

アスペクト比に依存する大口径 CZ 法融液の熱流動解析

Thermal melt flow analysis in the large-scale CZ crucible depending on the melt aspect ratio

清野 誠, 慶應大, 〒223-8522 横浜市港北区日吉 3-14-1, E-mail: seino@tana.mech.keio.ac.jp

河野 晴彦, 慶應大, 〒223-8522 横浜市港北区日吉 3-14-1, E-mail: kohno@tana.mech.keio.ac.jp

棚橋 隆彦, 慶應大, 〒223-8522 横浜市港北区日吉 3-14-1, E-mail: taka@mech.keio.ac.jp

Makoto SEINO, Keio University, 3-14-1, Hiyoshi, Kohoku-ku, Yokohama, 223-8522, JAPAN

Haruhiko KOHNO, Keio University, 3-14-1, Hiyoshi, Kohoku-ku, Yokohama, 223-8522, JAPAN

Takahiko TANAHASHI, Keio University, 3-14-1, Hiyoshi, Kohoku-ku, Yokohama, 223-8522, JAPAN

From the increase of the digital equipments which require high performance, the research dealing with the large-scale silicon single crystal in the CZ (Czochralski) method has been progressed so far in both experiment and numerical simulation. To obtain the products with good quality, the melt flow should be thoroughly investigated because the structure becomes more complicated with the increase of Rayleigh number. Moreover, the flow pattern varies in the growth process with the reduction of the melt volume. On the other hand, these instabilities can be controlled by adjusting the crucible and crystal rotational rate because the Coriolis' force works the flow field. From this background, three-dimensional LES (Large-Eddy Simulation) applying the Smagorinsky model is carried out to investigate the appropriate melt control condition with different melt aspect ratios. As a result, it is found that the melt speed to the vertical direction not to be controlled by Coriolis' force becomes faster and the heat flux to the single crystal becomes increase, when the aspect ratio is small.

1. 緒言

現在シリコン単結晶の育成のほとんどは CZ 法⁽¹⁾により行われ, その研究も広範に渡っている⁽²⁾. しかし, 融液の制御を目的としている研究において, 融液深さを变化させた解析はあまり見られない. CZ 法による単結晶の育成中に, 固液界面近傍における熱履歴が非定常になる. この原因としてアスペクト比が変わることにより, 融液が浮力を受ける領域が狭くなり, 自然対流がアスペクト比の大きい場合ほど発達しないので, アスペクト比が大きい場合と同じ条件で制御できないと考えられる. そこで, 融液の量が減少していく過程で, 融液の高さが育成開始時より半分になったところにおける速度場および温度場を調べることで, より適した融液の制御条件を見出すべく解析を行う. このことは製品の高品質化はもとよりコスト面で考えても工学的に研究の意義が見出せる. そこで, 本研究ではシリコンの融液深さに依存する最適の制御条件を見出すことを目的とし, 融液内部の流れ場を 3 次元数値解析により評価する.

2. 支配方程式

本研究で扱う解析領域は融液とする. 速度場は回転座標系で記述された連続の式, Navier-Stokes の方程式, 温度場はエネルギー方程式により記述される.

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\frac{1}{\mathbf{r}} \nabla p + 2\mathbf{nD} + \mathbf{g} b \Delta T - 2\mathbf{O} \times \mathbf{v} \quad (2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) T = \mathbf{a} \nabla^2 T \quad (3)$$

なお (2) 式右辺第 3 項は浮力項, 第 4 項は Coriolis 力を表す. また, 圧力項に遠心力が組み込まれている. CZ 法における融液は熱的に不安定な系, 高 Reynolds 数, 高 Rayleigh 数流れであるため, より小さな渦は巨視的な渦へ与える影響のみを考慮することとし, 本解析では乱流モデルとして浮力を考慮した Smagorinsky モデルを適用した LES⁽³⁾⁽⁴⁾により流れ場の解析を行う. 以下に LES により定式化された速度場, 温度場の支配方程式を示す.

