

微小重力環境下における FZ 法を用いた Si/Ge 結晶成長に関する数値解析 Numerical study on the crystal growth of Si/Ge by using FZ method under microgravity fields

○正 岡野 泰則 (静岡大)、水口 尚 (静岡大)

Yasunori OKANO and Hisashi MINAKUCHI, Shizuoka University, Johoku 3-5-1, Hamamatsu 432-8561, JAPAN

In order to have better predictions for the FZ growth of Si/Ge crystal under microgravity field, a numerical simulation of the Marangoni convection in a three-dimensional Full-zone configuration was performed. In early stages of the simulation, the flow and temperature fields were still 2-dimensional, and 2 vortexes with the same size existed in the melt. However, the concentration field exhibited a three-dimensional behaviour even the flow and temperature fields were still axisymmetric. As time proceeds, the flow, temperature and concentration fields become three-dimensional. In the case of large Marangoni number, size of the vortexes periodically changed in spite of assumed axisymmetric thermal boundary conditions. It was shown that rotation of the crystal and feed was beneficial in growing axisymmetrically uniform crystals.

Key Words: Marangoni Convection, FZ, Si/Ge, Microgravity, Numerical simulation

1. 緒言

Floating Zone (FZ)法はるつぼからの汚染が無い、極めて高品質な結晶の育成が可能である。その反面、地上では重力の影響により極めて少量の融液の保持のみが可能であるため、大口径の結晶を育成することは困難である。従って大口径な結晶の育成には微小重力環境が極めて有効である。しかし、融液量の増大に伴いマランゴニ数が増大し、三次元構造を有する非定常なマランゴニ対流が顕著となることが予想される。この非定常なマランゴニ対流は育成結晶中に成長縞などのマイクロな濃度不均一をもたらすことが予想される。そこで微小重力環境を新しい材料作製の場として高度に利用するためには、マランゴニ対流現象の理解とその制御法の確立が必要である。この観点より FZ 内の三次元マランゴニ対流に関し、多くの数値解析が報告されている。しかしそれらのほとんどはハーフ・ゾーン内のマランゴニ対流に関するものであり⁽¹⁾⁻⁽⁶⁾、実際の結晶成長で用いるフローティング・ゾーンとは形状が異なっている。本研究では微小重力環境下における実際の Si/Ge 結晶実験⁽⁶⁾を模擬するため、フル・ゾーン型の FZ 内マランゴニ対流に関し数値解析を行った。

2. 数値解析

Fig.1 に解析モデル図を示す。上下の同一径の固体（上部：原料、下部：育成結晶）に挟まれた Si/Ge 融液を外部より以下で表される温度分布で加熱した場合を想定した。

$$T_a(z) = T_C + (T_H - T_C) \exp\left\{-\left(z - \frac{L}{2}\right)^2 / 0.04\right\} \quad (1)$$

完全な無重力状態を想定し、自然対流および液中の重力による変型は無いとした。また固液界面形状は平坦とし、潜熱の影響は無視した。融液は非圧縮性ニュートン流体とした。解析基礎式には三次元円筒座標表示の連続式、Navier-Stokes 式、エネルギー方程式、Si の拡散方程式を用いた。Si/Ge の特徴は Si の偏席係数が 5 と極めて大きい点にある⁽⁶⁾。このため、育成結晶内に大量の Si が取り込まれ、結晶成長界面付近では Ge リッチとなる。Ge の表面張力の値は Si の表面張力に比べ小さいため、温度差によるマランゴニ対流に加え、結晶成長界面から原料に向かう濃度差マランゴニ対流が発生することが予想される。そこで、自由界面上の境界条件として、温度差と濃度差の

