

勾形磁场下直径 300mm CZ Si 熔体中 氧浓度分布的数值模拟*

宇慧平¹ 隋允康¹ 张峰翊² 常新安³

(1 北京工业大学机电学院, 北京 100022)

(2 北京有色金属研究总院, 北京 100088)

(3 北京工业大学材料学院, 北京 100022)

摘要: 采用低雷诺数 K - ϵ 紊流模型, 考虑自然对流、晶体旋转和坩埚旋转等因素, 对晶体直径为 300mm, 磁场强度变化范围在 0~0.12T 条件下, 熔体硅内流场及氧的浓度分布、磁场分布等作了数值模拟. 计算中采用有限体积法, 运用 SIMPL E(semi-implicit method for pressure linked equations) 算法耦合压力和速度场, 动量方程、能量方程中对流项的离散采用 QUICK(quadratic upwind interpolation of convective kinematics) 格式, 紊动能和耗散项方程中对流项的离散采用迎风格式. 数值模拟结果表明, 在勾形磁场作用下, 熔体硅内的流场、氧的浓度分布与无磁场作用相比有较大不同, 随着磁场强度的增加, 生长界面处氧的浓度降低, 并且磁场确实能有效地抑制熔体内的紊流, 有利于晶体生长.

关键词: 单晶硅; 勾形磁场; 氧浓度; 紊流模型

PACC: 6150C

中图分类号: O78

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2005)03-0517-07

1 引言

提拉(CZ)法是工业生产单晶硅的重要方法, 随着晶体直径的增大, 坩埚直径相应增大, 加热功率也随之升高. 大石英坩埚要比小石英坩埚承受更高的温度, 熔体内的热对流加剧, 石英坩埚和熔体硅的反应加剧, 产生更多的 SiO. 而氧的浓度是决定硅片质量的重要因素之一, 在晶体生长中, 过多的氧会引起位错环、氧沉淀等热诱生缺陷. 为了控制大直径晶体中的氧, 深入研究熔体硅中氧的运输机制是非常必要的.

晶体中氧的浓度及均匀性与熔体的流动状态密切相关. 施加磁场是减少大直径单晶硅生长中熔体内强烈对流的有效方法. 近十几年, 许多学者对熔体硅在垂直磁场^[1,2]、横向磁场^[3]及勾形磁场^[4,5]作用下, 熔体内的流动及氧的运输进行了研究, 但这些研究或是从实验的角度出发, 或是采用层流模型进行数值模拟. 如文献[2]中采用层流模型, 从全局的角度出发, 对提拉系统处于垂直磁场的情况下, 氧的浓度分布进行了模拟. Ivanov 等人^[6]分析了三维熔体硅在磁场作用下的流动. 而 Kobayashi^[7]及 Zhang

等人^[8]发现, 当葛拉晓夫数 Gr 大于 10^8 (大约 75mm 单晶硅的生长), 采用层流模型进行数值模拟时, 除非采用很大的粘性系数, 否则不能得到收敛解.

采用紊流模型对大直径单晶硅生长进行数值模拟, 近几年也只有美国、德国、日本等少数发达国家的学者从事这方面的研究. Kobayashi^[7]采用标准的 K - ϵ 模型计算提拉原型中硅熔体的对流; Zhang 等人^[9]比较了由浮升力、热毛细力驱动形成紊流的四种模型, 给出了所有模型的速度、温度分布图, 并且在后两种模型中考虑了各向异性和非线性的雷诺张量, 遗憾的是他们没有考虑坩埚及晶体旋转和磁场的作用, 而这些因素对熔体的流动影响非常重大. Kinney 等人^[10]采用低雷诺数的 K - ϵ 模型, 对直拉晶体生长中的紊流情况作了模拟, 结果令人满意. Lipchin 等人^[11]比较了三种紊流模型, 推荐采用低雷诺数 K - ϵ 模型, 但同样没有考虑磁场的作用. 国内对于大直径单晶硅及其在勾形磁场作用下的研究主要侧重于技术研究^[12], 数值模拟少见报道. 本文基于雷诺平均的 Navier-Stokes 方程, 采用低雷诺数 K - ϵ 紊流模型, 对直径为 300mm 单晶硅在无磁场及有磁场时, 哈特曼数分别为 0, 500, 1000 和 2000 等

*北京工业大学青年科技基金资助项目(批准号:JQ0105200372)

宇慧平 女, 1973 年出生, 讲师, 从事计算流体力学研究.

2004-03-02 收到, 2004-08-12 定稿

四种情况下熔体内的流场、磁场及氧的浓度分布等进行了数值分析,并进行了理论探讨.