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (4)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\mathbf{r}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\mathbf{n} + \mathbf{n}_{SGS}) \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) + \mathbf{g} b (\bar{T} - T_m) \mathbf{d}_{3i} + (\bar{v}_j O_k - \bar{v}_k O_j) e_i \quad (5)$$

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{T} \bar{u}_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} (\mathbf{a} + \mathbf{a}_{SGS}) \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} \quad (6)$$

なお, $\mathbf{d}_{3i} = \mathbf{e}_i$, (5) 式中の \mathbf{n}_{SGS} は sub-grid scale の渦粘性係数, (6) 式中の \mathbf{a}_{SGS} は sub-grid scale の熱伝達率である. Sub-Grid Scale の渦粘性係数および熱伝達率を以下に示す.

$$\mathbf{n}_{SGS} = (C_S \Delta)^2 |\bar{S}|_B \quad (7)$$

$$|\bar{S}|_B = \left(|\bar{S}| - \frac{\mathbf{g} b}{Pr_{SGS}} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_3} \right)^{1/2} \quad (8)$$

$$\bar{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (9)$$

$$\Delta = (\Delta_1 \Delta_2 \Delta_3)^{1/3} \quad (10)$$

$$\mathbf{a}_{SGS} = \frac{\mathbf{n}_{SGS}}{Pr_{SGS}} \quad (11)$$

本解析において (10) 式の Δ は格子幅とする. パラメータは Smagorinsky 定数を 0.1, Sub-Grid Scale の Prandtl 数を 1.0 とした. 以上の式を時間に関して予測子・修正子法により, 空間に関しては Galerkin 法により離散化された GSMAC 有限要素法を用いる.

3. 解析モデル

解析モデルを図 1 に示す. 解析モデルの寸法を表 1 に, また対象としたシリコン融液の物性値を表 2 にまとめる. 解析格子は六面体とし, 要素数は半径, 周, 高さ方向にアスペクト比が大きい方で $37 \times 56 \times 34$, 小さい方で $44 \times 80 \times 18$ とする. 速度場の境界条件として, 坩堝壁で no slip を, 自由表面で slip 条件を適用する. 温度の境界条件としては坩堝壁面を 1715K, CZ 坩堝底部は半径方向に線形に減少する温度変化を与え, 中心を 1710K とする. また, 固液界面は融点である 1685K で一定とし, 自由表面は断熱条件を適用する. 初期条件として融液の温度を固液界面の温度と一致させ, 坩堝およ

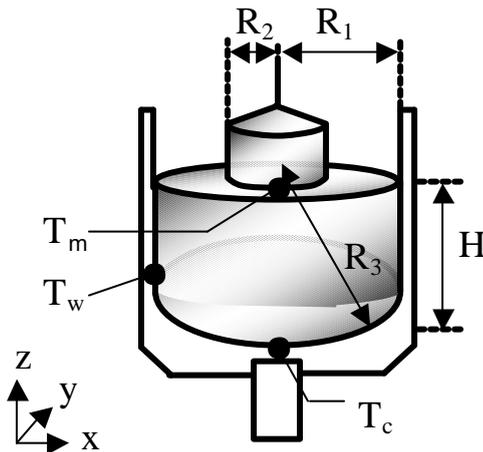


Fig.1 Schematic diagram of the CZ method.

Table 1 Size of crucible.

Crucible Radius	[m]	R_1	3.19×10^{-1}
Crystal Radius	[m]	R_2	1.10×10^{-1}
Curvature Radius	[m]	R_3	6.60×10^{-1}
Larger Height	[m]	H_1	4.04×10^{-1}
Smaller Height	[m]	H_2	2.02×10^{-1}

Table 2 Physical properties of silicon melt.