両方のマランゴニ対流を考慮した。

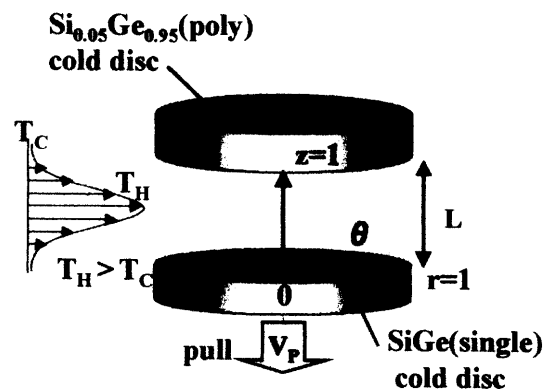


Fig. 1 -- Schematic configuration of the model

基礎式及び境界条件を無次元化した後、スタaggerド格子上に有限差分法で離散化し HSMAC 法を用い解析した。格子は $r \times \theta \times z = 30 \times 30$ (あるいは 36×30) とした。また物性として $Pr = 7.71 \times 10^{-3}$, $Sc = 22.5$ を用い、アスペクト比を 1、 $V_p = 1.3888 \times 10^{-7}$ m/s とした。また初期値には熱伝導のみの場合の解析結果を用いた。

3. 結果および考察

Figs.2&3 に濃度差マランゴニ対流のみが存在すると仮定した場合の解析結果を示す。自由界面上を下から上への対流が発生するが、その強さは弱く、完全な軸対称流であった。しかも時間経過に伴い自由界面上の濃度分布が均一化するため、対流強度は時間と共に更に弱くなる。

Fig.4 に温度差マランゴニ対流と濃度差マランゴニ対流が共存するときの対流速の経時変化を示した。温度差マランゴニ対流により誘起される速度は濃度差マランゴニ対流により誘起される対流に比べ大きく、しかもその向きが逆であるため、濃度差マランゴニ対流の影響はほとんど表れなかった。 $Ma_T = 5 \times 10^3$ の時は時間が経過するに伴い対流は安定化するのに対し、 $Ma_T = 1 \times 10^4$ の場合には振動し続けた。それぞれのマランゴニ数における等速度面の経時変化を Figs.5 & 6 に示す。いずれも最初は上下の対流の大きさの等しい軸対称流であったが、時間経過に伴い、4

回対称の等速度面を示した。 $Ma_T=5 \times 10^3$ の時はこのままの形を維持し、三次元構造を有する定常流となったが、 $Ma_T=1 \times 10^4$ の場合には時間経過に従い、4回対称の構造が崩れ、3回対称に近づくことが判った。また周囲の温度は軸対称に(1)式で与えたにもかかわらず、自由界面上で θ 方向の流れが発生することも確認された(Fig.7)。

Fig.8に育成結晶/融液界面上の濃度分布に及ぼす回転の影響について示した。原料および育成結晶ともに5rpmで互いに逆向きになるよう回転を印加した。回転を印加し無い場合には結晶上の濃度分布は不均一であったのに対し、回転を印加することにより濃度分布は軸対称に近くなった。

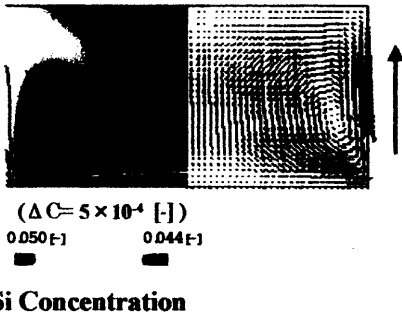


Fig.2 Concentration distribution (left half) and velocity vector (right half) at $t=150$ sec when $Ma_T=0$ and $Ma_c=1 \times 10^4$.

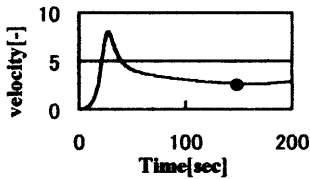


Fig.3 The time dependency of flow strength ($|V|$) when $Ma_T=0$ and $Ma_c=1 \times 10^5$.

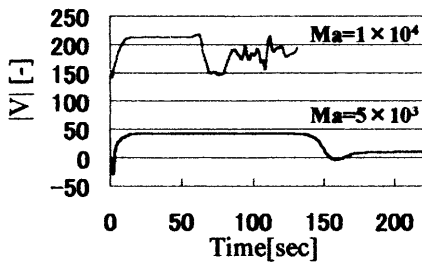


Fig.4 The time dependency of flow strength ($|V|$) when the only thermal Marangoni convection presents.