2 数值模型

在勾形磁场下单晶硅生长的简化模型如图 1 所示,图中熔体高度为 H ,坩埚半径为 R_c ,转速为 ω_c ,晶体半径为 R_s ,转速为 ω_s ,产生勾形磁场的螺旋线圈简化为上下两线圈,并以自由表面为对称面, H_c 为线圈到熔体表面的距离, R_{cl} 为线圈的半径,虚线为磁力线. 模拟中假定:熔体为二维不可压缩的轴对称牛顿流体;熔体与坩埚和相变面的流动满足无滑移边界条件;浮升力满足 Boussinesq 假设;除密度外熔体的其他热物性与温度无关;自由表面为灰体辐射,满足 Stefan-Boltzmann 方程;自由表面为一平面,因坩埚直径较大,忽略 Maragoni 影响;晶体向上提升的速度十分小,忽略不计;晶体与熔体的相变面为一平面;由磁场引入的感应磁场忽略不计.

2.1 紊流模型的无量纲方程

无量纲质量连续性方程、动量方程、能量方程、紊动能 K^* 方程、耗散率 ϵ^* 方程和氧运输方程统一写成 (1) 式的形式.

$$\frac{\partial \phi^*}{\partial t^*} + \frac{\partial}{\partial x^*} (u^* \phi^*) + \frac{1}{r^*} \times \frac{\partial}{\partial r^*} (r^* v^* \phi^*) = \frac{\partial}{\partial x^*} \left(\mu^* \frac{\partial \phi^*}{\partial x^*} \right) + \frac{1}{r^*} \times \frac{\partial}{\partial r^*} \left(r^* \mu^* \frac{\partial \phi^*}{\partial r^*} \right) + s^* \quad (1)$$

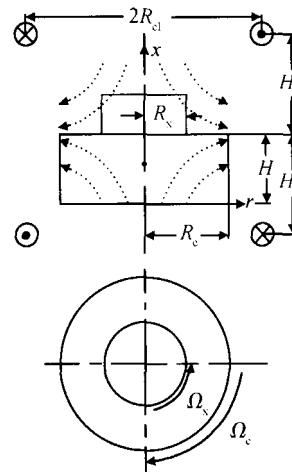


图 1 硅熔体在勾形磁场下的结构

Fig. 1 Sketch of silicon melt under a cusp magnetic field

上标“*”表示无量纲变量,其中 ϕ^* 为通用变量; μ^* 为通用扩散系数; s^* 为通用源项,具体含义见表 1. 表 1 中, $\mu_t^* = \alpha_\mu f_\mu K^{*2} / \epsilon^*$, $\mu_{eff}^* = 1 + \mu_t^*$, $\alpha_\mu = 0.09$, $c_1 = 1.44$, $c_2 = 1.92$, $\kappa = 1.0$, $\tau = 1.3$, $\tau = 0.9$, $f_1 = 1$, $f_\mu = \exp(-2.5 / (1 + Re_t^{*2} / 50))$, $f_2 = 1.0 - 0.3 \exp(-Re_t^{*2})$, $Re_t^* = K^{*2} / \epsilon^*$, $G_k^* = \mu^* \left\{ 2 \left[\left(\frac{\partial u^*}{\partial x^*} \right)^2 + \left(\frac{\partial v^*}{\partial r^*} \right)^2 + \left(\frac{v^*}{r^*} \right)^2 \right] + \left(\frac{\partial u^*}{\partial r^*} + \frac{\partial v^*}{\partial x^*} \right)^2 + \left(\frac{\partial w^*}{\partial x^*} \right)^2 + \left(\frac{\partial w^*}{\partial r^*} - \frac{w^*}{r^*} \right)^2 \right\}$.

表 1 紊流模型下轴对称坐标中的无量纲扩散系数及源项

Table 1 Dimensionless diffusion coefficients and source terms in a cylindrical coordinate with a turbulence model

