

УДК 532.78

Г. Н. Кувыркин, А. В. Ломохова

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ В УСТАНОВКАХ ДЛЯ ВЫРАЩИВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ

Применительно к методу осевого теплового потока вблизи фронта кристаллизации (ОТФ-метод) методами математического моделирования проведены исследования влияния материала тигля на технологические параметры процесса кристаллизации (форма фронта кристаллизации, скорость роста кристалла, градиент температуры в системе кристалл–расплав), а также влияние конвекции в газе на распределение температуры в ОТФ-установке. Показано, что выбор материала тигля, а также учет конвекции в газе оказывают существенное влияние на распределение температуры в области кристаллизации, и, следовательно, на параметры монокристалла.

Монокристаллы находят широкое применение при создании современных электронных приборов в микроэлектронике, оптике, спектрометрии, а также для детального изучения ряда физических, механических и других свойств различных веществ в твердом состоянии.

Для получения монокристаллов высокого качества необходимо создать и поддерживать постоянными в процессе роста кристалла технологические параметры, влияющие на формирование микро- и макро-неоднородностей в растущем кристалле. К таким параметрам относятся форма фронта кристаллизации, скорость роста кристалла, градиент температуры в системе кристалл–расплав, скорость движения расплава и концентрация примеси вблизи фронта кристаллизации.

Для каждого материала известны оптимальные технологические параметры, основанные на анализе результатов экспериментальных и теоретических исследований. Эта информация является исходной при разработке установки для выращивания монокристаллов конкретного вещества.

Выращивание монокристаллов ведется в специализированных установках, которые должны обеспечивать определенные режимы роста, отвечающие оптимальным технологическим параметрам. При проектировании установки уделяют особое внимание выбору материала элементов установки (в частности, материала тигля), а также

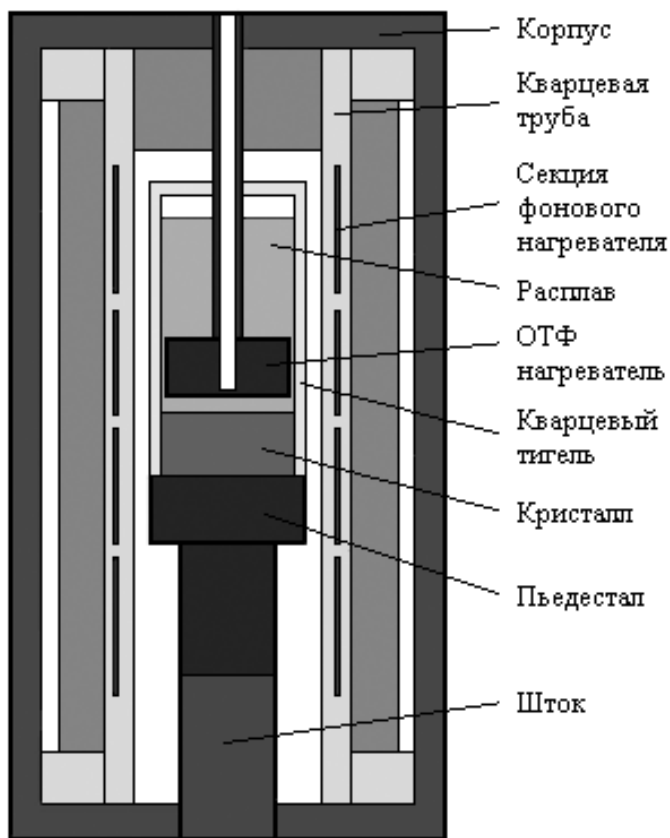


Рис. 1. Схема ОТФ-установки

конструкции печи. Для поддержания режимов роста в установках используют управление мощностью нагревателей. Оптимальный алгоритм управления находят с помощью математического моделирования процессов тепло- и массопереноса в технологических установках.

Одним из перспективных методов получения высококачественных монокристаллов большого размера является ОТФ-метод выращивания монокристаллов (рис. 1). Он разработан для точного управления процессами тепло- и массопереноса вблизи фазовой границы в процессе роста объемных кристаллов [1–2]. Идея метода заключается в том, чтобы создать осевой тепловой поток вблизи фронта кристаллизации. Этот поток формируется за счет дополнительного нагревателя, размещенного в расплаве на небольшом расстоянии от фронта кристаллизации. Малая толщина слоя расплава между нагревателем и фронтом кристаллизации обеспечивает подавление естественной конвекции.

