

# 外加磁场对熔融半导体 CZ 法拉晶过程中流动场影响的数值计算

陈 熙 薛明伦  
(清华大学 工程力学系) (中国科学院 力学研究所)

**摘要** 数值分析结果表明, 外加磁场可以改变熔融半导体中的流型, 几千高斯的磁场可以显著地减小熔体的流动, 但对温度场影响不大.

**关键词** CZ 法中熔体对流, 磁场影响, 数值模拟.

熔融半导体的结晶过程受到流动场的重大影响, 以单晶生长的 Czochralski (CZ) 法为例, 熔体中的流动场至少受到下列因素的影响: 1) 由于温度场不均匀引起密度场不均匀所导致的引力场作用下的对流; 2) 由于熔体自由表面(图 1) 存在温度梯度引起表面张力梯度所导致的 Marangoni 对流; 以及 3) 由于拉晶杆转动和坩 埚转动所引起的对流<sup>[1]</sup>.

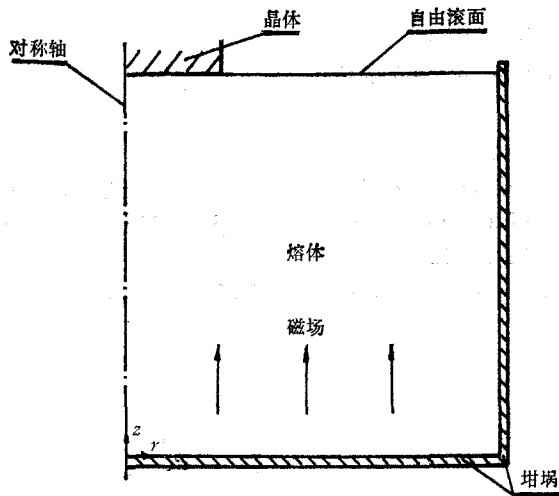


图 1 计算域

对于电导率足够高的熔融半导体(如硅或砷化镓), 显然外磁场也会对流产生影响<sup>[2,3]</sup>, 这是由于横过磁场的流动将在熔体中感生电流并产生 Lorentz 力, 从而影响熔体的流动. 本文拟报道我们关于此问题的若干典型的数值计算结果. 计算是针对特定的硅单晶生长过程进行的. 由于计算程序的通用性, 也可用它来计算其它几何尺寸、其它材料的, 计及外磁场影响的熔体中的流动场与温度场.

计算中所作的假定包括: 1) Boussinesq 近似适用, 即熔体密度变化只出现于浮力项中; 2) 由于磁雷诺数远小于 1, 感生磁场与外加磁场相比较可以忽略; 3) 焦耳热与粘性耗散产生的热量和导热及对流传热相比较可以忽略; 4) 半导体单晶的电导率一般比熔体

本文为国家自然科学基金资助项目, 本文于 1987 年 3 月 25 日收到.

的低二个量级左右,因而可处理为绝缘体; 5) 由于熔体中的温度变化范围很小,除表面张力系数处理为温度的函数外,其余物性参数均认为是常数;以及 6) 熔体的自由表面与晶体-熔体界面处理为一水平面。在外加轴向磁场作用下的轴对称熔融半导体定常层流流动,由下列无因次化后的方程式结合边界条件确定:

连续方程

$$\frac{1}{r'} \frac{\partial}{\partial r'} (r' v_r') + \frac{\partial}{\partial z'} v_z' = 0 \quad (1)$$

动量方程

$$v_r' = \frac{\partial v_r'}{\partial r'} + v_z' \frac{\partial v_r'}{\partial z'} = -\frac{\partial p'}{\partial r'} + \frac{1}{\text{Re}} \left[ \frac{\partial^2 v_r'}{\partial r'^2} + \frac{1}{r'} \frac{\partial v_r'}{\partial r'} + \frac{\partial^2 v_r'}{\partial z'^2} - \frac{v_r'}{r'^2} \right] + \frac{v_\phi'^2}{r'} \quad (2)$$

$$v_r' \frac{\partial v_\phi'}{\partial r'} + v_z' \frac{\partial v_\phi'}{\partial z'} = \frac{1}{\text{Re}} \left[ \frac{\partial^2 v_\phi'}{\partial r'^2} + \frac{1}{r'} \frac{\partial v_\phi'}{\partial r'} + \frac{\partial^2 v_\phi'}{\partial z'^2} - \frac{v_\phi'}{r'^2} \right] - \frac{v_r' v_\phi'}{r'} + I \left( \frac{\partial F'}{\partial r'} - v_\phi' \right) \quad (3)$$

$$v_r' \frac{\partial v_z'}{\partial r'} + v_z' \frac{\partial v_z'}{\partial z'} = -\frac{\partial p'}{\partial z'} + \frac{1}{\text{Re}} \left[ \frac{\partial^2 v_z'}{\partial r'^2} + \frac{1}{r'} \frac{\partial v_z'}{\partial r'} + \frac{\partial^2 v_z'}{\partial z'^2} \right] + \frac{\text{Gr}}{\text{Re}^2} (\theta' - 1) \quad (4)$$