| Equation | ϕ^* | μ^* | s^* |
|---------------------------|--------------|-------------------------------------|---|
| Continuity Equation | 1 | 0 | 0 |
| Momentum equations | u^* | μ_{eff}^* | $-\frac{\partial p^*}{\partial x^*} + \frac{\partial}{\partial x^*} \left(\mu_{eff}^* \frac{\partial u^*}{\partial x^*} \right) + \frac{1}{r^*} \times \frac{\partial}{\partial r^*} \left(r^* \mu_{eff}^* \frac{\partial v^*}{\partial r^*} \right) + Gr T^* - Ha^2 j^* b_r^*$ |
| | v^* | μ_{eff}^* | $-\frac{\partial p^*}{\partial r^*} + \frac{\partial}{\partial x^*} \left(\mu_{eff}^* \frac{\partial u^*}{\partial r^*} \right) + \frac{1}{r^*} \times \frac{\partial}{\partial r^*} \left(r^* \mu_{eff}^* \frac{\partial v^*}{\partial r^*} \right) - \frac{2\mu_{eff}^* v^*}{r^{*2}} + \frac{w^{*2}}{r^*} + Ha^2 j^* b_x^*$ |
| | w^* | μ_{eff}^* | $-\frac{1}{r^*} \times \frac{\partial}{\partial r^*} (\mu_{eff}^* w^*) + \mu_{eff}^* \frac{\partial}{\partial r^*} (w^* / r^*) - \frac{v^* w^*}{r^*} + Ha^2 (j_x^* b_r^* - j_r^* b_x^*)$ |
| Energy equation | T^* | $\frac{1}{Pr} + \frac{\mu^*}{\tau}$ | 0 |
| Kinetic energy equation | K^* | $1 + \frac{\mu^*}{\kappa}$ | $G_k^* - \epsilon^* - 2 \left[\left(\frac{\partial K^{*1/2}}{\partial x^*} \right)^2 + \left(\frac{\partial K^{*1/2}}{\partial r^*} \right)^2 \right] - \frac{\partial T^*}{\partial x^*} \times \frac{\mu^*}{\tau}$ |
| Dissipation rate equation | ϵ^* | $1 + \frac{\mu^*}{\tau}$ | $c_1 f_1 \frac{\epsilon^*}{K^*} G_k^* - c_2 f_2 \frac{\epsilon^{*2}}{K^*} + 2\mu_t^* \left[\left(\frac{\partial^2 u^*}{\partial r^* \partial x^*} \right)^2 + \left(\frac{\partial^2 v^*}{\partial x^{*2}} \right)^2 \right]$ |
| Oxygen transport equation | C_{ox}^* | $\frac{1}{SC} + \frac{\mu^*}{\tau}$ | 0 |

电流连续性方程：

$$\frac{\partial}{\partial x^*}(j_x^*) + \frac{1}{r^*} \times \frac{\partial}{\partial r^*}(r^* j_r^*) = 0 \quad (2)$$

欧姆定理：

$$j^* = (j_x^*, j_r^*, j_z^*)^T \\ = (-\frac{\partial \phi^*}{\partial x^*} - w^* b_r^*, -\frac{\partial \phi^*}{\partial r^*} + w^* b_x^*, u^* b_r^* - v^* b_x^*)^T \quad (3)$$

(1) ~ (3) 式中,无量纲化公式为: $(x, r) = R_c(x^*, r^*)$, $(u, v, w) = (u^*, v^*, w^*)\mu/R_c$, $t = R_c^2 t^*/\mu$, $p = \mu^2 p^*/R_c^2$, $\mu_t = \mu_t^* \mu$, $K = \mu^2 K^*/R_c^2$, $\epsilon = \mu^3 \epsilon^*/R_c^4$, $T = T_m + T^* \times (T_c - T_m)$, $j = b_0 j^*/R_c$, $\phi = \mu b_0 \phi^*$, $b = b_0 b^*$, $C_{Ox} = \alpha_0 C_{Ox}^*$, $\alpha_0 = 3.99 \times 10^{23} \exp(-2.0 \times 10^4/T_m) \text{cm}^{-3}$, $Gr = \frac{g(T_c - T_m)R_c^3}{\mu^2}$, $Pr = \frac{\mu C_p}{k}$, $Sc = \frac{\mu}{D}$, $Ha = \sqrt{\mu b_0} R_c$. 其中, ρ 为熔体密度; μ 为动力粘性系数; μ_t 为运动粘性系数; k 为热扩散率; β 为热膨胀系数; g 为重力加速度; T_m 为结晶温度; T_c 为坩埚壁的温度; D 为氧分子扩散系数; σ 为熔体导电率; u^*, v^*, w^* 分别为无量纲轴向速度、径向速度和切向速度; $T^*, t^*, p^*, K^*, \epsilon^*, \mu_t^*, b^*, j^*, \phi^*, C_{Ox}^*$ 分别为无量纲温度、时间、压力、紊动能、耗散率、紊流粘性系数、磁场强度、电流、电势和氧浓度; b_0 为特征磁场强度,其值为坩埚底部中心磁场强度的垂直分量; Gr 为葛拉晓夫数, Pr 为普朗特数, Sc 为施密特数, Ha 为哈特曼数.