Во всех ОТФ-установках для выращивания монокристаллов имеются области (зазоры), наличие которых обусловлено конструктивно-технологическими требованиями при проектировании установок; зазоры заполнены сжатым газом (например, аргоном) для передачи те-

плоты от нагревателей в зону кристаллизации. Передача теплоты через газ позволяет получать равномерное распределение температуры на стенке тигля, поэтому теплообмен в этой части установки обуславливает характер распределения температуры во всей установке. В ОТФ-методе для поддержания технологических параметров роста монокристаллов доступно только управление мощностью нагревателей, причем число термопар на стенке тигля, как правило, ограничено. Управлять мощностью нагревателей и предсказывать фронт кристаллизации по показаниям конечного числа термопар затруднительно. Поэтому важно знать распределение температуры в установке в зависимости от изменения мощности нагревателей. Эта задача может быть решена методом математического моделирования, позволяющим разработать алгоритмы управления параметрами роста кристалла.

В настоящей статье показано, что распределение температуры в установке, полученное методом математическим моделированием без учета конвекции в газе, является неадекватным реальному распределению температуры в установке, так как не принят во внимание один из основных механизмов передачи теплоты в газе.

Постановка задачи. Рассмотрим процесс теплообмена в осесимметричной области (рис. 2), состоящей из нескольких зон с различными теплофизическими свойствами.

В зоне 1 происходит процесс кристаллизации, для его моделирования используется обобщенная формулировка задачи Стефана, которая

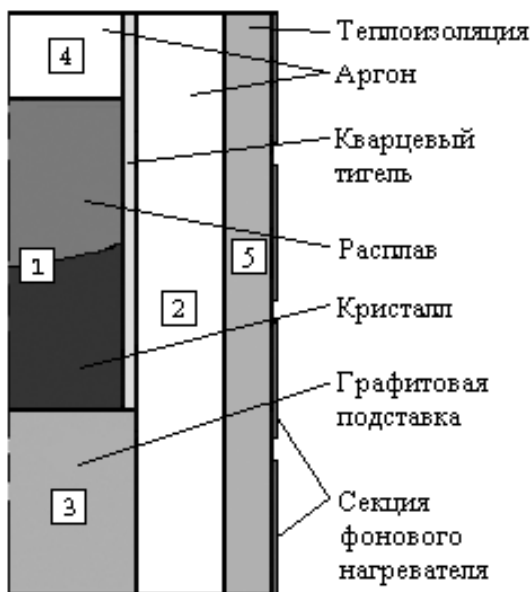


Рис. 2. Расчетная схема ОТФ-установки

б) на боковой границе $\partial \Sigma_2$ задано распределение плотности теплового потока q_1 ;

в) на нижней границе $\partial \Sigma_3$ задана температура T_2 .

Начальное условие имеет вид $T(\Sigma) = T_0 = \text{const}$, где Σ — расчетная область.

Дополнительно для задачи свободной конвекции в зоне 2 ставится условие прилипания по всей границе этой зоны $\mathbf{u}(\partial\Omega) = 0$ и начальное условие $\mathbf{u}(\Omega) = 0$ (где $\partial\Omega$ — граница зоны 2, Ω — зона 2).

Численное решение задачи. Для численного решения задачи использован метод контрольных объемов (МКО) [8], также известный как интегро-интерполяционный метод [9]. Для этого расчетная область разбивается на непересекающиеся контрольные объемы таким образом, чтобы каждая узловая точка содержалась в одном контрольном объеме. Дифференциальные уравнения интегрируются по каждому контрольному объему; для вычисления интегралов используются кусочные профили, которые описывают изменение искомой функции между узловыми точками. В результате получаем дискретный аналог дифференциального уравнения.

Дискретные уравнения, полученные методом контрольных объемов, представляют собой законы сохранения энергии и количества движения для каждого контрольного объема. Из этого следует, что полученное численное решение удовлетворяет законам сохранения этих величин во всей расчетной области.

Для нахождения поля скоростей в зоне 2 использован алгоритм SIMPLE [8].

Исследование влияния конструкции установки на режимы роста монокристаллов. Моделирование процесса кристаллизации в установке проведено при одинаковых начальных и граничных условиях и разных значениях свойств материала стенки тигля.

На рис. 3, а приведено распределение температуры в установке и положение фронта кристаллизации через n секунд для материала тигля с физическими свойствами графита: $\rho = 1750 \text{ кг/м}^3$; $\lambda = 50 \text{ Вт/(м}\cdot\text{К)}$; $= 2200 \text{ Дж/(кг}\cdot\text{К)}$.

На рис. 3, б приведено распределение температуры в установке и положение фронта кристаллизации через n секунд для материала стенки тигля с физическими свойствами кварца: $\rho = 2600 \text{ кг/м}^3$; $\lambda = 1,5 \text{ Вт/(м}\cdot\text{К)}$, $= 800 \text{ Дж/(кг}\cdot\text{К)}$.

Из результатов моделирования следует, что свойства материала тигля оказывают существенное влияние на распределение температуры в области кристаллизации (рис. 4) и, следовательно, на качество монокристалла.