能量方程

$$v_r' \frac{\partial \theta'}{\partial r'} + v_z' \frac{\partial \theta'}{\partial z'} = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \left[ \frac{\partial^2 \theta'}{\partial r'^2} + \frac{1}{r'} \frac{\partial \theta'}{\partial r'} + \frac{\partial^2 \theta'}{\partial z'^2} \right] \quad (5)$$

电位方程

$$\frac{1}{r'} \frac{\partial}{\partial r'} \left( r' \frac{\partial F'}{\partial r'} \right) + \frac{\partial^2 F'}{\partial z'^2} - \frac{1}{r'} \frac{\partial}{\partial r'} (r' v_\phi') = 0 \quad (6)$$

这里无因次坐标为  $r' = r/L_0$ ,  $z' = z/L_0$ ,  $r$  与  $z$  分别为径向与轴向坐标,  $L_0$  为特征长度;无因次速度分量为  $v_r' = v_r/v_0$ ,  $v_\phi' = v_\phi/v_0$ ,  $v_z' = v_z/v_0$ ,  $v_r$ ,  $v_\phi$  与  $v_z$  分别为径向、周向与轴向速度分量,  $v_0$  为特征速度;无因次压力为  $p' = (p + \rho_0 g z)/(\rho_0 v_0^2)$ ,  $p$  为压力,  $\rho_0$  为熔体密度,  $g$  为重力加速度;无因次温度为  $\theta' = (T - T_m)/(T_w - T_m)$ ,  $T_m$  与  $T_w$  分别为熔体的凝固温度与加热熔体的坩埚内壁温度,  $T$  为熔体温度;无因次电位

$$F' = F/(L_0 v_0 B_z),$$

$F$  为电位,  $B_z$  为轴向外加磁场的磁感强度, 方程 (2)~(5) 中所出现的无因次准则数为

$$\text{Re} = \frac{v_0 L_0}{\nu} \quad \text{Reynolds 数}$$

$$I = \frac{\sigma B_z^2 L_0}{\rho_0 v_0} \quad \text{磁场作用参数}$$

$$\text{Gr} = \frac{\beta(T_c - T_m) g L_0^3}{\nu^2} \quad \text{Grashof 数}$$

$$\text{Pr} = \frac{\mu c_p}{\kappa} \quad \text{Prandtl 数}$$

其中出现的物性参数  $\nu, \sigma, \mu, c_p, \kappa$  与  $\beta$  分别为熔体的运动粘性系数、电导率、动力粘性系数 ( $\nu = \mu/\rho_0$ )、比热、热传导系数与体膨胀系数。

与 CZ 拉晶法对应的数值计算域如图 1 所示, 计算中所采用的边界条件为

(1)  $z' = 0$  (坩埚底壁):

$$v_r = v_z = 0, \quad v_\phi = r'\omega_c, \quad \theta' = 1, \quad \frac{\partial F'}{\partial z'} = 0$$

(2)  $r' = 0$  (对称轴):

$$v_r = v_\phi = 0, \quad \frac{\partial v_z'}{\partial r'} = \frac{\partial \theta'}{\partial r'} = \frac{\partial F'}{\partial r'} = 0$$

(3)  $r' = R_0/L_0$  (坩埚侧壁):

$$v_r = v_z = 0, \quad v_\phi = \left(\frac{R_0}{L_0}\right)\omega_c, \quad \theta' = 1, \quad \frac{\partial F'}{\partial r'} = \left(\frac{R_0}{L_0}\right)\omega_c$$

(4a)  $z' = h/L_0, 0 \leq r' \leq a/L_0$  (晶体-熔体界面):

$$v_r = v_z = 0, \quad v_\phi = r'\omega_i, \quad \theta' = 0, \quad \frac{\partial F'}{\partial z'} = 0$$

(4b)  $z' = h/L_0, a/L_0 < r' < R_0/L_0$  (熔体自由表面):

$$v_z = \frac{\partial v_\phi}{\partial z'} = 0, \quad \frac{\partial v_r'}{\partial z'} = -\frac{\text{Re}_c}{\text{Re}} \left(\frac{\partial \theta'}{\partial r'}\right), \quad \frac{\partial F'}{\partial z'} = 0,$$

$$\frac{\partial \theta'}{\partial z'} = 0 \quad (\text{自由表面对外绝热}) \text{ 或者}$$

$$\frac{\partial \theta'}{\partial z'} = -K_r \theta' \quad (\text{自由表面对等效温度为 } T_m \text{ 的环境辐射传热})$$

