

УДК 536.25

**Сопряженный конвективный теплообмен  
кристалла с окружающей средой  
в режиме термогравитационной конвекции  
в методе Чохральского\***

**В.С. Бердников, А.М. Григорьева, М.С. Клещенок**

*Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск*

E-mail: berdnikov@itp.nsc.ru

Приведены результаты численных исследований сопряженного конвективного теплообмена в системе, геометрически подобной системе “кристалл–газ–корпус” ростовой камеры в методе Чохральского. Методом конечных элементов решены уравнения термогравитационной конвекции в приближении Буссинеска в переменных: температура, функция тока и вихрь в цилиндрических координатах. Исследована теплоотдача от кристалла в диапазоне чисел Грасгофа  $100 \leq Gr \leq 10^4$  при фиксированной геометрии расчетной области. Изучена зависимость полей температуры в кристалле кремния от интенсивности конвекции в газе (аргоне).

**Ключевые слова:** рост кристаллов, сопряженный теплообмен, термогравитационная конвекция, поля температуры в кристаллах, численное моделирование, метод конечных элементов.

**Введение**

Метод Чохральского наиболее широко применяется для получения монокристаллов кремния для силовой и микроэлектроники, специального приборостроения, как исходный материал для производства солнечных батарей и т. д. Качество монокристаллов и однородность распределения электрофизических параметров кристаллов по объему существенно зависят как от условий перехода от расплава к твердому телу, так и от тепловой истории кристалла [1–7]. Тепловая история кристалла — изменение поля температуры в кристалле в процессе его вытягивания и переход от пластичного к упругому твердому телу определяется конкретными условиями теплообмена кристалла с окружающей средой в ростовой камере. На разных стадиях от затравления, разращивания и вытягивания цилиндрической части кристалла и до завершающей стадии процесса — выращивания обратного конуса и отрыва от расплава, условия теплоотдачи от кристалла существенно меняются. Качество кристаллов сильно зависит от изменяющихся полей температуры и термических напряжений в его объеме на всех стадиях процесса вытягивания.

---

\* Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант 12-08-00487а) и СО РАН (междисциплинарный интеграционный проект № 34-2009 и проект П.7.5.10).

Процессы теплообмена в области, занятой расплавом, и особенно у фронта кристаллизации являлись объектом многочисленных исследований [1–4, 8–17]. Тем не менее, особенности процессов конвективного теплообмена в расплаве кремния до конца не изучены. Обусловлено это тем, что поскольку общемировой тенденцией является непрерывное увеличение диаметра кристаллов, то, соответственно, растут объемы расплава, абсолютные размеры и меняется конфигурация тепловых узлов ростовых установок. Конвективные течения расплавов, формируемые комплексом объемных и поверхностных сил, неизбежно становятся турбулентными. Конвективный теплообмен на фронте кристаллизации происходит в режимах ламинарно-турбулентного перехода в пограничных слоях. При этом и в режимах свободной конвекции, и в режимах смешанной конвекции теплообмен происходит в условиях с существенной радиальной неоднородностью. Как было показано в работах [11, 12], режимы ламинарно-турбулентного перехода существенно зависят не только от величин основных безразмерных параметров (чисел Грасгофа, Марангони и Рейнольдса), но и от абсолютных размеров системы.

Получать достоверные результаты о процессах конвективного теплообмена в высокотемпературных расплавах крайне сложно и практически невозможно в реальных технологических условиях. Процессы теплоотдачи с образующих кристалла на разных стадиях технологических процессов не менее сложны и изучены в еще меньшей степени. Соответственно, нет достоверных данных о корреляции качества (локальных электрофизических параметров) кристаллов с условиями роста и с зависимостью полей температуры и термических напряжений от времени [1, 2, 5–7].

Данные об условиях роста, особенно о локальных характеристиках конвективного теплообмена получены в основном методами физического и численного моделирования. Развитие методов глобального моделирования сдерживается реальными возможностями современных компьютеров и отсутствием тестового физического эксперимента с высоким метрологическим уровнем, необходимым для изучения полей скорости и температуры на физических моделях современных методов получения кристаллов из расплавов. Результатов физического моделирования крайне мало, особенно если речь идет о моделировании процессов в современных ростовых установках, на которых вытягиваются монокристаллы диаметром до 400 мм (планируется 508 мм). Физических моделей для исследования процессов теплоотдачи от кристаллов в окружающую среду практически нет. Методов контроля теплоотдачи с образующей кристаллов и соответственно реальных данных, исходных для постановки задач и тестовых для расчетов полей температуры в кристаллах, также практически нет.

