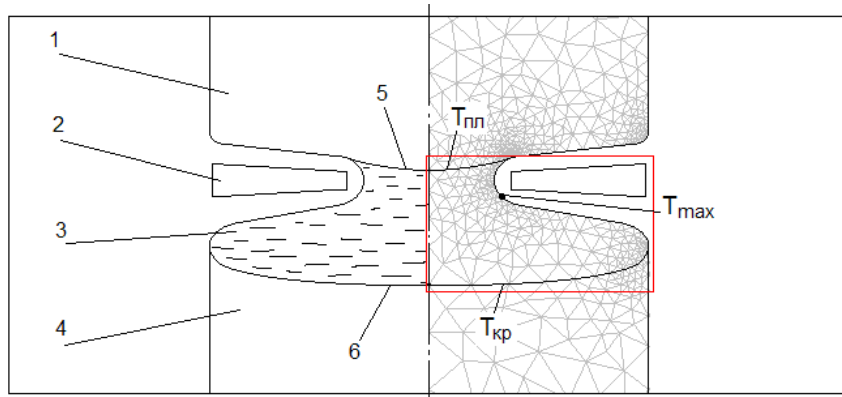
$$\nabla(-k \cdot \nabla T + \rho \cdot C_p \cdot T \cdot U) = Q_T \quad ; \quad (2)$$

– уравнение массопереноса

$$\nabla(-D \cdot \nabla C + C \cdot U) = Q_C, \quad (3)$$

где η – динамическая вязкость расплава; U – вектор скорости; ρ – плотность расплава; P – вектор давления; F – вектор внешних сил; T – температура; k – коэффициент теплопроводности; C_p – теплоемкость расплава; Q_T – источник теплоты; D – коэффициент диффузии; Q_C – источник вещества.

Для совместного решения уравнений (1)-(3) методом конечных элементов были заданы соответствующие граничные условия [2] и физические параметры расплава кремния [3]. В расчетах было принято, что максимальная температура ($T_{\max}$) находится на свободной поверхности в месте, максимально приближенном к плавному индуктору, на фронте плавления – $T_{\text{пл}}$, на фронте кристаллизации – $T_{\text{кр}}$.



1 - исходный поликристаллический кремний; 2 - плавильный индуктор; 3 - зона расплава;
4 - растущий монокристалл; 5 - фронт плавления; 6 - фронт кристаллизации

Рисунок 1 – Схема изучаемой области с нанесенной сеткой конечных элементов

Результаты расчета представлены на рис. 2, на котором показаны эпюры скорости движения расплава для различной частоты вращения монокристалла. Видно, что при отсутствии вращения монокристалла (рис. 2,а) в центральной области зоны расплава формируется основное течение, обусловленное действием тепловой конвекции, а в периферийной области развиваются течения, которые образуются в результате взаимодействия электродинамической, термокапиллярной и тепловой конвекций. При вращении монокристалла в расплаве развивается центробежная конвекция, которая изменяет распределение скорости движения расплава (рис. 2,б). Теперь в периферийной области формируется течение, определяемое центробежной конвекцией. Однако в процесс формирования периферийного течения свой вклад вносят электродинамическая, термокапиллярная и тепловая конвекции. Появление центробежной конвекции оказывает влияние и на центральное течение: происходит «растягивание» центрального течения от оси вращения к периферийной области (рис. 2 а,б) и увеличение геометрических размеров области, занятой центральным течением.

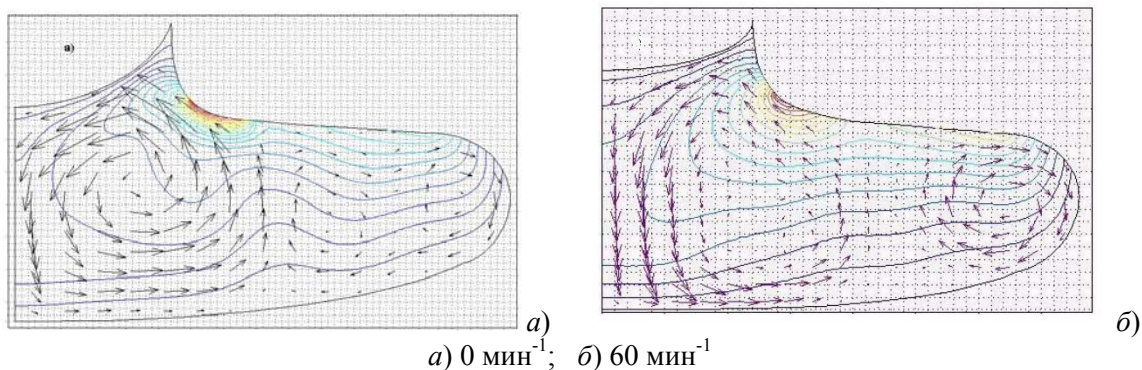


Рисунок 2 – Расчетные картины движения расплава (стрелки) при изменении частоты вращения монокристалла диаметром 76 мм:

Конвективные течения, развивающиеся в зоне расплава, оказывают влияние на распределение температуры в расплаве. Об этом свидетельствует изгиб изотерм в зоне расплава. Наибольший изгиб изотерм в зоне расплава наблюдается в случае развития течения, определяемого тепловой конвекцией (рис. 2,а), в местах встречи противоположно направленных течений. В реальных условиях такое изменение температуры вблизи фронта кристаллизации способствует изменению его формы.