以上各式中  $a, R_0$  与  $h$  分别为晶体半径、坩埚内半径与熔体高度;  $\omega_c$  与  $\omega_i$  为坩埚与晶体无因次转速,  $\omega_c' = \omega_c R_0/\nu_0, \omega_i' = \omega_i R_0/\nu_0, \omega_c$  与  $\omega_i$  为坩埚与晶体转动角速度;  $\text{Re}_c$  与  $K_r$  分别为表面张力雷诺数与无因次辐射参数:

$$\text{Re}_c = \frac{\left|\frac{\partial \gamma}{\partial T}\right| (T_c - T_m) L_0}{\rho_0 \nu^2} \quad \text{雷诺数}$$

$$K_r = 4\varepsilon\sigma_r T_m^3 L_0/\kappa \quad \text{液面辐射参数}$$

此处  $\gamma$  与  $\varepsilon$  为熔体的表面张力系数与黑度系数,  $\sigma_r$  为 Stefan-Boltzmann 常数。

用 SIMPLER 通用计算机程序<sup>[4]</sup>对方程 (1)–(6) [采用边界条件 (1)–(4b)] 进行了数值解, 典型的计算结果如图 2a–图 3 所示。由于本文目的主要是为了了解外加磁场对流动的影响, 此处仅给出了磁场作用参数  $I$  变化、而其余条件不变时的结果。计算中根据硅单晶 CZ 法生长的典型条件, 选取  $\text{Re} = 10^2, \text{Gr} = 10^3, \text{Re}_c = 10^3, \text{Pr} = 0.023, K_r = 0.2, \omega_c = \omega_i = 1$  弧度/秒, 而  $I$  依次为 0, 5, 20 与 80, 大致相应于外磁场的磁感强度为 0, 0.1, 0.2 与 0.4 tesla (或磁场强度为 0, 1000, 2000 与 4000 高斯), 坩埚半径 0.025 米, 晶体半径 0.00625 米,  $\omega_c = \omega_i = 9.5$  转/分,  $T_c - T_m = 10\text{K}$  的情况。

