

Е. М. Смирнова, В. Н. Попов

Институт теоретической и прикладной механики
им. С. А. Христиановича СО РАН
ул. Институтская, 4/1, Новосибирск, 630090, Россия
E-mail: popov@itam.nsc.ru

ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССОВ ТЕПЛО- И МАССОПЕРЕНОСА В УСТАНОВКЕ ПОЛУЧЕНИЯ ПОЛИКРЕМНИЯ МЕТОДОМ БРИДЖМЕНА *

С использованием трехмерного численного моделирования исследовано распределение некогерентных примесей в расплаве при получении поликристаллического кремния методом Бриджмена. Анализировалось влияние конфигурации границы фазового перехода на распределение вытесняемого вещества вблизи фронта кристаллизации в условиях азимутально-неоднородного нагрева боковых стенок тигля. Течение в жидкости описывается уравнениями Навье – Стокса в приближении Буссинеска, а распределение концентрации растворенного вещества определяется из решения уравнения конвективной диффузии. Из полученных результатов следует, что неоднородный разогрев расплава изменяет структуру конвективных течений, которые в случаях плоского или выпуклого фронтов кристаллизации способствуют оттеснению растворенной примеси к стенкам тигля. Процессы рассматривались в диапазоне параметров, соответствующих реальным температурам в ростовой печи и расплаве, размерам и форме тигля.

Ключевые слова: конвекция, поликремний, тепло- и массоперенос, моделирование.

Введение

Вертикальный метод Бриджмена широко используется при выращивании поликристаллического кремния для солнечной энергетики. Монокристаллический кремний имеет более высокую эффективность, однако низкая цена получения поликремния дает ему преимущество. Вместе с тем повышение качества поликристаллического кремния является актуальной проблемой, и для ее решения необходимо совершенствовать технологию его выращивания, добиваясь избавления от включений или повышения их однородности, оптимизации размера зерен и их ориентации [1].

Причины образования дефектов поликремния ясны не до конца. Одним из факторов неравномерного распределения вытесняемых компонентов в затвердевающем слитке является конфигурация потоков в расплаве. Известно, что в реальной установке для получения слитков методом Бриджмена, осесимметричная конфигурация те-

пловой поля, которая формируется идеальным расположением тигля строго по центру печи и абсолютно однородным разогревом его боковых стенок, трудно реализуема. Согласно исследованиям, для создания несимметричной структуры течения в расплаве, которая приводит к неоднородному распределению компонентов в растущем слитке, достаточно смещения оси тигля от центра печи на 0,5 % или ее отклонения от вектора силы тяжести на 0,5° [2; 3].

Управление конвективными течениями заключается либо в их подавлении, либо в придании потокам желаемой конфигурации и интенсивности для поддержания гомогенности расплава. Обычно для перемешивания жидкости используют вращение тигля. Это способствует регулированию конвективных потоков и устраняет сегрегационные неоднородности в слитке, обусловленные изменением объема расплава в процессе его затвердевания. Наряду с этим был предложен метод, позволяющий влиять на структуру течения в жидкости за счет неоднородного

* Работа выполнена в рамках интеграционного проекта № 26 СО РАН с институтами УрО и ДВО РАН.

разогрева боковых стенок тигля [4]. Управляющими параметрами в этой технологии являются геометрические размеры перегретого сектора, а также скорость его перемещения вследствие вращения тигля или темпа переключения нагревательных элементов в печи. Таким образом, появляется возможность формировать структуру конвективного течения, влияющую на распределение вытесняемых компонентов при ростовом процессе, и тем самым решать задачу гомогенизации расплава. В результате применения такого подхода были получены слитки поликристаллического кремния с улучшенными структурными и электрофизическими характеристиками [5].

В настоящей работе с использованием трехмерного численного моделирования исследовалось распределение некогерентных примесей в расплаве при получении поликристаллического кремния методом Бриджмена в условиях азимутально-неоднородного нагрева боковых стенок тигля. Анализировалось влияние конфигурации

границы фазового перехода на распределение вытесняемого вещества вблизи фронта кристаллизации в неподвижном и во вращающемся сосудах. Процессы рассматривались в диапазоне параметров, соответствующих реальным температурам в ростовой печи и расплаве, размерам и форме тигля.

Математическая модель

Схема выращивания поликристаллического кремния методом Бриджмена в условиях неоднородного нагрева боковых стенок сосуда представлена на рис. 1. Расплавленный материал заполняет тигель конической формы до уровня H_0 , которому соответствует внутренний радиус R_t (рис. 1, а). В основании сосуд имеет радиус R_b . Тигель опускается на пьедестале и может вращаться вокруг своей оси. Разогрев жидкости происходит в результате теплообмена между боковыми стенками сосуда и графитовыми нагревателями, а отвод тепла осуществляется через фронт кристаллизации. Распределение температуры по высоте графитового нагревателя определено на опытной установке (рис. 1, б). Область повышенного разогрева находится в секторе шириной $\Delta\phi$. Так как рассматриваются только конвективные процессы в расплаве, то фронт кристаллизации моделируется поверхностью, имеющей плоскую, выпуклую или вогнутую форму.

