

## 26aA09

## 石英るつぼからシリコン融液に混入する酸素の動的挙動に関する数値解析

## Numerical study on the oxygen transport phenomena from silica to silicon melt

信大教, 静大工\* 酒井奨, 黄新明, 干川圭吾, 岡野泰則\*

Shinshu Univ., Shizuoka Univ.\* S.Sakai, X.Huang, K.Hoshikawa and Y.Okano\*

In order to investigate the oxygen transport phenomena from silica glass to silicon melt, numerical simulation based on the drop experiment<sup>1)</sup> has been carried out. In this analysis, the chemical reaction and diffusion transport phenomena at the free surface of silicon drop were considered, and the effect of the magnetic field on the oxygen transport was also examined.

【緒言】 Cz-Si 単結晶育成中に石英るつぼから混入する酸素は、結晶の品質に大きな影響を及ぼす。そこで本解析では、酸素移動に関して化学反応と拡散移動を加味した条件式を数値解析に導入し、算出された酸素溶解速度について、Si ドロップ実験<sup>1)</sup>の結果と比較検討した。またドロップに縦磁場を印加し、三相界面(石英/Si 融液/ガス)付近の酸素溶解速度の算出を試みた。

【解析方法】 Si 融液の表面での化学反応とガス側への拡散移動について、反応自由エネルギー変化 $\Delta G$ とガス側の濃度境界膜厚み $\delta$ を考慮した(1)式を導入した。解析は二次元軸対称定常とし、球座標形で表現された流関数・渦度表示の Navier-Stokes 式、エネルギー方程式および拡散方程式を用い、無次元化および有限差分法による離散化を施し、SOR法により解析を行なった。解析条件はドロップ実験<sup>1)</sup>に基づいて設定し、融液表面には輻射および雰囲気ガスによる熱損失と表面張力差によるマランゴニ対流を考慮した。また磁場印加を模擬した解析では Maxwell 方程式の導入と Navier-Stokes 式の外力項に Lorentz 力を考慮した。

$$-D_m(\partial C/\partial r) = (D_g/RT\delta)(P/C_{Si}) \cdot \exp(-\Delta G/RT) \cdot C \quad (1)$$

【結果および考察】 Fig.1 に酸素溶解速度の圧力依存性について解析結果と実験結果を示す。表面の酸素濃度を $C_{sur}=0$ と仮定した解析結果では、溶解速度の圧力依存性が示せないが、(1)式を適用することによりうまく説明できた。さらに Fig.2 には Si ドロップに縦磁場を印加しなかった場合(a)と印加した場合(b)の流れ図、温度分布図および酸素濃度分布図を示す。磁場を印加しない場合(a)、ドロップ内全体を攪拌する流れが生じているのに対し、磁場を印加した場合(b)では三相界面付近でのみ対流が生じている。このことから、ドロップに縦磁場を印加すれば三相界面付近でのみ酸素の溶解が進行すると考えられ、三相界面付近での溶解速度値の予想が可能になるものと考えられる。

【引用文献】 1) S.Sakai et al., Jpn.J. Appl. Phys., **38** (1999) pp.1847-1851.

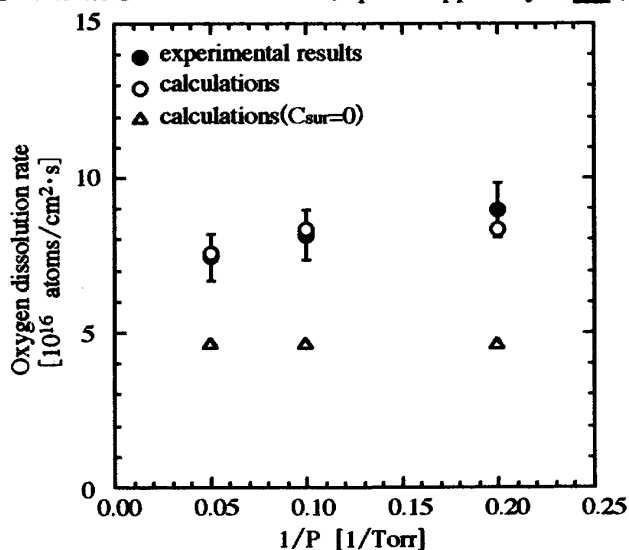


Fig.1 Oxygen dissolution rates obtained by the experiments and calculations at 1450°C using 50mg-silicon drop.

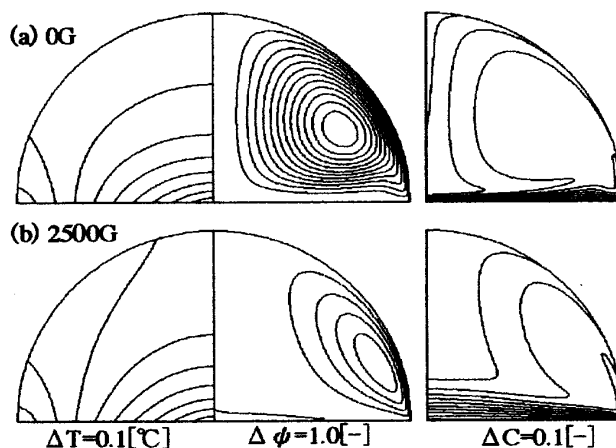


Fig.2 Temperature(left), stream function(center) and oxygen concentration(right) distributions in 50mg-silicon drop without(a) and with(b) magnetic field ( $Pr=0.017$ ,  $Gr=2.6 \times 10^3$ ,  $Ma(T)=3.0 \times 10^4$  and  $Ma(C)=2.7 \times 10^3$ ).