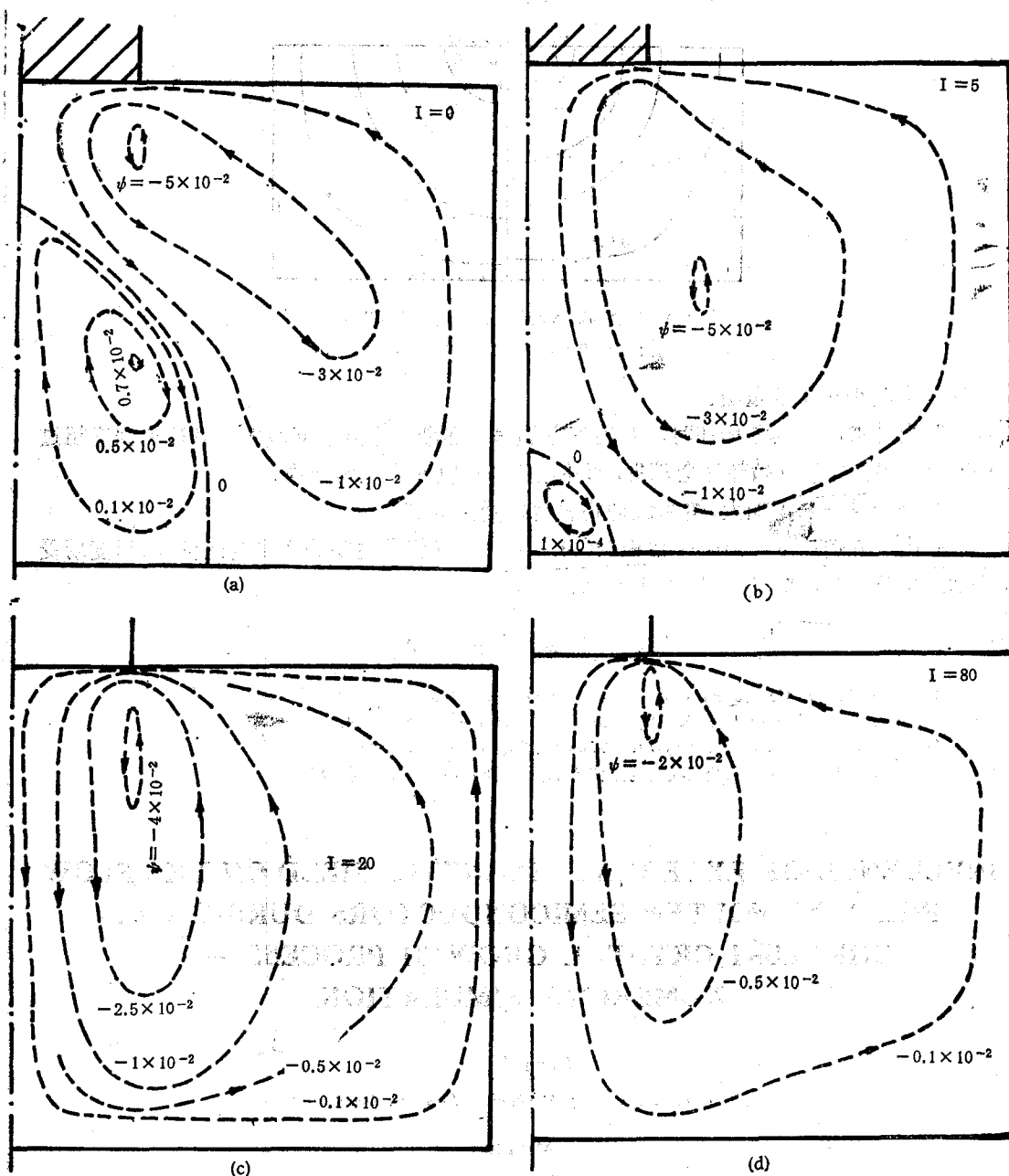


图 2 外加磁场对熔融半导体中流型的影响  
 (a)  $I=0$  (无外磁场); (b)  $I=5$ ; (c)  $I=20$ ; (d)  $I=80$ .

图 2a—图 2d 中所画的是不同外加磁场情况下的流函数分布，图 3 对照了无外磁场与  $I=20$  (2000 高斯外磁场) 时熔体中的无因次温度分布。从这些结果可以看到：

1. 无外磁场时(图 2a)，在温度梯度、液面表面张力梯度及晶体/坩埚旋转的综合作用下，流场中出现两个方向相反的涡环，但下方靠近轴线的涡环的强度低得多，约比上方的

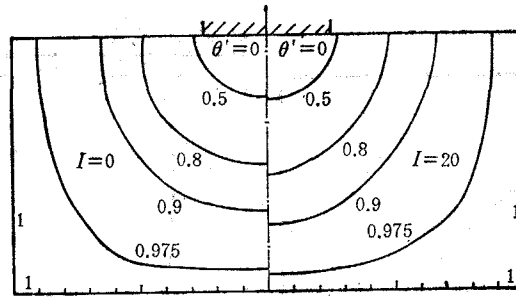


图3 外磁场对熔融半导体中温度场的影响  
左:  $I=0$  (无磁场); 右:  $I=20$

涡环的强度小一个数量级。

2. 当外加磁场逐渐增加时, 开始下方的涡环逐渐缩小且强度减弱, 外加磁场强度超过 1000 高斯以后, 下方涡环完全消失, 即外加磁场可以改变流场结构。

3. 磁场再进一步加大, 熔体流动将显著地受到抑制。

4. 由于硅熔体的 Prandtl 数极低 ( $\ll 1$ ), 热传导将是主要的能量运输机理, 温度场受流动的影响甚微, 这可以从图 3 中看到。

### 参 考 文 献

- [1] Ostrach, S., *ASME Journal of Fluid Engineering*, **105**(1983), 5—20.
- [2] Langlois, W. E. and Lee, K. J., *IBM R&D.*, **27**(1983), 281—284.
- [3] Organ, A. E., *Journal of Crystal Growth*, **73**(1985), 571—581.
- [4] Patankar, S. V., 传热与流体流动的数值计算(张政译), 科学出版社 (1984).

## INFLUENCE OF EXTERNAL MAGNETIC FIELD ON THE FLOW FIELD OF MOLTEN SEMICONDUCTORS DURING CZOCHRALSKI CRYSTAL GROWTH PROCESS — A NUMERICAL SIMULATION

Chen Xi

(Dept. of Engineering Mechanics, Tsinghua University)

Xue Minglun

(Institute of Mechanics, Academia Sinica)

**Abstract** Numerical results show that the external magnetic field influences significantly the flow field of molten semiconductors during Czochralski crystal growth process. The melt flow could be heavily damped by a magnetic field with intensity of several thousand gauss, while the temperature field is nearly unaffected because of very low Prandtl number.

**Key words** melt flow in CZ crystal growth, magnetic field effect, numerical simulation