

Numerical study on fluid flow in a melt during crystal growth of Si/Ge by FZ method

○正 岡野泰則 (静大・創科院) 学 平田邦紘 (静大・院)

Yasunori OKANO, Shizuoka University, Johoku3-5-1, Naka-ku, Hamamatsu

Kunihiro HIRATA, Shizuoka University, Johoku3-5-1, Naka-ku, Hamamatsu

## 1. Introduction

FZ(Floating Zone)法はるつぼを用いない結晶作製法であり、汚染の無い高品質な単結晶の育成に適している。FZ法は融液体積が少なく自由界面積が大きいので、マランゴニ(Ma)対流の影響が顕著となる。そこで高品質な結晶を育成するための装置設計には Ma 対流の理解・制御が必須条件である。この観点より、多くの研究が行われてきている。

演者らは、従来の温度差マランゴニ対流に加え濃度差マランゴニ対流を考慮することにより既往の実験結果[1]を良好に説明しうることを示した[2]。今回は、対流構造が3次元性を呈する高 Ma 数域において、温度差・濃度差 Ma 対流共存効果による対流構造変化について調査した。

## 2. Numerical method

Fig.1 に解析モデル図を示した。本解析では完全無重力場を仮定し、自由界面を平坦であるとした。解析基礎式として連続式、Navier-Stokes 式、エネルギー方程式、拡散方程式を用いた。これら基礎式を無次元化後、有限体積法で離散化し SIMPLE 法により数値解析を行った。対流項においては QUICK スキームを使用した。湾曲した固液界面を扱うため、基礎式及び境界条件には一般座標変換を行った。

固液界面位置は融点と一致すると仮定し、Si/Ge を想定し  $Pr=0.01$ ,  $Sc=29.4$  で解析した。

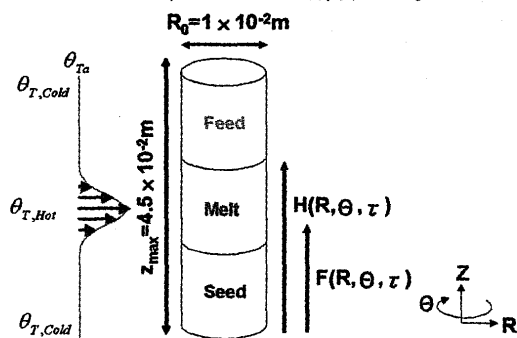


Fig.1 Schematic diagram.

## 3. Results and discussions

### Three-dimensional thermal Ma convection

Fig.2 は温度差 Ma 数( $Ma_T$ )が 7,500 のときの各角度における融液部温度分布 (左) と速度ベクトル (右) を示している。臨界温度差 Ma 数 5,000 を超えると対流は 2 次元軸対称構造から 3 次元構造へと変化した。この値は他の解析と良好に一致している[3]。また対流構造は 3 回対称性を示した。Fig.3 は各溶融部高さでの濃度分布を示した。濃度分布は対流の影響を強く受け周方向に濃度勾配が生じている。これにより、濃度差 Ma 対流の影響が周方向に生じることが考えられ、対流構造が大きく変わることが予想できる。

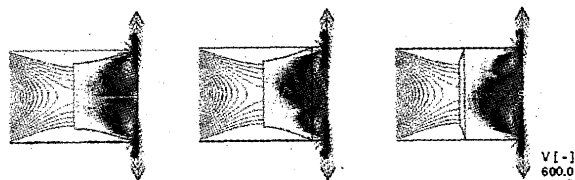


Fig.2 Temperature distribution (left,  $\Delta T=1.50K$ ) and velocity vector (right) on each angle at  $Ma_T=7,500$  and  $Ma_C=0$ .

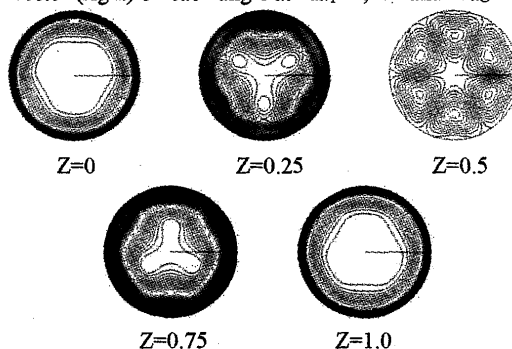


Fig.3 Concentration distribution in the liquid on each level.