2.2 无量纲边界条件

(1) 无量纲速度边界条件

自由表面: $u^* = \partial v^*/\partial x^* = \partial w^*/\partial x^* = 0$, 晶体生长界面: $u^* = v^* = 0, w^* = r^* Re_x$, 中心线处: $\partial u^*/\partial r^* = v^* = w^* = 0$, 坩埚底部: $u^* = v^* = 0, w^* = r^* Re_c$, 坩埚侧壁: $u^* = v^* = 0, w^* = Re_c$. 其中, $Re_x = R_c^2 \omega / \mu$, $Re_c = R_c^2 \omega_c / \mu$.

(2) 无量纲温度边界条件

在自由表面,满足 Stefan-Boltzmann 方程,为 $\frac{\partial T^*}{\partial x^*} = -\frac{1}{1/Pr + \mu_t^*/\tau} [(\frac{T_m + T^*(T_c - T_m)}{T_c - T_m})^4 - (\frac{T_a}{T_c - T_m})^4]$, 其中, $\tau = Re_x h / (T_c - T_m)^3 / C_p$; ϵ_s 为表面发射率; h 为斯蒂芬-波尔兹曼数; C_p 为比热; T_a 为环境温度,计算中取为结晶温度. 晶体生长界面 $T^* = 0$, 中心线处 $\partial T^*/\partial r^* = 0$, 坩埚底部温度 T_b 呈线性分布满足 $(T_c(1 + r/R_c) + T_m(1 -$

$r/R_c))/2$, 化为无量纲形式为: $T_b^* = 0.5 + 0.5r^*$, 坩埚侧壁满足 $T_c^* = 1.0$.

(3) 无量纲紊动能和耗散率边界条件

自由表面: $\partial K^*/\partial x^* = \partial \epsilon^*/\partial x^* = 0$, 晶体生长界面: $K^* = \epsilon^* = 0$, 中心线处: $\partial K^*/\partial r^* = \partial \epsilon^*/\partial r^* = 0$, 坩埚底部: $K^* = \epsilon^* = 0$, 坩埚侧壁: $K^* = \epsilon^* = 0$.

(4) 无量纲氧的浓度边界条件

在自由表面,绝大部分的氧以气体的形式挥发出去,其浓度为熔体内部的万分之,因此假设在自由表面氧的浓度为 0^[5,11], $C_{Ox}^* = 0$, 晶体生长界面: $\partial C_{Ox}^*/\partial x^* = 0$, 中心线处: $\partial C_{Ox}^*/\partial r^* = 0$, 坩埚底部: $C_{Ox}^* = \exp(2.0 \times 10^4(1/T_m - 1/T_b))$, 坩埚侧壁: $C_{Ox}^* = \exp(2.0 \times 10^4(1/T_m - 1/T_c))$.

在数值方法上,本研究采用非均匀交错网格的有限体积法、SIMPLE 算法,对动量方程、能量方程中的对流项采用 QUICK 格式. 关于这一数值方法可参见文献[13],对紊动能和耗散项方程中的对流项采用一阶迎风格式,匀形磁场的计算参见文献[14].

3 计算结果与分析

数值模拟中,熔硅的高度 $H = 0.18 \text{m}$,坩埚半径 $R_c = 0.3 \text{m}$,晶体半径 $R_x = 0.15 \text{m}$,坩埚转速 $\omega_c = -5 \text{r/min}$,晶体转速 $\omega_x = 12.3 \text{r/min}$,熔硅的物理属性及无量纲参数分别为: $\rho = 2.6 \times 10^{-5} \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, $\mu = 1.4 \times 10^{-4} \text{K}^{-1}$, $C_p = 1000 \text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$, $\beta = 2.4 \times 10^3 \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$, $\mu_t = 7 \times 10^{-4} \text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$, $\epsilon = 2.9 \times 10^{-7} \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, $T_m = 1683 \text{K}$, $T_c = 1751 \text{K}$, $k = 64 \text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$, $D = 5 \times 10^{-8} \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, 导磁率 $\mu = 4 \times 10^{-7} \text{H} \cdot \text{m}^{-1}$, 导电率 $\sigma = 1.29 \times 10^6 \text{A} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{V}^{-1}$, $\alpha_0 = 0.05$, $Gr = 3 \times 10^{10}$, $Sc = 5.8$, $Re_x = 4.0 \times 10^5$, $Re_c = -1.6 \times 10^5$, $Ha = 0$ (无磁场时)和 $Ha = 500, 1000, 2000$ (有匀形磁场时),相应的磁场强度分别约为 $H_x = 0.032, 0.065, 0.130 \text{T}$, $H_r = 0.03, 0.06, 0.12 \text{T}$,有磁场时线圈的半径为坩埚半径的 2 倍,线圈到生长界面的距离为熔体高度的 1 倍. 无磁场作用时的流函数见图 2(a),在图 2(a)的左侧有一自然对流形成的逆时针涡,在图 2(a)晶体/熔体交界面的下方有一逆时针涡,这是由坩埚旋转产生的离心力作用的结果,其流向与自然对流方向一致,并且将自然对流抑制在靠近坩埚侧壁. 在两涡之间还