Melt Density	[kg/m ³]	?	2.52×10^3
Kinematic Viscosity	[m ² /s]	?	3.00×10^{-7}
Cubical Expansion	[1/K]	β	1.40×10^{-4}
Thermal Diffusivity	[m ² /s]	a	2.64×10^{-5}
Specific Heat	[J/(kg·K)]	C_p	1.00×10^3

び単結晶の回転は自然対流が発達した計算時間で 200 秒経過してから加える。坩堝および単結晶の回転数は共に 20rpm とし、回転の方向は坩堝の回転による効果を考察するために同方向とする。アスペクト比が大きい方を Case 1 とし、小さい方を Case 2 とする。

4. 解析結果

計算時間で 200 秒経過した結果の $z=4.00 \times 10^{-1}$ [m] における温度分布および同平面内の速度ベクトル図を図 2.1 に、更に図 2.2 に $y=0.00$ [m] における温度分布および速度ベクトル図を示す。各断面内の速度の最大値を表 3 に示す。これらの温度、速度を初期条件にして回転を加える。次に、計算時間で 400 秒経過した結果の $z=4.00 \times 10^{-1}$ [m] における温度分布および同平面内の速度ベクトル図を図 3.1 に、図 3.2 に $y=0.00$ [m] における温度分布および速度ベクトル図を示す。ここで、図 3.1 および図 3.2 に示した各断面内における速度の最大値を表 4 にまとめる。表 3 と表 4 を比較すると、と、速度が減少していることが判る。従って、いずれの条件も Coriolis 力が自然対流を抑制し、図 3.2 を見ても融液が安定である軸対称流れに近づいている様子が分かる。それぞれの条件で融液全体の運動エネルギーを比較すると、図 4 のようになる。図 4 から判るように、Case 2 の方が、Case 1 よりも一定に推移している。従って、Case 1 の方は融液が攪拌されている状態であることが判る。なお、本研究では LES により解析を行ったため、運動エネルギーは grid scale の運動エネルギーのみ考慮する。次に、 $y=0.00$ [m]、 $z=4.00 \times 10^{-1}$ [m] の固液界面直下における z 方向の速度成分の振動を図 5 に示す。Case 1 と Case 2 を比較すると、Case 2 の方が乱れている。温度場について考察をする。図 3.2(a),(b)より温度場はいずれの条件においても軸対称に近い。400 秒における $z=4.00 \times 10^{-1}$ [m]、

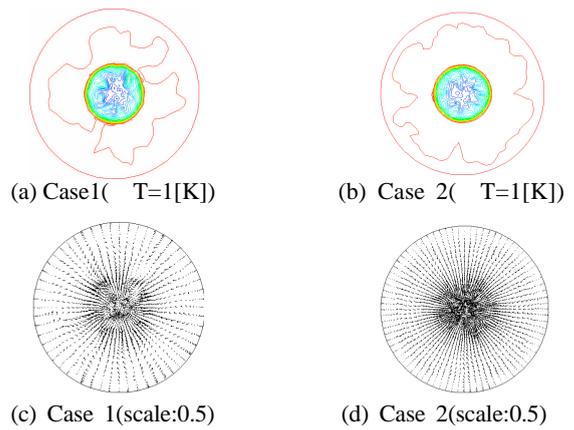


Fig.2.1 Isothermal lines and velocity vectors on the horizontal plane ($z=4.00 \times 10^{-1}$ [m]) at 200s.

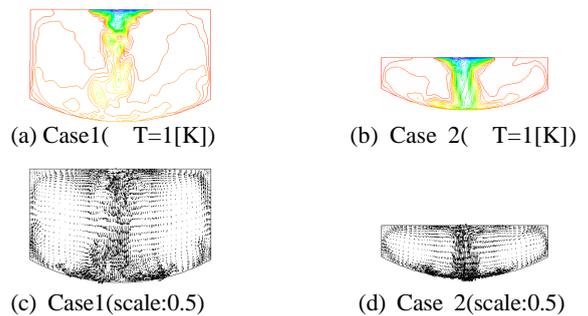


Fig.2.2 Isothermal lines and velocity vectors on the vertical plane ($y=0.00$ [m]) at 200s.