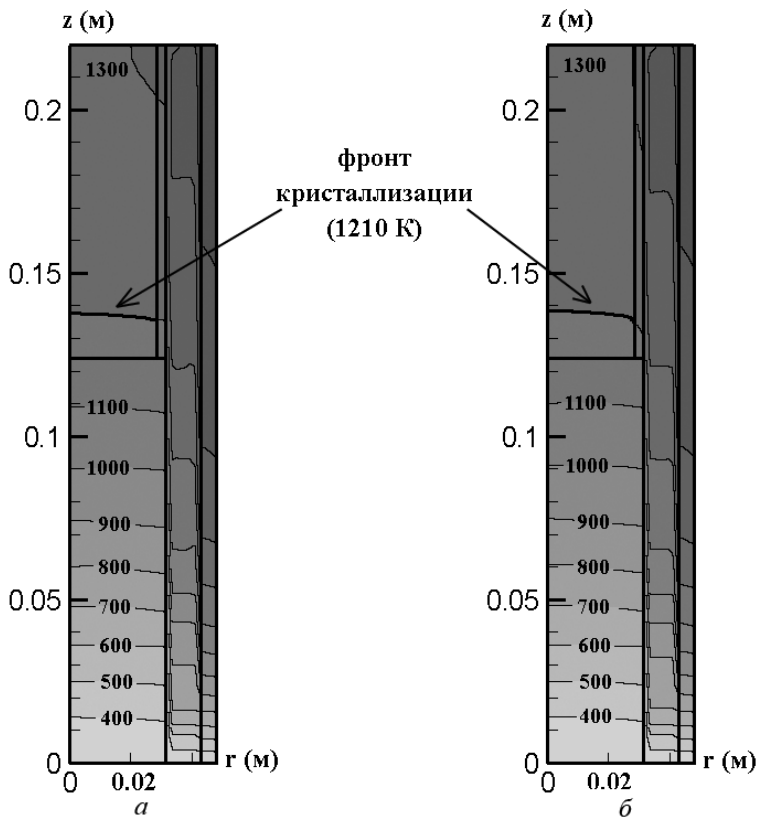


Рис. 3. Распределение температуры в установке для графитового (а) и кварцевого (б) тиглей

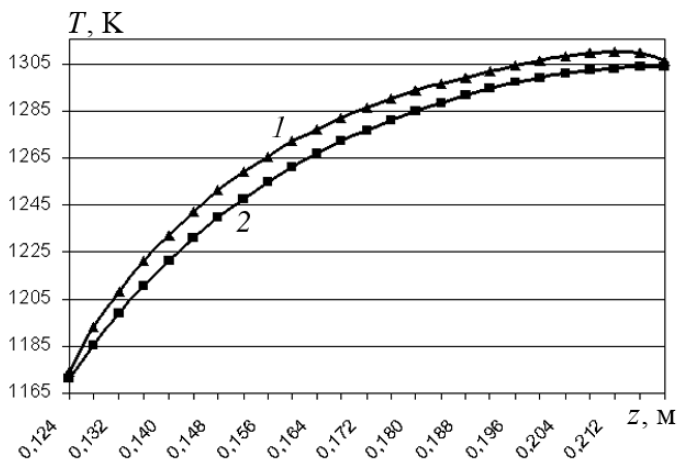


Рис. 4. Распределение температуры на стенке кварцевого (1) и графитового (2) тиглей

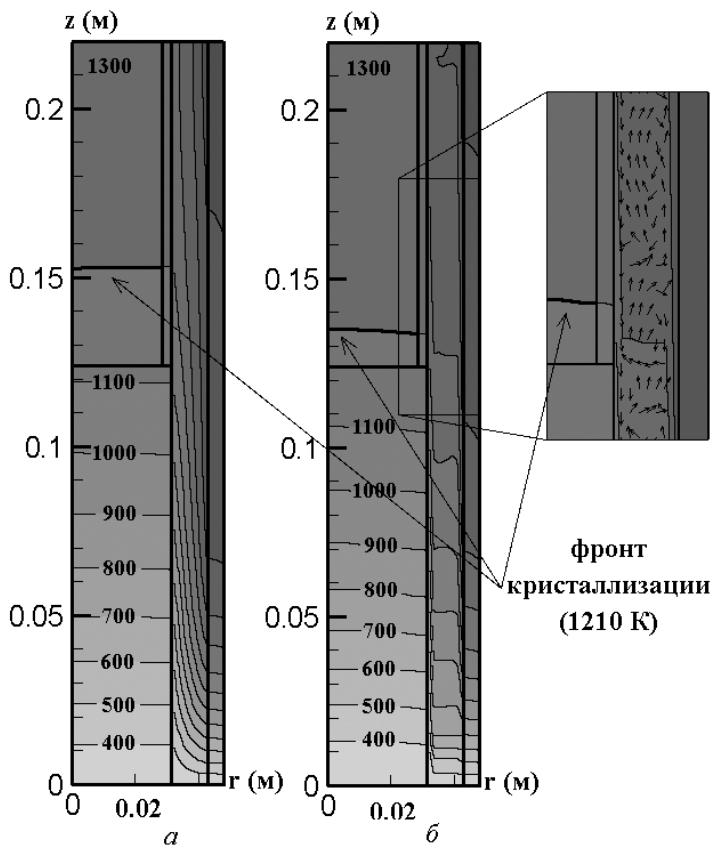


Рис. 5. Распределение температуры в установке без учета конвекции (а) и с учетом конвекции (б)