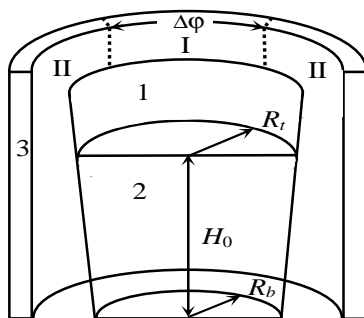
Математическое моделирование основано на численном решении трехмерных нестационарных уравнений Навье – Стокса в приближении Буссинеска и конвективного теплопереноса, записываемых в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_t + (\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{u} = \\ = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \nu\nabla^2\mathbf{u} + \mathbf{k}g\beta_T(T - T_s), \end{aligned} \quad (1)$$

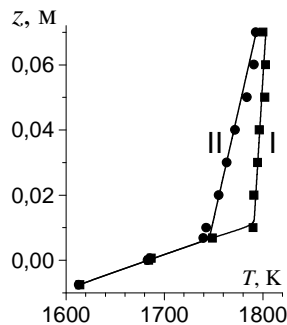
$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2)$$

$$T_t + (\nabla \cdot \mathbf{u})T = a\nabla^2T. \quad (3)$$

Здесь \mathbf{u} вектор скорости с компонентами u , v , w в радиальном (r), азимутальном (ϕ) и вертикальном (z) направлениях соответственно; \mathbf{k} – единичный вектор вдоль координатной оси z ; p – давление; T – температура; T_s – температура затвердевания жидкости; ν – кинематическая вязкость;



а



б

Рис. 1. Схема ростовой установки (а) и распределение температуры T по высоте тигля в зонах разогрева I, II на поверхности нагревателя (б): 1 – тигель; 2 – расплав; 3 – графитовый нагреватель; ●, ■ – экспериментальные данные

β_T – коэффициент объемного теплового расширения; a – температуропроводность; ρ – плотность; g – ускорение свободного падения.

Для жидкости используются условия прилипания на стенках сосуда и фронте кристаллизации. Предполагается, что небольшие величины конвективных скоростей при исследуемых режимах нагрева обуславливают плоскую форму свободной поверхности в отсутствие вязких напряжений. Теплообмен между расплавом в тигле и средой в ростовой печи описывается законом Ньютона. На границе раздела фаз температура постоянная. В начальный момент времени температура в жидкости от поверхности фронта кристаллизации до ее свободной поверхности определена согласно экспериментальным данным при условии отсутствия неоднородного бокового подогрева.

Уравнения (1)–(3) рассматриваются в расчетной области, где жидкость заполняет сосуд конической формы. Боковая стенка сосуда описывается функцией

$$f_1(z) = kz + R_t,$$

где $k = (R_t - R_b) / H_0$. Фронт кристаллизации моделируется поверхностью, образованной вращением кривой

$$f_2(r) = \delta_0(1 - r^2 / R_b^2)$$

вокруг оси Oz и может в зависимости от δ_0 иметь плоскую, выпуклую или вогнутую форму.

Таким образом, граничные условия формулируются в следующем виде. На боковой стенке сосуда $0 < z \leq H_0$, $r = f_1$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ при вращении тигля

$$\begin{aligned} \lambda \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} &= \alpha [T_H(\varphi, z) - T], \\ u &= 0, \quad v = 2\pi rk, \quad w = 0, \end{aligned} \quad (4)$$

при отсутствии вращения

$$\begin{aligned} \lambda \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} &= \alpha [T_H(\varphi, z) - T], \\ \mathbf{u} &= 0. \end{aligned} \quad (4')$$

$$\alpha = \frac{1}{\delta_c / \lambda_c + 1 / [\sigma_0 \epsilon_c (T_c^2 + T_s^2)(T_c + T_s)]}.$$

Здесь \mathbf{n} – нормальная составляющая рассматриваемой поверхности. Зона интенсивного разогрева определяется областью $(-\Delta\varphi/2, \Delta\varphi/2)$, $T_H(\varphi, z)$; T_c – распределение температуры и средняя температура на поверхности графитового нагревателя; λ – теплопроводность; a – температуропровод-

ность; α – коэффициент теплопередачи; δ_c , λ_c , ϵ_c – толщина стенки тигля, теплопроводность и приведенная степень черноты его материала; σ_0 – константа Стефана – Больцмана; k – частота вращения тигля вокруг своей оси.

На границе фазового перехода $0 \leq r \leq R_b$, $z = f_2$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$, если тигель вращается,

$$T = T_s, \quad u = 0, \quad v = 2\pi rk, \quad w = 0, \quad (5)$$

либо, если тигель не подвижен,

$$T = T_s, \quad \mathbf{u} = 0. \quad (5')$$

На свободной поверхности жидкости $0 \leq r < R_t$, $z = H_0$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad \frac{\partial v}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad w = 0. \quad (6)$$

Начальные условия:

$$\begin{aligned} T &= T_H(0, z), \quad \mathbf{u} = 0, \quad 0 \leq r \leq f_1, \\ f_2 \leq z \leq H_0, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi, \quad t=0, \end{aligned} \quad (7)$$

где $T_H(0, z)$ соответствует кривой I на рис. 1, б.

Таким образом, структура течения определяется в ходе решения системы (1)–(3) с граничными условиями (4)–(7).