存在一个它们共同作用引起的方向相反的涡,而晶体旋转产生的顺时针涡流仅占据生长界面下轴心处区域,流动强度相对于坩埚旋转引起的涡而言要小得多.从图 2 (b) ~ (d) 可看出,随着磁场强度的增大,流线的结构变化不大,自然对流和坩埚旋转产生的强迫对流在磁场作用下形成一个控制整个熔体绝大部分区域的流动,流动强度减低,晶体旋转产生的涡强度急剧减少,当 $Ha = 2000$ 时,已经非常弱

了,在图中看不见.

表 2 列出了若干重要的数据,各符号的含义为: S_{max}^* 为无量纲最大流函数, S_{min}^* 为无量纲最小流函数, k_{max}^* 为无量纲最大紊动能, $\overline{k^*}$ 为无量纲平均紊动能, μ_{tmax}^* 为无量纲最大紊流粘性系数, $\overline{\mu_t^*}$ 为无量纲平均紊流粘性系数, C_{Oxmax} 为生长界面的最大氧浓度, $\overline{C_{Ox}}$ 为生长界面的平均氧浓度.

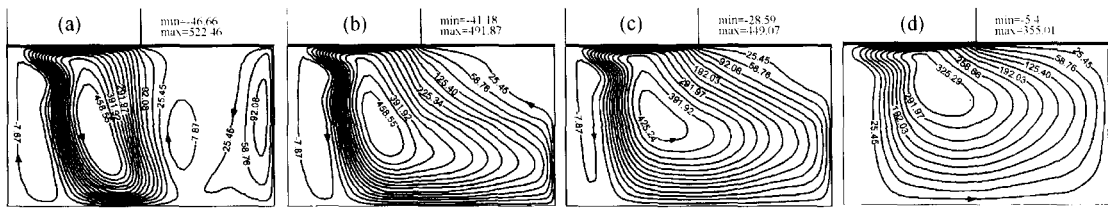


图 2 无量纲流函数图 (a) $Ha = 0$; (b) $Ha = 500$; (c) $Ha = 1000$; (d) $Ha = 2000$

Fig. 2 Contours of dimensionless stream function (a) $Ha = 0$; (b) $Ha = 500$; (c) $Ha = 1000$; (d) $Ha = 2000$

表 2 有无勾形磁场作用时若干重要数据

Table 2 Some important data with and without a cusp magnetic field

| Ha | S_{max}^* | S_{min}^* | k_{max}^* | $\overline{k^*}$ | μ_{tmax}^* | $\overline{\mu_t^*}$ | C_{Oxmax}/cm^{-3} | $\overline{C_{Ox}}/cm^{-3}$ |
|------|-------------|-------------|----------------------|--------------------|----------------|----------------------|-----------------------|-----------------------------|
| 0 | 522.46 | - 46.66 | 7.9×10^{10} | 1.25×10^8 | 521.0 | 283.8 | 5.67×10^{17} | 2.6×10^{17} |
| 500 | 491.87 | - 41.18 | 8.9×10^{10} | 9.6×10^7 | 529.4 | 296.7 | 3.47×10^{17} | 1.3×10^{17} |
| 1000 | 449.08 | - 28.59 | 8.6×10^{10} | 7.37×10^7 | 481.7 | 247.4 | 2.37×10^{17} | 1.1×10^{17} |
| 2000 | 354.89 | - 5.47 | 8.1×10^{10} | 5.05×10^7 | 447.9 | 183.5 | 1.49×10^{17} | 6.5×10^{16} |

从表 2 中可见,随着磁场强度的增加,流函数的最大值及最小值的绝对值、平均紊流粘性系数、最大紊流粘性系数、平均紊动能和生长界面处的最大氧浓度、平均氧浓度基本上是逐渐减少的,并且当 $Ha = 2000$ 时,平均紊流粘性系数约为无磁场时的 $2/3$,平均紊动能为无磁场时的 $1/2$.在一般情况下,紊流粘性系数和紊动能越大,紊流程度越大,因此随着勾

形磁场强度的增加,熔体内的紊流得到了有效的抑制.从图 3 可进一步看出,整个熔体内绝大部分是低氧区,坩埚壁处氧的边界层不明显,几乎看不出来,这完全是因为紊流时边界层太薄造成的,另外,我们得到的氧浓度分布的大致形状与文献[11]中的结果吻合.图 4 表明生长界面处氧的浓度也随着磁场强度的增大而下降,并且更加均匀.