С увеличением частоты вращения монокристалла наблюдается уменьшение изгиба изотерм, как в объеме зоны расплава, так и вблизи фронта кристаллизации (рис. 2,б). Это можно объяснить перемещением более теплых порций расплава из центральной области в периферийную под действием центробежной конвекции. Другими словами, движение расплава осуществляется не снизу вверх как в случае развития тепловой конвекции (рис. 2,а), а справа налево – в случае центробежной конвекции (рис. 2,б).

Конвективные течения, развивающиеся в зоне расплава, влияют на распределение не только температуры, но и примесей (рис. 3). Расчеты были выполнены для примеси с равновесным коэффициентом распределения $k_0 = 0,35$. В расчете принято, что максимальная концентрация примеси находится на фронте плавления ($C = C_{\max}$).

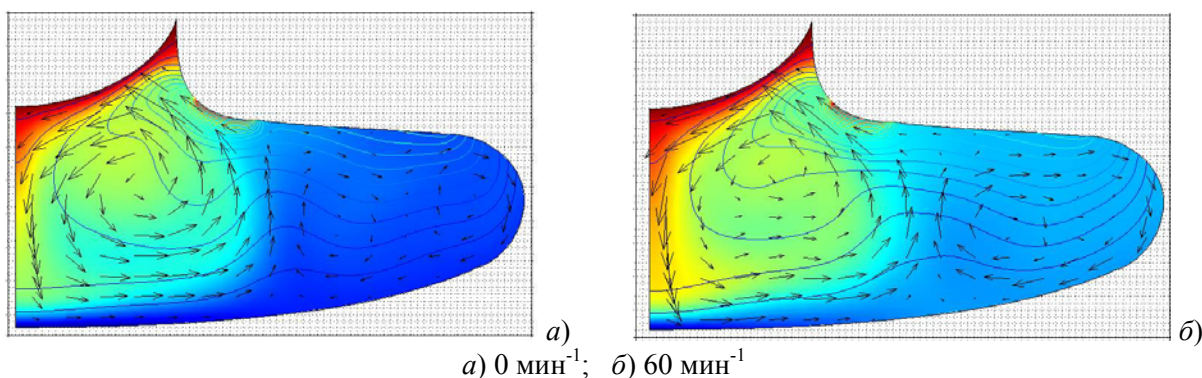


Рисунок 3 – Распределение примеси в расплаве для разных частот вращения монокристалла:

Отчетливо видно (рис. 3,а), что при отсутствии вращения монокристалла примесь, переходя в расплав на фронте плавления, в незначительных количествах проникает в периферийную область расплава, о чем свидетельствует темный цвет области, соответствующий минимальной концентрации примеси. В то время, при частоте вращения монокристалла равной 60 мин^{-1} цвет периферийной области светлеет, что свидетельствует о большей степени проникновения примеси в периферийную область

под действием центробежной конвекцией.

В обоих случаях максимальное проникновение примеси в расплав от фронта плавления наблюдается на оси симметрии. Этому способствует максимальная скорость тепловой конвекции при одновременном отсутствии центробежного течения. Распределение примеси в центральной области расплава соответствует распределению скорости движения расплава, то есть образующаяся конвективная ячейка способствует формированию концентрационной ячейки. Размеры концентрационной ячейки увеличиваются по мере проникновения примеси в периферийную область расплава.

Поскольку конвективное движение расплава влияет на распределение примеси как в его объеме, так и на фронте кристаллизации, то, следовательно, имеет место и его влияние на толщину диффузионного слоя. Известна формула, которая связывает толщину диффузионного слоя и частоту вращения кристалла [5]:

$$\delta = 1,6 \frac{D^{1/3} \cdot \nu^{1/6}}{\omega^{1/2}}, \quad (1)$$

где D – коэффициент диффузии примеси, $\text{м}^2/\text{с}$; ν – кинематическая вязкость, $\text{м}^2/\text{с}$; ω – частота вращения монокристалла, мин^{-1} .

Записывая частоту вращения монокристалла через азимутальную составляющую скорости и учитывая, что, кроме вращения, существует и радиальное движение расплава, можно получить следующую зависимость толщины диффузионного слоя от скорости движения расплава:

$$\delta = 1,6 \cdot D^{1/3} \cdot \nu^{1/6} \cdot \frac{R_{\text{кр}}^{1/2}}{(u^2 + w^2)^{1/4}}, \quad (2)$$

где u – радиальная составляющая скорости, $\text{м}/\text{с}$; w – азимутальная составляющая скорости, $\text{м}/\text{с}$, $w = \omega \cdot R_{\text{кр}}$; $R_{\text{кр}}$ – радиус кристалла, м .

