

ВЛИЯНИЕ СКОРОСТИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ НА РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПРИМЕСИ ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ КРИСТАЛЛОВ МЕТОДОМ БРИДЖМЕНА НА ЗЕМЛЕ И В УСЛОВИЯХ МИКРОГРАВИТАЦИИ¹

Н.Г. Бураго, А.И. Федюшкин

Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва, Россия

В работе численно исследовано влияние скорости направленной кристаллизации на распределение легирующего галлия в кристаллах германия, выращиваемых методом Бриджмена с погруженным нагревателем [1,2].

Постановка задачи. Предполагается, что скорость роста кристалла скорость постоянна. Нестационарное течение расплава описывается уравнениями Навье-Стокса в приближении Буссинеска:

$$\begin{aligned} \partial u / \partial r + u / r + \partial w / \partial z = 0, \quad \rho_0 du / dt = -\partial p / \partial r + \mu(\Delta u - u / r^2) \\ \rho_0(dv / dt + uv / r) = \mu(\Delta v - v / r^2), \quad \rho_0 dw / dt = -\partial p / \partial z + \mu\Delta w - \rho_0 g \beta T \\ dT / dt = k_T \Delta T, \quad dC / dt = k_C \Delta C, \quad d / dt = \partial / \partial t + u \partial / \partial r + w \partial / \partial z \end{aligned}$$

где использованы традиционные обозначения. Граничные условия приняты в виде:

$$\begin{aligned} r = 0, 0 \leq z \leq H : u = 0, v = 0, \partial w / \partial r = 0, \partial T / \partial r = 0, \partial C / \partial r = 0; \\ 0 \leq r \leq R, z = 0 : u = 0, v = 0, w = -W_s, T = T_m, k_C \partial C / \partial z = W_s C (1 - k_0); \\ r = R, 0 \leq z \leq h : u = 0, v = 0, w = 0, \partial T / \partial r = 0, \partial C / \partial r = 0; \\ r = R, h < z \leq H : u = 0, v = 0, w = 0, T = T_{CR}(z), \partial C / \partial r = 0; \\ (r, z) \in S_{SH} : u = 0, v = 0, w = 0, T = T_{SH}(r, z, t), \partial C / \partial n = 0; \\ 0 \leq r \leq R, z = H : u = 0, \partial v / \partial z = 0, \partial w / \partial z = 0, T = T_Z, C = C_{02}. \end{aligned}$$

Начальные условия были приняты следующего вида:

$$\begin{aligned} t = 0, 0 \leq r \leq R, 0 \leq z \leq h : u = 0, v = 0, w = -W_s, T = T_m, C = C_{01} \\ t = 0, 0 \leq r \leq R, h < z \leq H : u = 0, v = 0, w = -W_s, T = T_m, C = C_{02} \end{aligned}$$

Здесь W_s - скорость роста кристалла, $T_m = 937^\circ\text{C}$ - температура плавления германия, C - концентрация примеси галлия, μ, k_T, k_C - коэффициенты вязкости, теплопроводности и диффузии примеси, β - коэффициент сил плавучести, $g_0 = 9.81 \text{ м/сек}^2$ - ускорение силы тяжести Земли. Величины с индексами в правых частях граничных и начальных условий полагаются заданными. Подробнее постановка данной задачи и метод решения описаны в работах [1,2]. Область решения показана на рис. 1-2, где $R = 3.36 \text{ см}$ - радиус тигля, $\delta = 0.1 \text{ см}$ - размер зазора, $h = 0.8 \text{ см}$, S_{SH} - область погруженного нагревателя, отмеченная цифрой 1 на рис.2. В данной работе рассматриваются случаи без вращений

¹ Материалы XXI международной конф. по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2019) - М.: Изд-во МАИ, 2019. С. 411-413. ISBN 978-5-4316-0589-5.

тигля и погруженного нагревателя. Влияние вращений тигля и погруженного нагревателя на распределение примеси было показано авторами ранее в работе [3].

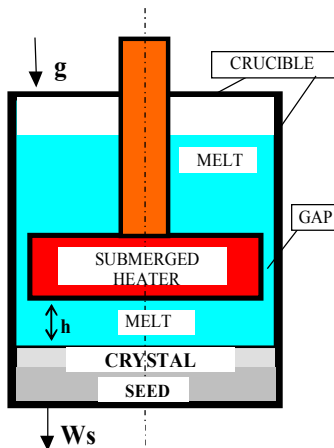


Рис.1. Схема выращивания кристаллов методом Бриджмена с погруженным нагревателем.

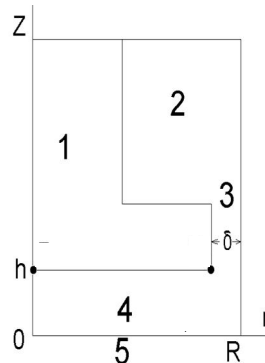


Рис.2. Схема расчетной области в 2D осесимметричной математической модели.

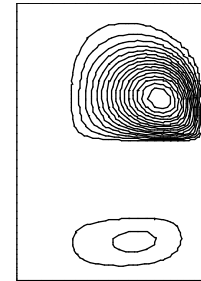


Рис.3. Изолинии функции тока

Метод решения. Численное решение получено итерационно безматричным методом конечных элементов с кусочно-линейной аппроксимацией решения на треугольных конечных элементах и с коррекцией вязкости по методу Самарского.

Результаты. На рис. 3 представлены изолинии функции тока для $g=g_0$ для скорости роста $W_s=1.8\text{м/сек}$. Данные результаты показывают влияние погруженного нагревателя на интенсивность течения в расплаве у фронта кристаллизации.