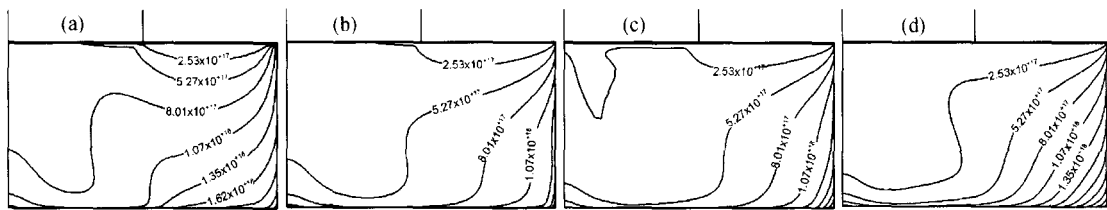


图 3 氧浓度分布图 (a) $Ha = 0$; (b) $Ha = 500$; (c) $Ha = 1000$; (d) $Ha = 2000$

Fig. 3 Contours of oxygen concentration (a) $Ha = 0$; (b) $Ha = 500$; (c) $Ha = 1000$; (d) $Ha = 2000$

勾形磁场之所以能抑制紊流,降低氧的含量,提高氧的径向均匀性,这与勾形磁场的特性是分不开的.在熔体中主要有四个区域的流动(见图 5):晶

体/熔体界面处的流动;坩埚/熔体界面处的流动;自由表面下的流动和熔体主体区域的流动.在晶体/熔体界面处的流动是非常重要的,它能将

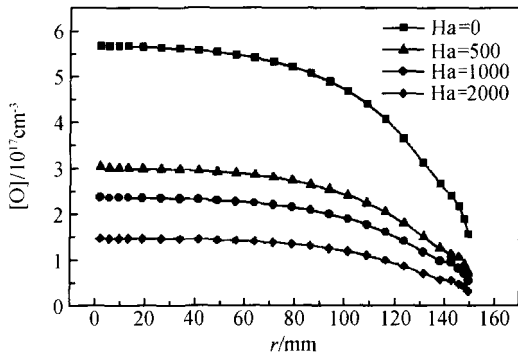


图 4 生长界面氧的浓度图

Fig. 4 Oxygen concentration at the growth interface

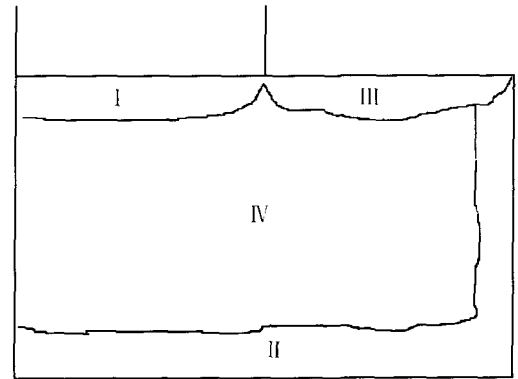


图 5 熔体中四个区域的流动

Fig. 5 Four flow regions in the melt

不纯物从晶体中带走. 若减少这种流动, 将使晶体的径向均匀性对晶体的边界层非常敏感. 因此为了保留此流动, 磁场中的轴向成分要小. 而从图 6(a) 可见, 在此区域, 勾形磁场的轴向成分几乎为 0, 因此勾形磁场对此区域的水平流动没有太大影响, 有利于提高氧的径向均匀性. 熔体内的氧主要是由坩埚的腐蚀扩散产生的, 当磁场强度垂直于坩埚壁时, 磁场将抑制平行于坩埚壁的流动 (注意自然对流和坩埚旋转所产生的强制对流大致平行于坩埚壁), 减小

了熔体对坩埚壁的冲刷, 从而减少了对坩埚的腐蚀, 降低了氧的浓度. 图 6(b) 表明在勾形磁场作用下坩埚壁附近洛伦兹力大, 且与流动反方向. 由于洛伦兹力极大地减弱了坩埚壁附近的流动, 从图 2, 特别是从图 2(d) 可见, 坩埚壁附近流动减弱, 导致氧浓度降低. 再者勾形磁场在自由界面处也是水平方向 (图 6 中的局部放大图), 对区域的流动作用很小, 但是由于减弱了垂直坩埚侧壁的流动, 导致自由面下