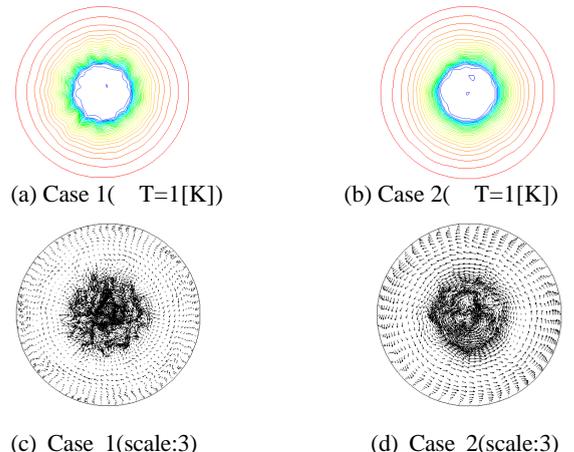


Fig.3.1 Isothermal lines and velocity vectors on the horizontal plane ($z=4.00 \times 10^{-1}$ [m]) at 400s.

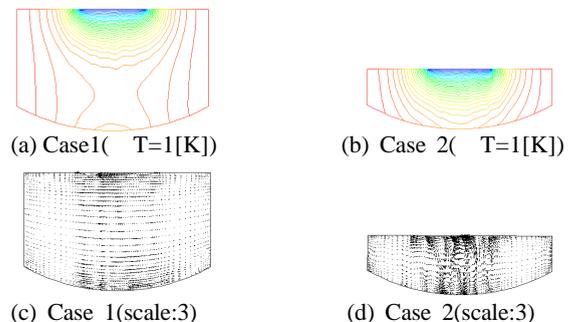


Fig.3.2 Isothermal lines and velocity vectors on the vertical plane ($y=0.00$ [m]) at 400s.

$y=0.00$ [m] における固液界面直下の温度分布を調べると図 6 のようになる。図 6 で Case 2 に局所的に温度大きくなって

Table 3 The maximum speed[m/s] on each case in two cases at 200s.

Large aspect ratio on horizontal plane	4.87×10^{-2}
Small aspect ratio on horizontal plane	4.72×10^{-2}
Large aspect ratio on vertical plane	1.03×10^{-1}
Small aspect ratio on vertical plane	9.38×10^{-2}

Table 4 The maximum speed[m/s] on each case in two cases at 400s.

Large aspect ratio on horizontal plane	2.06×10^{-2}
Small aspect ratio on horizontal plane	2.03×10^{-2}
Large aspect ratio on vertical plane	8.63×10^{-3}
Small aspect ratio on vertical plane	1.47×10^{-2}

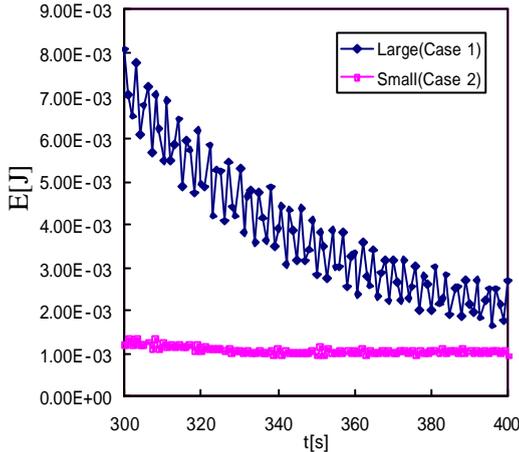


Fig.4 Kinetic energy fluctuation of each case.