Физическое и численное моделирование и в глобальной постановке задачи, и в т. н. частичном моделировании сложных процессов неизбежно проводится при идеализированной постановке задачи. Развитие методов частичного моделирования остается практически важным и нужным, поскольку позволяет получать вполне надежные результаты для отдельных автономных систем, вычленившихся из общего сложного процесса. В рамках частичного моделирования можно получить фундаментальные результаты о зависимости теплообмена от отдельного параметра в широких диапазонах его изменения при фиксированных значениях других параметров многопараметрической системы. В первую очередь это относится к возможности автономного исследования систем “тигель–расплав–кристалл” и “кристалл–окружающая среда–стенки ростовой камеры”. Из результатов исследования первой системы следует, что существуют режимы роста кристаллов с практически плоским фронтом [14–16]. Температура кристаллизации для кремния является строго заданным параметром. Кроме того, в реальной технологии для управления полем температуры в кристалле применяются экраны различной формы

и локализации. В том числе применяются экраны кольцевой формы, изолирующие растущий кристалл от излучения с поверхности расплава. Таким образом, в качестве первого шага можно и нужно провести исследования теплообмена в предельно простой системе “кристалл–окружающая среда–стенки ростовой камеры”, последовательно решая серию все более сложных задач. Первая стадия — исследования свободноконвективного теплообмена при фиксированной геометрии: с плоским фронтом кристаллизации и с теплоизолированной поверхностью расплава. На второй стадии необходимо учесть теплообмен монокристалла и свободной поверхности расплава с газовой средой, а затем учесть продувку газа через ростовую камеру. На следующей стадии — изучить сложный сопряженный теплообмен в режимах радиационно-конвективной теплоотдачи от кристаллов. На всех стадиях предполагаются исследования в сопряженной постановке, т. е. определение взаимосвязанных полей температуры в газе и кристалле при фиксированных температурах на фронте кристаллизации и на стенках ростовой камеры с ростом перепада температуры. Одна из задач данных исследований — необходимость оценки относительной роли каждого из механизмов теплообмена. Это необходимо для целенаправленного и обоснованного поиска методов управления режимами теплоотдачи от кристаллов и управления полями температуры в них. В настоящей работе основной объект исследований — поле температуры в кристаллах. Прогнозирование полей температуры в зависимости от условий теплоотдачи необходимо для прогнозирования дефектной структуры в монокристаллах [18].

Ниже представлены результаты первой части численных исследований теплообмена кристалла кремния с окружающей средой в режиме термогравитационной конвекции для одной из промежуточных стадий технологического процесса. В дальнейшем авторами планируется исследование влияния на все перечисленные выше характеристики системы относительных размеров и всего комплекса механизмов теплоотдачи.

### Постановка задачи

Проведены численные исследования теплоотдачи от кристалла в окружающую среду в режиме стационарной термогравитационной конвекции при фиксированной геометрии, характерной для промежуточной стадии технологического процесса. Задача решается в осесимметричной постановке для ламинарных режимов течения в расчетной области. На рис. 1 представлена только правая часть расчетной области, здесь же показана система координат. Здесь ось симметрии обозначена как  $\Gamma_0$ , граница  $\Gamma_1$  и область  $\Omega_1$  относятся к составному телу “кристалл–затравка–шток”, для которых коэффициент теплопроводности имеет постоянное значение, равное теплопроводности кремния при температуре 1200 К. Область, занятая газом между границами  $\Gamma_1$  и  $\Gamma_2$ , обозначена как  $\Omega_2$ . Граница  $\Gamma_2$  включает в себя правую вертикальную и верхнюю горизонтальную границы изотермической холодной границы ростовой камеры. Граница

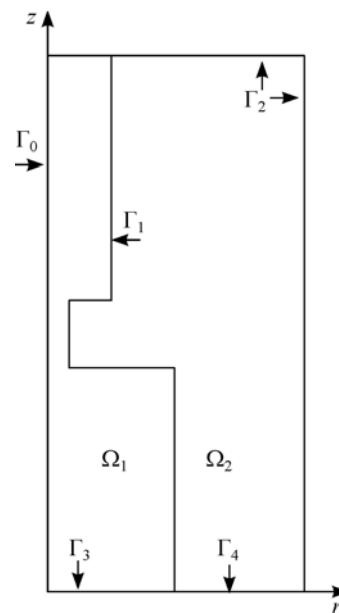


Рис. 1. Схема расчетной области.

контакта штока с верхней стенкой камеры холодная, включена в  $\Gamma_2$ . Нижний торец кристалла — фронт кристаллизации, граница раздела кристалла с расплавом  $\Gamma_3$  — горячая, изотермическая. Считаем, что поверхность расплава закрыта кольцевым теплоизолирующим экраном —  $\Gamma_4$ . На границах раздела твердых тел и газа, твердых тел между собой заданы условия идеального теплового контакта, т. е. неразрывность поля температуры и равенство тепловых потоков.