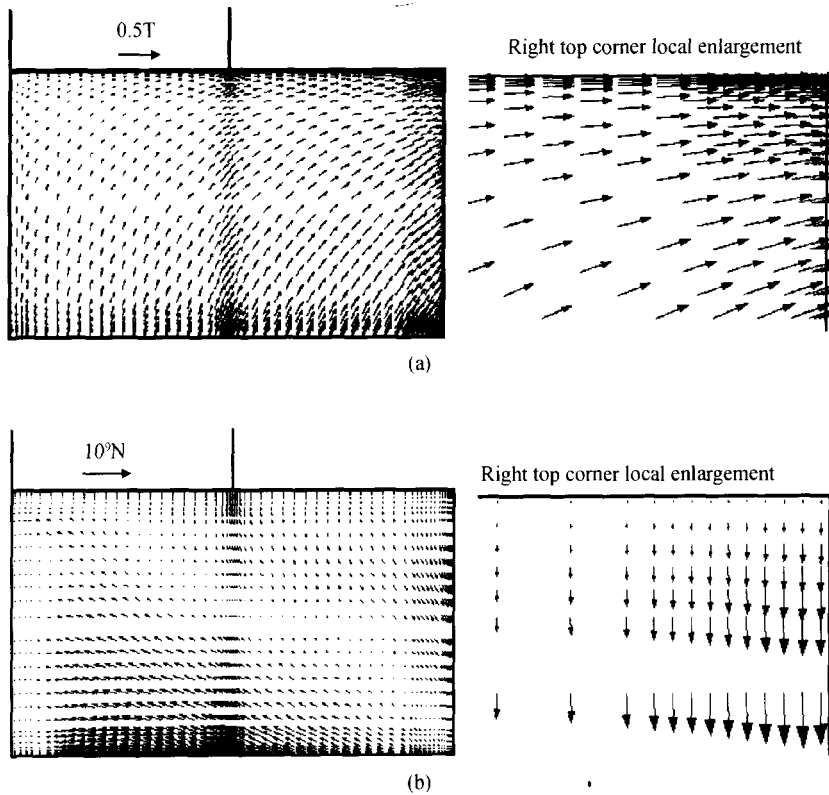


图 6 垂直截面处的磁场强度(a)和洛伦兹力(b)分布图

Fig. 6 Numerical results at a vertical cross section (a) Magnetic field; (b) Lorentz force

的水平流动减弱,氧能更充分地从自由表面挥发出去,然后将低氧熔体带入区域和,这种流动有效地降低了生长界面下及整个熔体的氧浓度.另外,无磁场时在熔体的主体区域内,有几种不同的流动形态.而这些流动对氧的浓度和温度分布(温度波动)都是非常重要的.若不能很好地控制这些流动,很可能出现非稳态现象.理想的磁场应该是既能很快抑制非稳态情况,又能允许在这一区域不同流动形态之间相互渗透.而勾形磁场能很好地将这一区域的各种流动缓慢地混合,使得一个涡控制着熔体的大部分区域.从有无磁场时,氧的边界层变化并不明显的特征,可以认为,磁场改变氧的浓度分布主要是通过改变熔体内的流动状态来实现的.

4 结 论

(1) 由于本文采用了低雷诺数 K - ϵ 紊流模型,该算法能从熔体中心的紊流区域一直沿用到固体壁面上,较好地处理了近壁面区域粘性支层与紊流区域的过渡关系.因此,在对大直径单晶硅的生长及对熔体在勾形磁场中的氧浓度的分布进行数值模拟时,结果是收敛的.

(2) 通过对不同磁场强度作用时无量纲最大流函数、最大紊动能、平均紊动能、最大紊流粘性系数、平均紊流粘性系数等数据的分析,得出勾形磁场强度增加,熔体内的紊流得到了有效地抑制.

(3) 勾形磁场对晶体/熔体界面处的水平流动没有太大影响,有利于提高氧的径向均匀性.勾形磁场抑制平行于坩埚壁的流动,减小了熔体对坩埚壁的冲刷,从而减少了对坩埚的腐蚀,降低了氧浓度.