Исследование влияния конвекции в газе на распределение температуры в установках для выращивания монокристаллов проведено при моделировании процесса кристаллизации с учетом конвекции в газе и без него (при одинаковых начальных и граничных условиях). Результаты представлены на рис. 5 и 6, из которых следует, что конвекция в газе принципиально изменяет распределение температур во всей установке. На основании этого можно сделать вывод, что для адекватного расчета температурных полей в подобных установках необходимо учитывать конвекцию в газе.

Вывод. Рассмотрена математическая модель теплообмена с учетом конвекции в газе в ОТФ-установке. Результаты исследования показали, что при проектировании таких установок необходимо тщательно подходить к выбору материалов основных элементов конструкции, поскольку их теплофизические свойства оказывают существенное влияние на распределение температуры, и при этом учитывать конвекцию

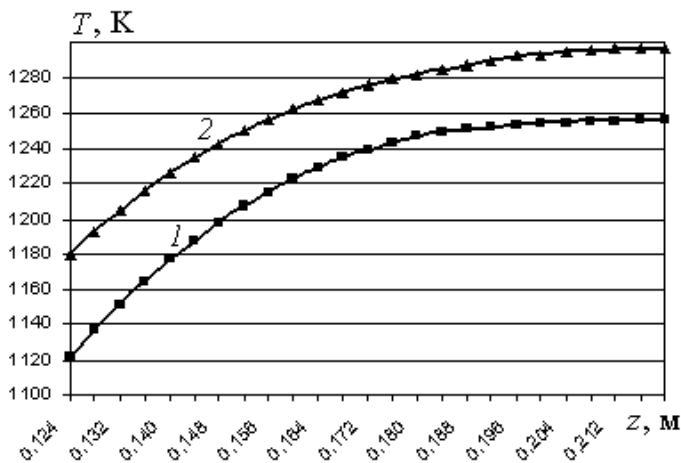


Рис. 6. Распределение температуры на стенке тигля без учета конвекции (1) и с учетом конвекции (2)

в газе, так как она является одним из основных механизмов передачи теплоты.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Golyshhev V. D., Gonik M. A. A temperature field investigation in case of crystal growth from the melt with a plane interface under exactly determined thermal conditions // Cryst. Prop. Preparation. Trans. Tech. Publications. – Switzerland. – 1990. – V. 36–38. – P. 623–630.
2. Golyshhev V. D., Gonik M. A., Tsvetovskiy V. B. Experimental research of longitudinal segregation in growth by the AHP method of crystals doped with impurities with small value of the distribution coefficient // Proc. Joint Xth European and Vth Russian Symposium on Physical Sciences in Microgravity. – 1997. – V. II. – P. 158–161.
3. Голышев В. Д., Гоник М. А., Цветовский В. Б. Исследование теплопереноса вблизи фронта кристаллизации при выращивании кристаллов из расплава методом осевого теплового потока // Труды ВНИИСИМС. – 1997. – Т. XIV. – С. 292–305.
4. Голышев В. Д., Гоник М. А., Марченко М. П. и др. Характер тепловых условий при росте Ge методом ОТФ // Труды IV Международной конференции “Кристаллы: рост, свойства, реальная структура, применение”. – 18–22 октября 1999 г. – Александров, ВНИИСИМС. – Т. 1. – С. 218–233.
5. Алимов О. М., Аношин К. Е., Быкова С. В. и др. Особенности образования дислокационной структуры кристаллов Ge, выращенных ОТФ методом // Труды IV Международной конференции “Кристаллы: рост, свойства, реальная структура, применение”. – 18–22 октября 1999 г. – Александров, ВНИИСИМС. – Т. 1. – С. 391–407.
6. Самарский А. А., Вабищевич П. Н. Вычислительная теплопередача. – М.: Едиториал УРСС, 2003. – 784 с.
7. Берковский Б. М., Полевиков В. К. Вычислительный эксперимент в конвекции. – Минск: Университетское, 1988. – 167 с.
8. Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости: Пер. с англ. – М.: Энергоатомиздат, 1984. – 152 с.
9. Самарский А. А. Введение в численные методы. – М.: Наука, 1987. – 272 с.

Статья поступила в редакцию 25.12.2006