### Coexistence of the thermo-solutal Ma convection

#### (i) Low thermal Ma number

対流構造が3次元性を呈する前の低温度差 Ma 数域において濃度差 Ma 数との共存効果を調査した。Fig.4 (a) は温度差 Ma 数 2,500、濃度差 Ma 数 150 における濃度分布 (左) と速度ベクトル (右) を示している。温度差 Ma 対流によって上下対称に生じる渦が濃度差 Ma 対流により下部では弱められ、上部では強まっていることが判る。Fig.4 (b) では温度差 Ma 数 2,500 における各濃度差 Ma 数 (0, 150, 300) において自由界面上での速度分布を示している。濃度差 Ma 数 150 のとき、第 3 の渦が結晶成長面付近で発生していることが確認された。これは実験によって提唱されている濃度差 Ma 数による不安定な結晶成長を説明しうる結果である。さらに、濃度差 Ma 数 300 においては温度差 Ma 数による下部の渦は完全に消滅している。

#### Effect of rotation

FZ 法において、Feed ロッドと Seed ロッドを反対方向に同速度で回転させ、対流構造・濃度分布への回転効果について調査した。Fig. 5 は各回転速度 (0, 10, 20rpm) における濃度分布 (左) と対流構造 (右) を示している。回転による遠心力により溶融部内の攪拌効果が得られた。しかし、固液界面形状は現解析領域では大きな影響はなかった。Fig.4 に示された不安定な結晶成長は回転により抑制される。しかしながら、回転数が 20rpm のときには対流構造は例え 2 次元対流であってもより複

雑となり、これが結晶の品位を逆に悪くすると考えられる。つまり、高品質な結晶作成には適正な回転数があることが判る。

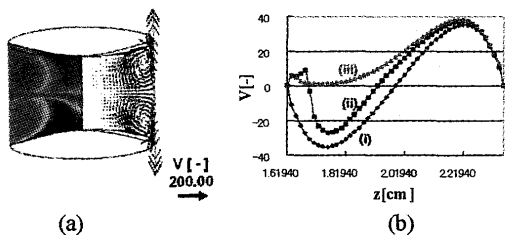


Fig. 4 Effect of coexistence of thermal and solutal Marangoni convection (a) Concentration distribution and velocity vector at  $Ma_T=2500$ ,  $Ma_C=150$ , (b) Velocity distribution along the free surface at  $Ma_T=2500$  and (i)  $Ma_C=0$ , (ii)  $Ma_C=150$ , (iii)  $Ma_C=300$ .

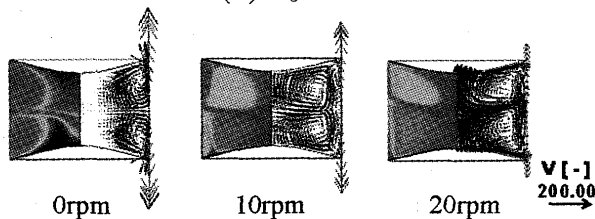


Fig. 5 Effect of rotation at  $Ma_T=2500$ ,  $Ma_C=300$ ; Concentration distribution (left half) and velocity vector (right half).

**(ii) High thermal Ma number**

次に3次元性を示す高温度差Ma数域における濃度差Ma対流との共存効果について調査した。Fig. 6は温度差Ma数7,500における各濃度差Ma数(0, 200, 300)での融液部等速度分布(周方向、径方向速度)を各融液部高さにおいて示している。濃度差Ma数の増加に伴い3回対称性を示していた3次元対流構造が4回対称へと構造変化した。温度差Ma数に対して低い濃度差Ma数においても対流構造全体に大きく影響を及ぼしている。これは固液界面形状が平坦であると仮定した解析[4,5]と同様の傾向を示した。