参 考 文 献

- [1] Series R W. Czochralski growth of silicon under an axial magnetic field. *J Cryst Growth*, 1989, 97: 85
- [2] Li Y R, Ruan D F, Imaishi N, et al. Global simulation of a silicon Czochralski furnace in an axial magnetic field. *Int J Heat Mass Transfer*, 2003, 46: 2887
- [3] Ozoe H, Iwamoto M. Combined effects of crucible rotation and horizontal magnetic field on dopant concentration in a Czochralski melt. *J Cryst Growth*, 1994, 142: 236
- [4] Series R W. Effect of a shaped magnetic field on Czochralski silicon growth. *J Cryst Growth*, 1989, 97: 92
- [5] Hirata H, Hoshikawa K. Three-dimensional numerical analyses of effects of cusp magnetic field on the flows, oxygen transport and heat transfer in a Czochralski silicon melt. *J Cryst Growth*, 1992, 125: 181
- [6] Ivanov N G, Korsakov A B, Smirnov E M, et al. Analysis of magnetic field effect on 3D melt flow in CZ Si growth. *J Cryst Growth*, 2003, 250: 183
- [7] Kobayashi S, Miyahara S, Fujiwara T, et al. Turbulent heat transfer through the melt in silicon Czochralski growth. *J Cryst Growth*, 1991, 109: 149
- [8] Zhang T, Wang G X, Zhang H, et al. Turbulent transport of oxygen in the Czochralski growth of large silicon crystals. *J Cryst Growth*, 1999, 198/199: 141
- [9] Zhang T, Ladeinde F, Zhang H. A comparison of turbulence models for natural convection in enclosures applications to crystal growth processes. *Proc 31st National Heat Transfer Conf*, HTD, 1996, 323: 17
- [10] Kinney T A, Brown R A. Application of turbulence modeling to the integrated hydrodynamic thermal-capillary model of Czochralski crystal growth of silicon. *J Cryst Growth*, 1993, 132: 551
- [11] Lipchin A, Brown R A. Comparison of three turbulence models for simulation of melt convection in Czochralski crystal growth of silicon. *J Cryst Growth*, 1999, 205: 71
- [12] Zhang Guohu, Wu Zhiqiang, Fang Feng, et al. 300mm crystal silicon's growth technology. *Chinese Journal of Semiconductors*, 2001, 22(3): 383 (in Chinese) [张果虎, 吴志强, 方锋, 等. 300mm 硅单晶的生长技术. *半导体学报*, 2001, 22(3): 383]
- [13] Yu Huiping, Sui Yunkang, Zhang Fengyi, et al. Numerical simulation in Czochralski crystal growth by deferred QUICK scheme. *Chinese Journal of Synthetic Crystals*, 2003, 32(6): 648 (in Chinese) [宇慧平, 隋允康, 张峰翊, 等. 采用延时修正法实施 QUICK 格式模拟提拉单晶体的生长. *人工晶体学报*, 2003, 32(6): 648]
- [14] Yu Huiping, Sui Yunkang, Zhang Fengyi, et al. Numerical simulation in Czochralski Si melt under a cusp magnetic field. *Chinese Journal of Synthetic Crystals*, 2004, 33(2): 217 (in Chinese) [宇慧平, 隋允康, 张峰翊, 等. 勾形磁场下提拉法生产单晶硅的数值模拟. *人工晶体学报*, 2004, 33(2): 217]

Numerical Simulation of Oxygen Transportation in 300mm Diameter CZ Si Crystal Growth Under Cusp Magnetic Field *

Yu Huiping¹, Sui Yunkang¹, Zhang Fengyi², and Chang Xin'an³

(1 College of Mechanical Engineering & Applying Electronic Technique, Beijing University of Technology, Beijing 100022, China)

(2 General Research Institute for Nonferrous Metals, Beijing 100088, China)

(3 College of Materials Science and Engineering, Beijing University of Technology, Beijing 100022, China)

Abstract : A low Reynolds number $k-\epsilon$ turbulence model, which combines effects of buoyancy, crystal rotation and crucible rotation, is used to simulate the convection and oxygen transportation in a 300mm diameter CZ Si crystal growth under the cusp magnetic field, strength ranged from 0 to 0.12T. Based on a finite volume method, the QUICK scheme is used to discretize the convection term in the momentum and energy equations, and the up-wind scheme is used to discretize the convection term in the kinetic energy and dissipation rate equations. The SIMPLE algorithm is employed to couple velocity and pressure field. The simulation results indicate flow patterns and oxygen concentration in the melt are significantly different, when a cusp magnetic field is applied. The oxygen concentration at the growth interface is decreasing as the magnetic field strength increasing, and the turbulence intensities have been effectively dampened by the magnetic fields, which is benefit to the crystal growth.

Key words : CZ Si; cusp magnetic field; oxygen distribution; turbulence model

PACC : 6150C

Article ID : 0253-4177(2005)03-0517-07

* Project supported by Science and Technology Fund of Beijing University of Technology for Youth (No. JQ0105200372)

Yu Huiping female, was born in 1973, lecturer. She is engaged in the research on computational hydromechanics.

Received 2 March 2004, revised manuscript received 12 August 2004

© 2005 Chinese Institute of Electronics