В соответствии с этой физической моделью на границах расчетной области поставлены условия для температуры  $T$  и скорости в безразмерном виде: 1)  $T|_{\Gamma_2} = 0$ ; 2)  $T|_{\Gamma_3} = 1$ ; 3)  $(\partial T / \partial z)|_{\Gamma_4} = 0$ ; 4) условия идеального теплового контакта на границах раздела твердого тела и газа:  $T|_{\Gamma_{i+}} = T|_{\Gamma_{i-}}$ ,  $(\partial T / \partial n)|_{\Gamma_{i+}} = (\lambda_k / \lambda_r)(\partial T / \partial n)|_{\Gamma_{i-}}$ , где  $\lambda_k$  — коэффициент теплопроводности кристалла кремния,  $\lambda_r$  — коэффициент теплопроводности аргона,  $n$  — нормаль к рассматриваемой поверхности; 5) на оси симметрии  $(\partial T / \partial n)|_{\Gamma_0} = 0$ ; на границах раздела газа и твердых тел для радиальной  $u$  и осевой  $v$  компонент скорости выполняются условия непротекания и прилипания, т. е.:  $u|_{\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_4} = 0$  и  $v|_{\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_4} = 0$ .

При заданных граничных условиях решалась система безразмерных уравнений термогравитационной конвекции в приближении Буссинеска в переменных: температура  $T$ , функция тока  $\psi$  и вихрь  $\omega$ :

$$u \frac{\partial T}{\partial r} + v \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{1}{\sqrt{\text{Gr Pr}}} \left( \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right),$$

$$u \frac{\partial \omega}{\partial r} + v \frac{\partial \omega}{\partial z} - \frac{u\omega}{r} = \frac{1}{\text{Gr}} \left( \frac{\partial^2 \omega}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \omega}{\partial r} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial z^2} - \frac{\omega}{r^2} \right) - \frac{\partial T}{\partial r},$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} - \frac{\psi}{r^2} = \omega.$$

Радиальная и осевая компоненты скорости связаны с функцией тока  $\psi$  соотношениями:  $u = -\partial \psi / \partial z$  и  $v = (1/r) \partial(r\psi) / \partial r$ , граничные условия для скорости принимают вид: 6)  $\psi|_{\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_4} = 0$ ; 7)  $\omega|_{\Gamma_2, \Gamma_4} = \omega(u, v)$  — вихрь вычисляется на каждой итерации путем подстановки скоростей в соответствующие соотношения для условий на границах между газом и твердыми телами. Для аппроксимации вихря  $\omega$  используются формулы:  $\omega(r, Z_i) \approx \psi(r, Z_i \pm 2h) / (2h^2)$  — для горизонтальных границ,  $\omega(R_i, Z) \approx \psi(R_i \pm h, z) / [2h(R_i + h)] + \psi(R_i \pm 2h, z) / (2h^2)$  — для вертикальных границ. Здесь  $Z_i$  — горизонтальные границы: граница верхнего торца кристалла —  $z = H_k = 1,5$ , поставленное условие выполняется в диапазоне  $0,2 \leq r \leq 1$ ; граница нижнего торца штока —  $z = H_{ш} = 2,5$  при  $0,2 \leq r \leq 0,4$ ; положение верхней горизонтальной границы камеры —  $z = H_{цк} = 10$  при  $0,4 \leq r \leq 2$ ; граница экрана  $\Gamma_4$  —  $z = 0$  при  $1 \leq r \leq 2$ ;  $R_i$  — радиусы вертикальных границ: радиус

кристалла  $R_K = 1$ , поставленное условие выполняется в диапазоне  $0 \leq z \leq 1,5$ ; радиус затравки  $R_3 = 0,2$  при  $1,5 \leq z \leq 2,5$ ; радиус штока  $R_{ш} = 0,4$  при  $2,5 \leq z \leq 10$ ; радиус камеры  $R_{цк} = 2$  при  $0 \leq z \leq 10$ ;  $h$  — соответствующий размер конечного элемента, т. е. шаг сетки или по радиусу  $r$ , или по вертикальной координате  $z$ .

При переходе к безразмерным переменным в качестве характерной длины выбран радиус кристалла  $R_K$ , а масштаба скорости —  $V = \sqrt{\beta(T_0 - T_1)gR_K}$ . Безразмерная температура —  $T = (T' - T_1)/(T_0 - T_1)$ , где  $T'$  — температура в конкретной точке расчетной области,  $T_0$  — температура на фронте кристаллизации,  $T_1$  — температура холодного корпуса ростовой камеры. После перехода к безразмерным переменным в системе уравнений появляются два критерия подобия:  $Gr = g\beta R_K^3(T_0 - T_1)/\nu^2$  — число Грасгофа;  $Pr = \nu/a$  — число Прандтля.