Подставляя в уравнение (2) рассчитанные ранее значения скорости движения расплава вблизи фронта кристаллизации, находят зависимости толщины диффузионного слоя на фронте кристаллизации от изменения частоты вращения монокристалла (рис. 4,а).

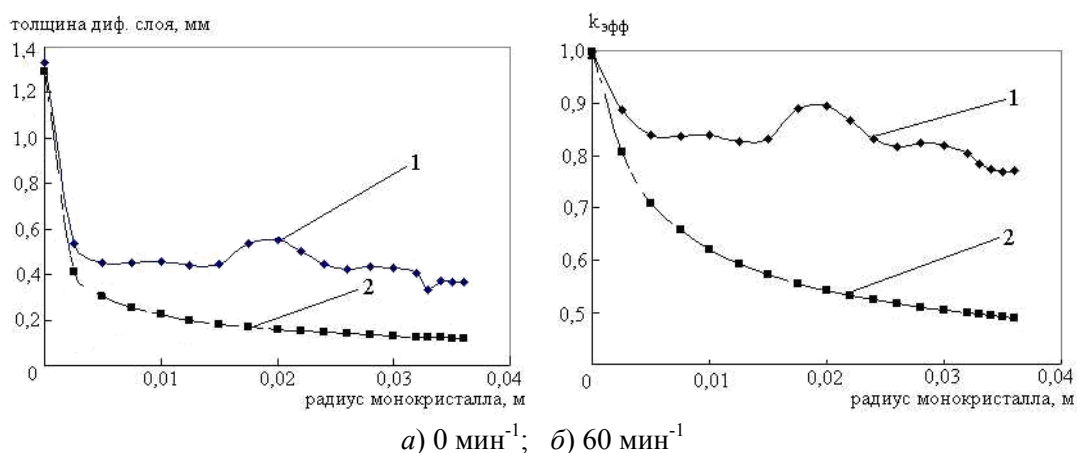


Рисунок 4 – Распределение толщины диффузионного слоя и эффективного коэффициента распределения примеси вдоль фронта кристаллизации в зависимости от частоты вращения монокристалла:

В отсутствие вращения монокристалла или незначительной частоте его вращения ($\leq 10 \dots 15 \text{ мин}^{-1}$), когда тепловая конвекция преобладает над центробежной, наблюдается колебание толщины диффузионного слоя вдоль фронта кристаллизации из-за наличия в расплаве конвективных течений. В том месте, где встречаются конвективные течения различной природы, радиальная составляющая скорости резко уменьшается и образуется застойная зона, в которой возрастает толщина диффузионного слоя (рис. 4,а). Колебания толщины диффузионного слоя в свою очередь вызывают колебания эффективного коэффициента распределения (рис. 4,б) и, следовательно, неравномерное радиальное распределение примеси в выращиваемых монокристаллах.

Выводы. Конвективные течения, которые формируются в зоне расплава, оказывают значительное воздействие на качество монокристаллов, выращиваемых по методу БЗП. Для управления этими потоками и, следовательно, качеством монокристаллов на практике, как правило, увеличивают частоту вращения монокристалла. Однако при дальнейшем увеличении диаметра выращиваемых монокристаллов частоту их вращения необходимо снижать для предотвращения пролива зоны в результате действия центробежных сил. Уменьшение роли центробежных сил при одновременном росте тепловой конвекции из-за увеличения объема расплава приведет к образованию нескольких конвективных ячеек в расплаве, что отрицательно сказывается на возможности предсказания и управления свойствами выращиваемых монокристаллов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Мюллер Г. Выращивание кристаллов из расплава. Конвекция и неоднородности / Г Мюллер; [пер. с англ. Ан. В. Бунэ]. – М.: Мир, 1991. – 143 с.
2. Математическое моделирование конвективного теплообмена на основе уравнений Навье – Стокса / В. И. Полежаев, А. В. Бунэ, Н. А. Вerezуб [и др.]. – М.: Наука, 1987. – 272 с.
3. Muehlbauer A. G. System of mathematical models for the analysis of industrial FZ-Si-crystal growth processes / A. Muehlbauer, A. Muznieks, G. Raming // Cryst. Res. Technol. – 1999. – v. 34. – P.217-226.
4. Muehlbauer A. Electrodynamic convection in silicon floating zones / A. Muehlbauer, W. Erdmann // J. Cryst. Growth. – 1983. – V. 64. – P. 529-545.
5. Технология полупроводникового кремния / Э. С. Фалькевич, Э. О. Пульнер, И. Ф. Червоний [и др.]. – М.: Металлургия, 1992. – 408 с.

Стаття надійшла до редакції 30.12.2009 р.
Рецензент, проф. І.Ф. Червоний