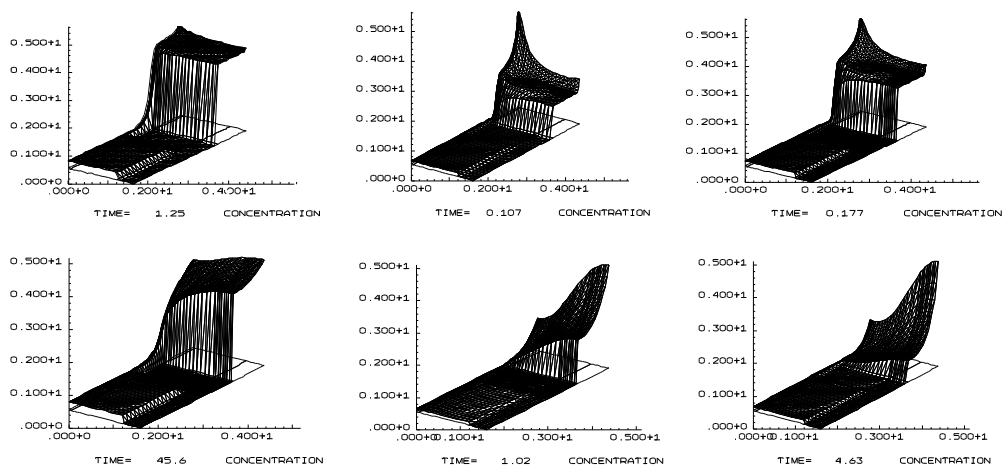


Рис. 4. Зависимость концентрации Ga в расплаве Ge от скорости роста кристалла: 0.36 см/час - левая колонка, 1.8 см/час - средняя колонка, 3.6см/час - правая колонка) на Земле (ряд 1) и в космосе (ряд 2)

Влияние ускорения силы тяжести и скорости роста кристаллов на распределение галлия Ga в кристалле германия Ge показано на рис. 4 и 5 для трех случаев скорости роста: $W_s = 0.36\text{ см/час}$, 1.8 см/час , 3.6 см/час и двух ускорений силы $g = g_0$ и $g=0.001g_0$.

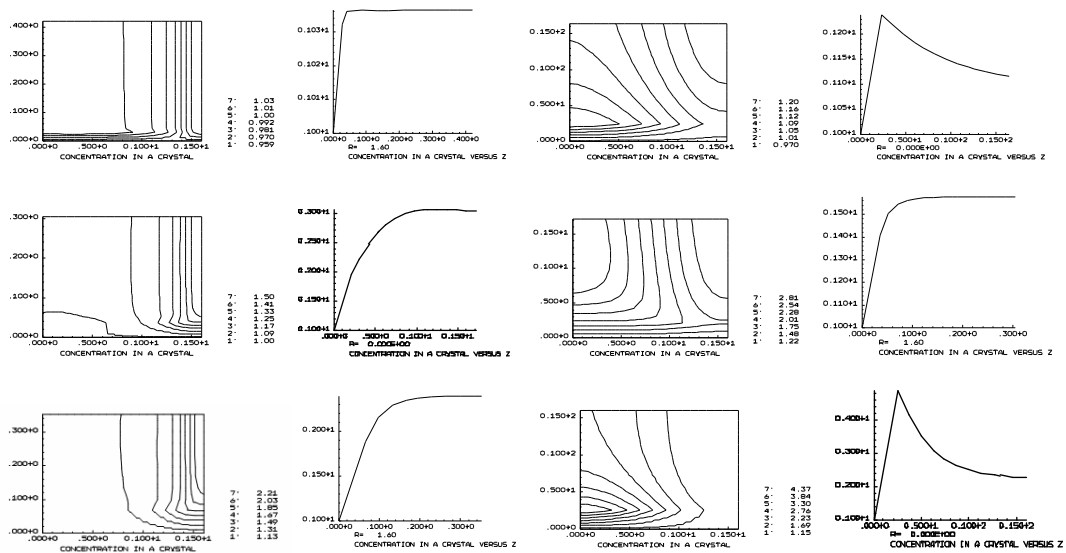


Рис.5 Изолинии концентрации галлия в кристалле германия (колонки 1 и 3) и распределения максимальной концентрации галлия по длине кристалла германия для разной скорости роста: 0.36 см/час – ряд 1, 1.8см/час – ряд 2, 3.6см/час – ряд 3. Сила тяжести $g = g_0$ (колонки 1 и 2) и $g=0.001g_0$ (колонки 3 и 4).

Выводы. Расчетами установлено, что распределение примеси на Земле и в космосе существенно различно. Наиболее однородное распределение примеси в кристалле на Земле и в космосе получается при скорости кристаллизации $W_s=1.8\text{см/час}$.

Список литературы

- 1 Бурого Н.Г., Полежаев В.И., Федюшкин А.И., Гольшиев В.Д., Гоник М.А., Цветовский В.Б. Экспериментальное и математическое исследование распределения примеси при выращивании монокристаллов в условиях осевого теплового потока (ОТФ1а -метод). Труды второго российского симпозиума "Процессы тепломассопереноса и рост монокристаллов и тонкопленочных структур". Обнинск. Россия. 1997. С.47-60.
2. Fedyushkin Alexey, Bourago Nicolai, Polezhaev Vadim, Zharikov Evgenii, "The influence of vibration on hydrodynamics and heat-mass transfer during crystal growth", J. of Crystal Growth. 2005. V. 275. N. 1-2. P. e1557 - e1564.
3. Бурого Н.Г., Пунтус А.А., Федюшкин А.И. Влияние вращения на распределение примеси при выращивании кристаллов методом Бриджмена с погруженным нагревателем. Материалы XII Международной конференции по прикладной математике и механике в аэрокосмической отрасли (NPNJ'2018), 24-31 мая 2018 г., Алушта, 175-177, 2018