Распределение растворенной в жидкости примеси описывается уравнением диффузии

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)C = D \nabla^2 C. \quad (8)$$

Здесь D – коэффициент диффузии.

Граничные условия для (8) запишем в следующем виде. На боковой стенке сосуда и свободной поверхности жидкости

$$D \frac{\partial C}{\partial \mathbf{n}} = 0. \quad (9)$$

На границе фазового перехода

$$D \frac{\partial C}{\partial \mathbf{n}} = w_0(1 - k_0)(C - C_0), \quad (10)$$

где w_0 – скорость роста твердой фазы; k_0 – равновесный коэффициент распределения примеси; C_0 – концентрация насыщения.

Начальное распределение растворенного вещества при $t = 0$, определено как $C = C_m$, C_m – средняя концентрация растворенного вещества в жидкости.

Алгоритм решения задачи

При решении задачи переходим к безразмерным величинам. Безразмерные параметры определяются с помощью характерного размера R_t , времени $t_0 = R_t / v_0$, скорости v_0 движения стенки сосуда в ази-

мутальном направлении на уровне $z = H_0$ (в случае если тигель не вращается $v_0 = v/R_t$), давления $p_0 = \rho v_0^2$, температурного интервала $\Delta T_0 = T_0 - T_s$ (T_0 – температура поверхности графитового нагревателя при $z = H_0$), концентрационного интервала $\Delta C_0 = C_m - C_0$:

$$\begin{aligned} r &= r/R_t, \quad z = z/R_t, \quad \delta = \delta_0/R_t, \\ r_0 &= R_b/R_t, \quad H = H_0/R_t, \quad t = t/t_0, \\ p &= p/p_0, \quad u = u/v_0, \quad v = v/v_0, \\ w &= w/v_0, \quad \theta = (T - T_s)/\Delta T_0, \\ C &= (C - C_0)/\Delta C_0, \end{aligned}$$

для чисел Рейнольдса (Re), Прандтля (Pr), Грасгофа (Gr), Био (Bi), Шмидта (Sc), концентрационного Био (Bi_D) используются соотношения

$$\begin{aligned} \text{Pr} &= \nu/a, \quad \text{Gr} = \beta_T g R_t^3 \Delta T_0 / \nu^2, \\ \text{Re} &= v_0 R_t / \nu, \quad \text{Bi} = \alpha R_t / \lambda, \\ \text{Sc} &= \nu/D, \quad \text{Bi}_D = w_0(1 - k_0) R_t / \nu. \end{aligned}$$

Для решения задачи безразмерные уравнения (1)–(3), (8) были переписаны в дивергентной форме таким образом, чтобы система совместно с (2) могла быть представлена в векторном виде

$$\mathbf{q}_t + \mathbf{F}_r + \mathbf{H}_\varphi + \mathbf{G}_z = \mathbf{f}, \quad (11)$$

где векторы \mathbf{q} , \mathbf{F} , \mathbf{H} , \mathbf{G} , \mathbf{f} определяются следующим образом:

$$\mathbf{q} = \begin{pmatrix} ru \\ rv \\ rw \\ 0 \\ r\theta \\ rC \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} r(u^2 - \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial u}{\partial r} + p) \\ r(uv - \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial v}{\partial r}) \\ r(uw - \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial w}{\partial r}) \\ ru \\ r(u\theta - \frac{1}{\text{Pr Re}} \frac{\partial \theta}{\partial r}) \\ r(uC - \frac{1}{\text{Sc Re}} \frac{\partial C}{\partial r}) \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} uv - \frac{1}{\text{Re}} \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial \varphi} + \frac{2}{\text{Re}} \frac{v}{r} \\ v^2 - \frac{1}{\text{Re}} \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial \varphi} - \frac{2}{\text{Re}} \frac{u}{r} + p \\ vw - \frac{1}{\text{Re}} \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial \varphi} \\ v\theta - \frac{1}{\text{Pr Re}} \frac{1}{r} \frac{\partial \theta}{\partial \varphi} \\ vC - \frac{1}{\text{Sc Re}} \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial \varphi} \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} r(uw - \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial u}{\partial z}) \\ r(vw - \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial v}{\partial z}) \\ r(w^2 - \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial w}{\partial z} + p) \\ rw \\ r(w\theta - \frac{1}{\text{Pr Re}} \frac{\partial \theta}{\partial z}) \\ r(wC - \frac{1}{\text{Sc Re}} \frac{\partial C}{\partial z}) \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{f} = \begin{pmatrix} v^2 - \frac{1}{\text{Re}} \frac{u}{r} + p \\ -uv - \frac{1}{\text{Re}} \frac{v}{r} \\ \frac{\text{Gr}}{\text{Re}^2} r\theta \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Использование цилиндрической системы координат при описании течений в области, имеющей сложную форму, является простой задачей ввиду необходимости построения расчетной сетки, не являющейся ортогональной, а также выполнения интерполяционных процедур при определении граничных условий. Поэтому с учетом формы сосуда использовалось преобразование координат

$$x = x(r, z), \quad \omega = \omega(\varphi), \quad y = y(r, z), \quad (12)$$

которое отображает физическую область (r, φ, z) на вычислительную область (x, ω, y) . В рассматриваемом случае были использованы соотношения

$$\begin{aligned} x(r, z) &= \frac{r}{kz + r_0}, \quad \omega(\varphi) = \varphi, \\ y(r, z) &= \frac{z - \delta \left\{ 1 - [r / (kz + r_0)]^2 \right\}}{H - \delta \left\{ 1 - [r / (kz + r_0)]^2 \right\}} H. \end{aligned} \quad (13)$$