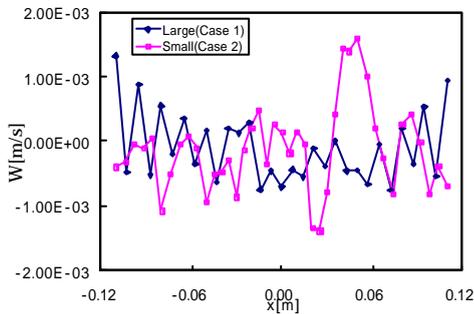


Fig.5 The velocity fluctuation for z on $z=4.00 \times 10^{-1}$ [m] and $y=0.00$ [m] at 400s.

いるのは、その部分における融液の速さが図5より大きいからである。

次に図7に融液から単結晶へ流出する熱流束の変動を示す。Case 1は時間の経過とともに減少するが、Case 2は熱流束の変動が一定に推移するが、所々、変化の大きいところが見られる。単結晶が1回転した際の同じ点における回転前後の温度差を調べると図8のようになる。Case 1の方がCase 2よりも変化量が小さい。なお、比較した時刻は計算時間で397秒と400秒で、固液界面直下のx軸上の $y=0.00$ [m]、 $z=4.00 \times 10^{-1}$ [m]における線上である。

5. 結言

本解析においてアスペクト比が小さくなることで以下の知見を得た。

1. Coriolis力により抑えられない、垂直方向の速度成分が増大した。

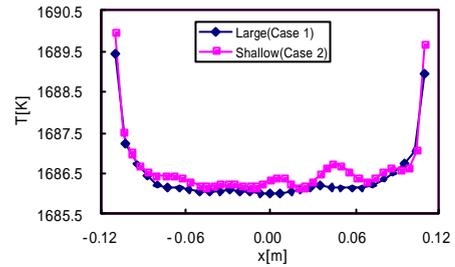


Fig.6 The temperature fluctuation on $z=4.00 \times 10^{-1}$ [m] and $y=0.00$ [m] at 400s.

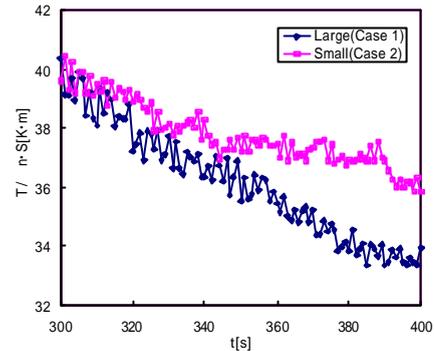


Fig.7 The expense of heat flux to the single crystal of each case.

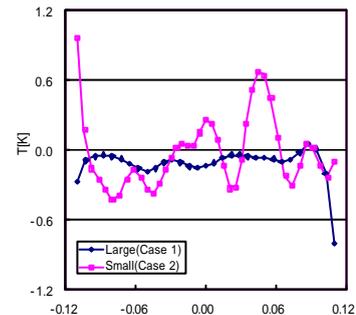


Fig.8 The difference between a rotation of single crystal on $y=0.00$ [m] and $z=4.00 \times 10^{-1}$ [m].

2. 固液界面近傍の温度が乱れた。
3. 固液界面から単結晶へ流出する熱流束が早く安定した。
4. 単結晶へ流出する熱流束が大きくなった。
5. 単結晶の回転による同地点における温度差が大きくなった。

以上のことから、融液の速度、温度共にアスペクト比に依存すると考えられ、よりよい制御条件を見出すべく、今後小さいアスペクト比に対する多様な制御条件下における解析をする必要があると思われる。本研究において、自由表面を理想化した状態で解析を行ったが、大口径CZ法では自由表面からの放射、マランゴニ効果を見逃すことができないため、今後これらを考慮した解析を行う必要がある。

参考文献

- (1) 志村, 半導体シリコン結晶工学, 丸善, 東京, (1993).
- (2) Kohno, H. et al., *CMES*, 2-2(2001), pp.155-170.
- (3) 梶島著, 乱流の数値シミュレーション, 養賢堂, 東京, (1999)
- (4) 佐藤, 松島, 北條, 第13回数値流体力学シンポジウム講演論文集(1999), pp.83.