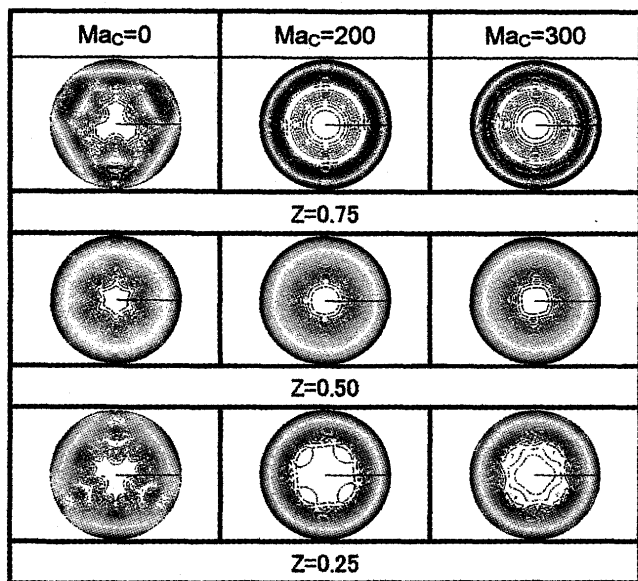


Fig. 6 Velocity distribution on each height in liquid zone at  $Ma_T=7,500$ .

Fig. 7は各濃度差Ma数における周方向濃度分布と速度ベクトルを示している。 $Ma_C=0$ 場合は、上下部にわずかながら周方向速度が存在するが、 $Ma_C$ が増加するに従って、下部の周方向速度が加速されることが判った。そのことにより、下部の濃度分布に大きく影響を及ぼしている。

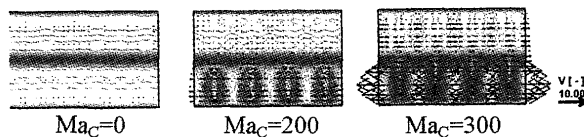


Fig. 7 Concentration profile of silicon ( $\Delta C=0.01$ ) and circumferential velocity vector along free surface at  $Ma_T=7,500$ .

Fig. 8は温度差Ma数7,500での各濃度差Ma数における結晶成長面付近での濃度分布を示している。温度と異なり濃度は対流構造に大きく影響を受けている。これはPr数よりSc数がかかなり大きいことが原因である。

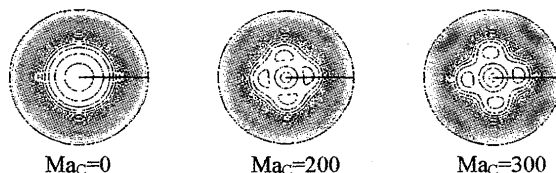


Fig. 8 Concentration profile ( $\Delta C=0.01$ ) near crystal growth interface ( $Z=0.025$ ) at  $Ma_T=7,500$ .

**4. Conclusions**

固液界面形状の湾曲を考慮したFZ内Ma対流に関する3次元数値解析を行った。

**(i) 高温度差Ma数域**

外部から加える熱がたとえ軸対象であっても、温度差Ma数が臨界値を越えると対流構造の3次元化が起き、構造は3回対称性を示した。

**(ii) 温度差・濃度差Ma対流の共存**

温度差・濃度差Ma対流の共存効果は低温度差Ma数において濃度差Ma対流を考慮すると、実験で提案された濃度差Ma対流による第3の渦を結晶成長面付近で確認された。また、3次元性を示す高温度差Ma数域において濃度差Ma対流を考慮すると、対流構造全体に大きく影響を及ぼした。これは固液界面形状が平坦であると仮定した解析と同様の傾向を示した。

**References**

- (1) T. A. Campbell, M. Schweizer, P. Dold, A. Croll, K. W. Benz, *J. Crystal Growth*, **226**, 231-239, 2001.
- (2) K. Hirata, H. Minakuchi, Y. Okano, S. Dost, *18th ISTP*, 2007.
- (3) M. Lappa and R. Savino, *J. Computational Physics*, **180**, 751-774, 2002.
- (4) H. Minakuchi, Y. Okano, S. Dost, *J. Crystal Growth*, **266** issue 1-3, 140-144, 2004.
- (5) H. Minakuchi, Y. Okano, *Int. J. Materials and Product Technology*, **22**, 2005