В новой системе координат систему (11) можно представить в виде

$$\mathbf{q}_t^* + \mathbf{F}_x^* + \mathbf{H}_\omega^* + \mathbf{G}_y^* = \mathbf{f}^*, \quad (14)$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{F}^* &= (x_r \mathbf{F} + x_z \mathbf{G}) / J, \\ \mathbf{H}^* &= \omega_\varphi \mathbf{H} / J, \\ \mathbf{G}^* &= (y_r \mathbf{F} + y_z \mathbf{G}) / J, \\ \mathbf{q}^* &= \mathbf{q} / J, \quad \mathbf{f}^* = \mathbf{f} / J, \end{aligned}$$

а для якобиана преобразования используется выражение $J = (x_r, y_z - x_z, y_r) \omega_\phi$. При записи уравнений (14) предполагается, что частные производные в членах с вязкостью и диффузией преобразуются в соответствии с правилами дифференцирования сложных функций.

Для решения уравнений Навье – Стокса и конвективного тепло- и массопереноса применялся конечно-разностный алгоритм. Отметим, что рассматривается режим конвекции жидкости, когда течение является ламинарным и пограничный слой отсутствует. Использование преобразования (12), (13) позволяет отобразить расчетную область в цилиндр и применять пространственную сетку вида

$$x_i = \Delta x \cdot i, \quad i = 0, \dots, I,$$

$$\omega_m = \Delta \omega \cdot m, \quad m = 0, \dots, M,$$

$$y_k = \Delta y \cdot k, \quad k = 0, \dots, K,$$

$$\Delta x = 1/I, \quad \Delta \omega = 2\pi/M, \quad \Delta y = H/K,$$

которая разбивает расчетную область на $I \times M \times K$ ячеек.

По аналогии с методами типа *MAC* и *SIMPLE* [6; 7] составляющие скоростей u , v , w определялись в серединах боковых граней ячеек, а давление P рассчитывалось в центрах ячеек. Распределение температуры и концентрации растворенного вещества в расчетной области описывается их значениями в точках $(x_i, \omega_m + \Delta \omega/2, z_k)$, $i = 0, \dots, I$, $m = 1, \dots, M$, $k = 0, \dots, K$. Вдоль временной переменной используется равномерная сетка $t = n \cdot \tau$, $n = 0, 1, 2, \dots$ с шагом τ . Разностные уравнения строились посредством аппроксимации балансных соотношений, получаемых интегрированием преобразованных уравнений (1)–(3), (8) и граничных условий (4)–(7), (9), (10).

Порядок проведения расчетов на каждом временном шаге следующий. Первоначально вычисляется температурное и концентрационное поля в жидкости. Подстановка рассчитанных значений температуры в уравнения количества движения делает возможным определение составляющих поля скоростей. Далее с использованием метода искусственной сжимаемости [8] вычисляется давление. Проводится несколько итераций по согласованию распределения давления и скоростей. Условием прекращения расчетов является выполнение

$$\max |\nabla \cdot \mathbf{u}| \leq \varepsilon,$$

где ε – заданное малое число. Решение алгебраических систем, получаемых при неявной аппроксимации уравнений движения и тепло- и массопереноса, осуществляется итерационным методом блочной последовательной верхней релаксации [9].

Результаты численных экспериментов

При проведении численных экспериментов рассматривалась структура течений в расплаве со свойствами кремния при его разогреве в сосуде высотой 70 мм, с диаметрами в основании – 50 мм, в верхней части – 65 мм. Материал тигля – стеклографит, толщина стенок – 0,002 м. Физические свойства рассматриваемых материалов, согласно [10]:

$$T_s = 1\,683 \text{ К},$$

$$\lambda = 60 \text{ Вт/(м·К)},$$

$$\rho = 2\,550 \text{ кг/м}^3,$$

$$a = 2,33 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с},$$

$$\nu = 3,5 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с},$$

$$\beta_T = 5,8 \cdot 10^{-5} \text{ 1/К},$$

$$D = 7 \cdot 10^{-8} \text{ м}^2/\text{с},$$

$$\varepsilon_c = 0,8,$$

$$\sigma_0 = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ Вт/(м}^2 \cdot \text{К}^4),$$

$$\lambda_c = 7 \text{ Вт/(м·К)}.$$

Частота вращения тигля – 1/60 1/с. Равновесный коэффициент распределения k_0 принимался равным 0,5, скорость роста твердой фазы w_0 , согласно экспериментальным данным, была оценена как $3,35 \cdot 10^{-6}$ м/с. Величина температурного интервала $\Delta T_0 = 120$ К. Ширина сектора боковой стенки тигля в области более интенсивного разогрева $\Delta \phi = 120^\circ$. Распределение температуры на стенках ростовой установки были определены экспериментально (см. рис. 1, б).