引用文献

(1) Lappa, M. et al., Int. J. Heat Mass Trans., 44 (2001), 1983.
 (2) Shevtsova, V.M., et al., Phys. Fluids, 13 (2001), 2851.
 (3) Zheng, Z. et al., Int. J. Heat Mass Trans., 44 (2001), 3765.
 (4) Nienhuser Ch., and H.C. Kuhlmann, J. Fluid Mech., 458 (2002), 35.
 (5) Imaishi, N. et al., J. Crystal Growth, 230 (2001) 164.
 (6) Campbell, T. A. et al., J. Crystal Growth, 226 (2001) 231.

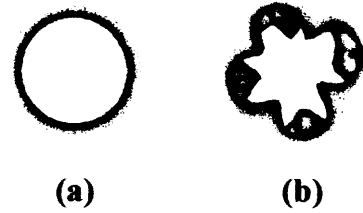


Fig.5 The iso-velocity face when $Ma_T=5 \times 10^3$ and $Ma_c=0$ at $t=100$ sec (a) and $t=200$ sec (b).

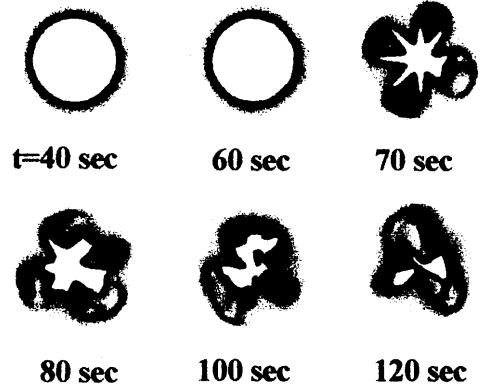


Fig.6 The time-dependency of the iso-velocity face when $Ma_c=1 \times 10^4$ and $Ma=0$

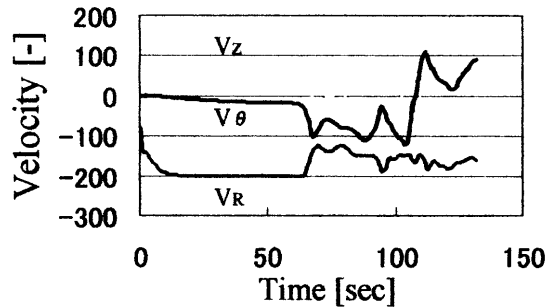


Fig.7 The time dependency of velocity when $Ma_T=1 \times 10^4$ and $Ma_c=0$.

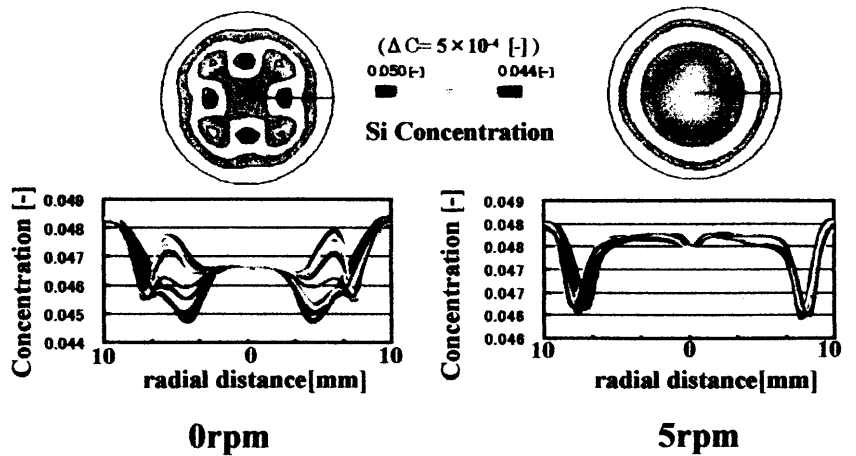


Fig.7 Effect of upper and lower disk rotation on the silicon concentration distribution along the growth interface when $Ma_T=5 \times 10^3$ and $Ma_c=0$ at $t=185$ sec. The upper column shows the distribution of the silicon concentration along the growth interface, and the lower column shows this value in the radial direction.