Величины параметров, используемых при расчетах, следующие:

$$Gr = 2,3 \cdot 10^7,$$

$$Re = 300,$$

$$Bi = 0,3,$$

$$Pr = 0,015,$$

$$Sc = 5,$$

$$Bi_D = 0,015,$$

$$\varepsilon = 10^{-4}.$$

Расчеты проводились на пространственных сетках $I \times M \times K$ от $32 \times 36 \times 40$ до $64 \times 72 \times 80$ (различие получаемых результатов не превышало 5 %). Значения времен-

ного шага выбирались из условий устойчивости численного счета, минимизации количества итераций и изменялись от 10^{-3} до 10^{-4} .

Так как процесс получения поликристаллического кремния вертикальным методом Бриджмена является достаточно медленным, то его на некотором временном интервале можно считать квазистационарным и анализировать поля температуры и структуру течения при заданной высоте затвердевшей фазы. Ниже представлены результаты, полученные для уровня незатвердевшего расплава в тигле $0,5H + f_2(r) \leq z \leq H$ при отсутствии вращения сосуда и скорости вращения 1 об./мин для различных форм границы фазового перехода (плоская, вогнутая, выпуклая – $\delta = 0; -0,2; 0,2$). Ввиду того что тигель опустился относительно первоначального положения на расстояние $0,5H$, теплообмен происходит между расплавом и поверхностью графитового нагревателя в зоне $0 \leq z \leq 0,5H$ (см. рис. 1, б). При неоднородном разогреве жидкости стенки графитового нагревателя имеют распределение температуры в области $-\Delta\varphi/2 \leq \varphi \leq \Delta\varphi/2$ согласно значениям I, а в области $\Delta\varphi/2 < \varphi < 2\pi - \Delta\varphi/2$ согласно значениям II (см. рис. 1, б). В случае осесимметричного теплообмена распределение температуры на поверхности нагревателя соответствует данным I.

Рисунки 2, 3 отображают распределение вытесняемой примеси на границе фазового перехода для рассмотренных вариантов. Рисунки 4–6 иллюстрируют распределение температурного поля и структуру течений в расплаве при различных условиях затвердевания слитка в плоскости rz при $\varphi = 0$ (рис. 4–6, I), на свободной поверхности расплава (рис. 4–6, II) и на расстоянии $H/80$ от границы фазового перехода (рис. 4–6, III). Стрелки на рисунках указывают направление, а их длина характеризует интенсивность потока. Отметим, что представленные результаты диффузионной задачи дают качественную картину, так как для получения более точных данных требуется существенное увеличение узлов пространственной сетки.

По результатам расчетов [11], полученных при осесимметричном теплообмене боковых стенок тигля с графитовым нагревателем и отсутствии его вращения опреде-

лено, что при плоской или вогнутой форме границы фазового перехода происходит интенсивное перемешивание жидкости в верхней части сосуда. Коническая форма тигля способствует существованию восходящего потока в области центральной оси. Такая структура течения приводит к тому, что значительная часть вытесняемой при кристаллизации примеси скапливается в центральной области (см. рис. 2, а, I, II). В случае выпуклого фронта кристаллизации основная циркуляция в жидкости обуславливается всплыванием теплых масс вверх вдоль боковых стенок и образованием нисходящего потока в области центральной оси тигля, который вблизи фазовой границы формирует расходящееся течение. Симметричный нагрев жидкости способствует существованию застойной зоны вблизи границы фазового перехода в центральной части сосуда. При такой структуре течения вытесняемое в жидкость вещество не только переносится к боковым стенкам сосуда, но и частично накапливается в центральной зоне (см. рис. 2, а, III).

В случае осесимметричного разогрева вращающегося тигля при любой форме границы фазового перехода течение в жидкости наряду с интенсивным конвективным перемешиванием в ее верхней части характеризуется азимутальным перемещением и восходящим потоком в центральной области. Такая структура течения приводит к тому, что значительная часть вытесняемой при кристаллизации примеси, располагается в центральной части сосуда. Наряду с этим в случае плоского или выпуклого фронта затвердевания вблизи него существуют потоки, способствующие переносу вытесняемого в жидкость вещества к боковым стенкам сосуда (см. рис. 2, б, I, II, III).

Рисунки 4, а, б – 6, а, б (I, II, III) иллюстрируют результаты, рассчитанные при неоднородном нагреве боковых стенок невращающегося тигля. Условия теплообмена способствуют тому, что в жидкости формируются температурные поля и структуры течений симметричные относительно плоскости rz при $\varphi = 0$, а существование температурного градиента в азимутальном направлении приводит к возникновению потоков, расходящихся в разные стороны от зоны более интенсивного нагрева. В результате неосесимметричный разогрев сосуда приводит к тому, что восходящий поток

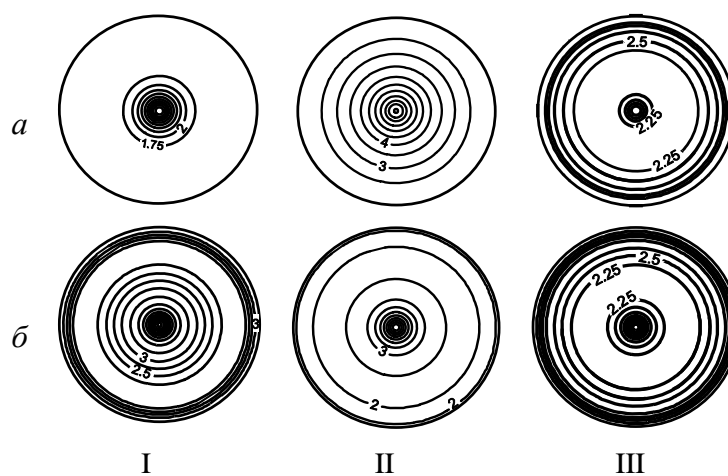


Рис. 2. Изоконцентраты на поверхности фронта кристаллизации, имеющего плоскую (I), вогнутую (II) и выпуклую (III) форму в неподвижном (а) и вращающемся (б) тигле при осесимметричном распределении температуры внутри печи

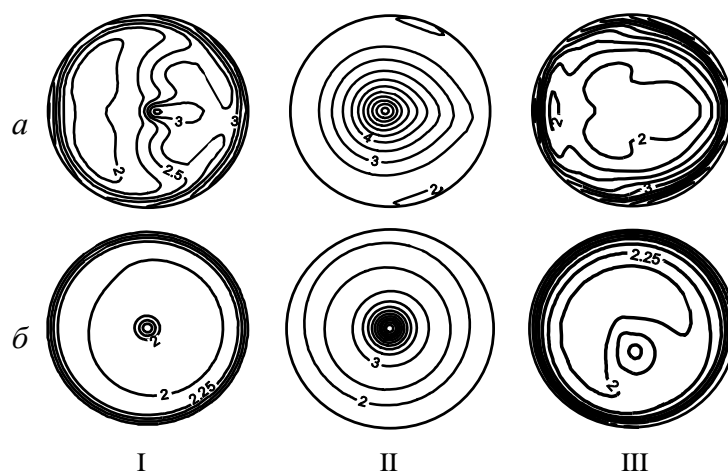


Рис. 3. Изоконцентраты на поверхности фронта кристаллизации, имеющего плоскую (I), вогнутую (II) и выпуклую (III) форму в неподвижном (а) и вращающемся (б) тигле при неоднородном в азимутальном направлении распределении температуры внутри печи

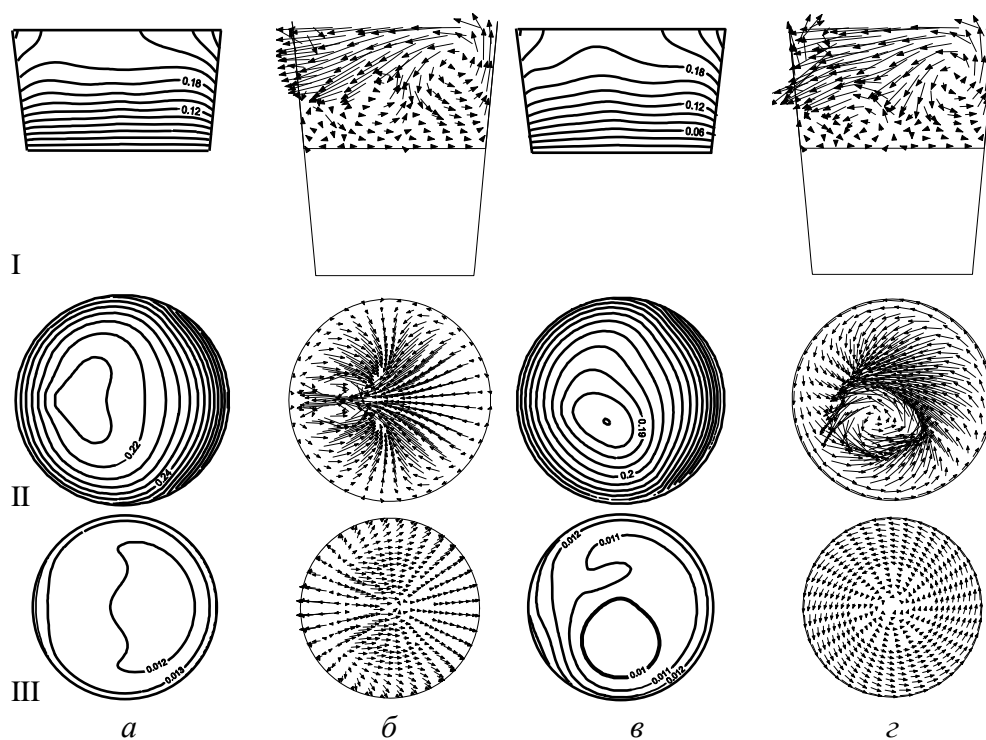


Рис. 4. Изотермы (а, в) и поле скоростей (б, г) при плоской границе фазового перехода в неподвижном (а, б) и вращающемся (в, г) тигле

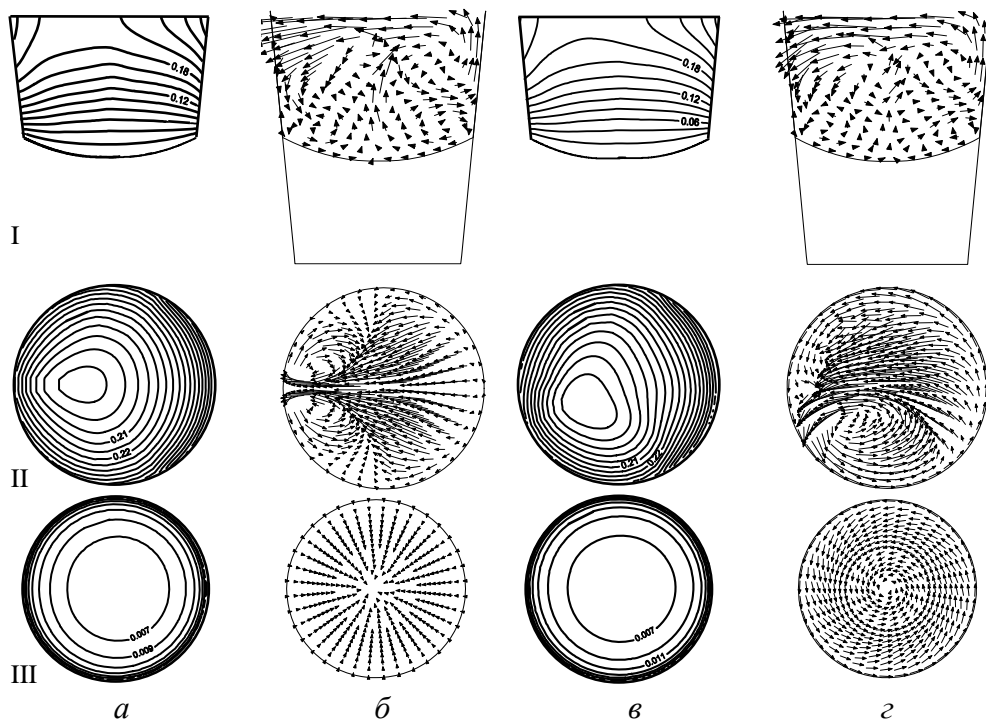


Рис. 5. Изотермы (а, в) и поле скоростей (б, г) при вогнутой границе фазового перехода в неподвижном (а, б) и вращающемся (в, г) тигле

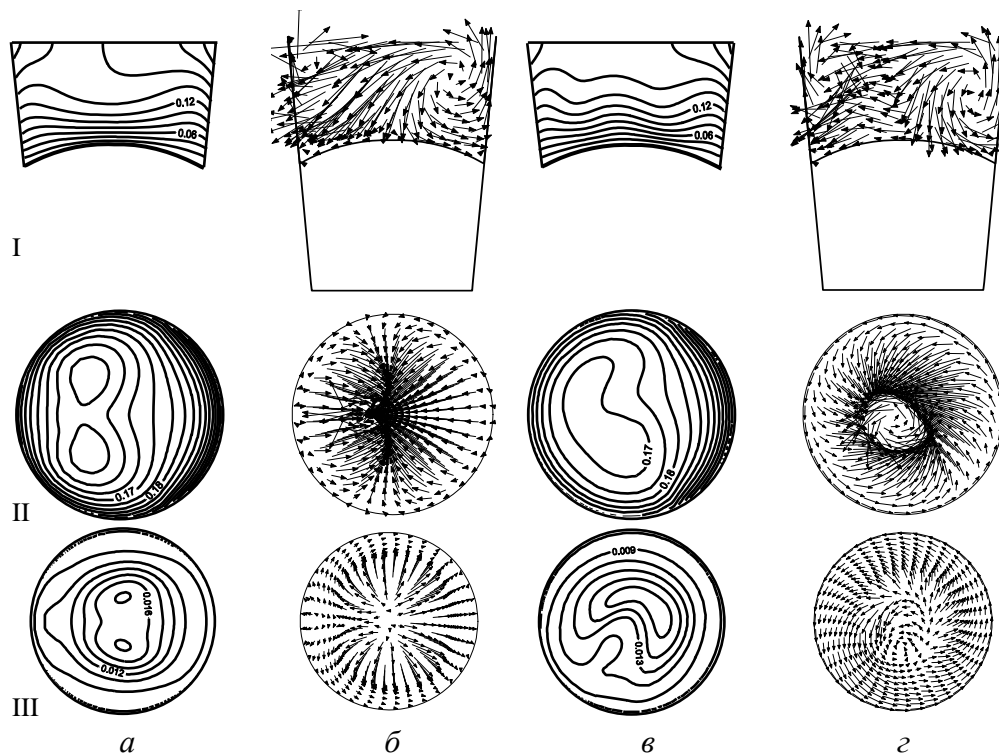


Рис. 6. Изотермы (а, в) и поле скоростей (б, г) при выпуклой границе фазового перехода в неподвижном (а, б) и вращающемся (в, г) тигле

вблизи центральной оси сохраняется лишь при вогнутой границе фазового перехода, а в других случаях исчезает.

Следствием сформировавшейся структуры течения является распределение растворенной в жидкости примеси на поверхности фронта кристаллизации (см. рис. 3, а, I, II, III). Согласно полученным данным в случаях плоской и выпуклой границ фазового перехода распределение вытесняемого вещества в центральной части слитка становится более однородным, а его максимальная концентрация наблюдается у боковых стенок сосуда. При вогнутой границе фазового перехода изменения в распределение примеси не происходит и ее максимальная концентрация наблюдается в центральной области получаемого слитка.

По результатам расчетов определено, что неоднородный нагрев боковых стенок вращающегося тигля оказывает влияние как на температурное поле, так и на течение в расплаве (см. рис. 4, в, г – б, в, г, I, II, III). Условия теплообмена способствуют тому, что существующие при осесимметричном температурном поле азимутальные и конвек-

тивные течения дополняются потоками, меняющими их структуру. В результате вблизи плоского или выпуклого фронтов затвердевания образуются центробежные течения. Однако при вогнутой границе фазового перехода проникновения к ее поверхности формирующихся в верхней части расплава потоков не происходит, и здесь движение жидкости определяется вращением сосуда.

Распределение вытесняемой в жидкость примеси на поверхности фронта кристаллизации (см. рис. 3, б, I, II, III) происходит в соответствии с существующими структурами течений. Согласно полученным результатам в случаях плоской и выпуклой границ фазового перехода распределение вытесняемого вещества в центральной части слитка становится более однородным, а его максимальная концентрация наблюдается у боковых стенок сосуда. При вогнутой границе фазового перехода вблизи нее сохраняется центростремительное движение жидкости, и, следовательно, может происходить накопление примеси в центральной части получаемого слитка.

Заключение

В работе с использованием трехмерного моделирования рассмотрены конвективные процессы в расплаве при выращивании поликристаллического кремния методом Бриджмена в неосесимметричном тепловом поле. Полученные результаты показали, что переход к режиму неоднородного разогрева боковых стенок тигля позволяет изменить структуру конвективных течений в жидкости как при наличии вращения сосуда, так и при отсутствии. Создавая в ходе затвердевания слитка условия для придания границе фазового перехода выпуклой или плоской формы, можно оптимизировать распределение вытесняемого в жидкость вещества.

Список литературы

1. *Fujiwara K., Obinata Y., Ujihara T. et al.* Grain Growth Behaviors of Polycrystalline Silicon during Melt Growth Processes // *J. of Crystal Growth*. 2004. Vol. 266. P. 441–448.
2. *Yeckel A., Compere J., Pandey A. et al.* Three-Dimensional Imperfections in a Model Vertical Bridgman System for Cadmium Zinc Telluride // *J. of Crystal Growth*. 2004. Vol. 263. P. 629–624.
3. *Bachran A., Reinshaus P., Seifert W.* Influence of Thermal Processing Parameters and Material Properties on Velocity Configurations in Semiconductor Melts during the Vertical Bridgman Growth Technique // *Cryst. Res. Technol.* 1998. Vol. 33. No. 1. P. 27–36.
4. *Kokh K. A., Popov V. N., Kokh A. E. et al.* Numerical Modeling of Melt Flows in Vertical Bridgman Configuration Affected by Rotating Heat Field // *J. of Crystal Growth*. 2007. Vol. 303. P. 253–257.
5. *Бельский С. С., Немчинова Н. В., Красин Б. А.* Изучение влияния параметров кристаллизации на свойства и структуру мультикремния // *Современные наукоемкие технологии*. 2006. № 8. С. 21–25.
6. *Harlow F. H., Welch J. E.* Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with Free Surface // *Phys. Fluids*. 1965. Vol. 8. P. 2182–2189.
7. *Patankar S. V., Spalding D. B.* A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three-Dimensional Parabolic Flows // *Int. J. Heat Mass Trans.* 1972. Vol. 15. P. 1787–1806.
8. *Chorin A. J.* A Numerical Method for Solving Incompressible Viscous Flow Problems // *J. Comput. Phys.* 1967. Vol. 2. P. 12–26.
9. *Самарский А. А., Николаев Т. С.* Методы решений сеточных уравнений. М.: Наука, 1978. 592 с.
10. *Басин А. С., Шишкин А. В.* Получение кремневых пластин для солнечной энергетики: методы и технологии. Новосибирск, 2000. 196 с.
11. *Попов В. Н.* Моделирование конвективных процессов при получении поликремния методом Бриджмена // *Теплофизика и аэромеханика*. 2009. Т. 16, № 3. С. 497–506.

Материал поступил в редколлегию 18.02.2010

E. M. Smirnova, V. N. Popov

OPTIMIZATION OF THE HEAT AND MASS TRANSFER PROCESSES IN A MECHANISM OF POLYCRYSTALLINE SILICON PRODUCTION BY THE BRIDGEMAN'S TECHNIQUE

The distribution of incoherent impurities in the melt for the polycrystalline silicon production by the Bridgeman's technique was studied with the aid of 3D numerical simulation. Under study was the influence of the phase transition configuration on the distribution of the displaced substance near the crystallization front under the conditions of azimuthal nonuniform heating of crucible side walls. The flow in the liquid is described by Navier-Stokes equations in the Boussinesq approximation, the distribution of the dissolved substance concentration is found from the solution of the convective diffusion equation. The obtained results show that the nonuniform heating of the melt changes the structure of convective flows; in the case of flat or convex crystallization front, these flows promote the displacement of the dissolved admixture toward the crucible walls. The processes were considered within the range of parameters following the real temperatures in a growth furnace and the melt, crucible size and shape.

Keywords: convection, polycrystalline silicon, heat and mass transfer, simulation.