Для оценок и расчетов чисел Грасгофа, Прандтля и других параметров были использованы фиксированные значения теплофизических свойств кремния и аргона: коэффициент динамической вязкости аргона  $\mu = 2,3 \times 10^{-5}$  м<sup>2</sup>/с; коэффициент объемного расширения аргона  $\beta = 3,3 \times 10^{-3}$  1/К; кинематическая вязкость аргона  $\nu = 2,24 \times 10^{-5}$  м<sup>2</sup>/с; температуропроводность аргона  $a = 2,24 \times 10^{-5}$  м<sup>2</sup>/с; плотность  $\rho = 1,57$  кг/м<sup>3</sup>. Радиусы кристаллов кремния имеют характерные размеры от 0,5 до 5 см. Свойства аргона взяты при температуре 310 К и давлении  $p = 1$  атм.

Методом конечных элементов решались задачи на установление при заданных значениях чисел Грасгофа. При решении были использованы равномерная прямоугольная конечноэлементная сетка, базисные билинейные функции. В программе реализован итерационный процесс, который при необходимости подставляет нужные значения переменных с предыдущих шагов. При этом сначала находится температура, затем вихрь, потом функция тока.

Одной из промежуточных задач настоящей работы было определение размерности сетки, необходимой для достаточно точных расчетов локальных характеристик пограничных слоев. Сравнительный анализ профилей скорости, температуры и локальных тепловых потоков, полученных на сетках размерности 21×101, 41×201, 61×301, 81×101, 81×201, 81×301, 81×401, 161×801, показывает достаточность сетки 81×401 для адекватного описания в диапазоне  $Gr \leq 10^4$ . На качественном уровне общая тенденция эволюции пространственной формы, определяемой полем изолинии функции тока, полей температуры в кристалле и в газе с ростом  $Gr$ , не зависит от параметров сетки, но меняется количественно. Это происходит потому, что для аппроксимации больших пристеночных градиентов нужна более мелкая сетка. Тем не менее, на грубых сетках, использованных в настоящей работе, при значениях чисел Грасгофа до 1000 пристеночные градиенты температуры вычисляются достаточно точно. При исследованиях сопряженного теплообмена при больших числах Грасгофа недостаточно точное определение градиентов температуры на образующих кристалла приводит к искажению распределений температуры в кристаллах.

Авторами представлены результаты расчетов, проведенных на оптимальных сетках. Под «оптимальными» следует понимать сетки, которые адекватно аппроксимируют пристеночные градиенты температуры и скорости и дальнейшее дробление которых не имеет смысла.

### Результаты вычислений

Задачи решены в сопряженной постановке, параметр сопряжения — отношение коэффициентов теплопроводности кристалла кремния и аргона  $\lambda_k/\lambda_r = 500$ . Поля температуры в кристаллах существенно зависят от режимов теплоотдачи. При анализе относительной роли различных механизмов теплообмена естественно проанализировать режим теплопроводности в твердом составном теле “кристалл–затравка–шток” и в газе, как исходный. Рассчитанное поле температуры в твердом теле в этом режиме является базой сравнения для понимания степени влияния конвективной теплоотдачи с образующих кристалла и всего составного твердого тела. Результаты расчетов поля температуры в режиме теплопроводности во всей расчетной области показали, что оно сильно неоднородно. Соответственно, неоднородно распределение радиальных и осевых градиентов температуры в кристалле. Как следствие, радиальные распределения осевых локальных тепловых потоков также неравномерные. Это особенно заметно вблизи нижнего нагретого торца (модельного фронта кристаллизации) и в верхней части кристалла, где существенно влияет на поле температуры в кристалле область перехода от кристалла к затравке. На неоднородность осевых градиентов температуры внимание обращено потому, что в настоящее время наиболее часто для объяснения процессов кластеризации собственных точечных дефектов [5, 6] в растущем кристалле применяется теория В.В. Воронкова, суть которой и современное состояние вопроса подробно изложены в работе [18]. В этой теории предполагается радиальная однородность осевых градиентов температуры.

В данной системе в режиме теплопроводности существуют большие радиальные градиенты температуры и в газовой среде. Поэтому система в гидродинамическом смысле абсолютно неустойчива и при самых малых перепадах температуры неизбежно развивается конвективное течение, интенсивность которого пропорциональна радиальному градиенту и будет расти при увеличении перепада температуры. От интенсивности течения газа и локальных полей скорости зависят локальные тепловые потоки с образующих кристалла и, как следствие, осевые и радиальные градиенты температуры в кристаллах. Меняются соотношения тепловых потоков в осевом и в радиальном направлениях в кристалле и во всем составном теле.

На рис. 2 показана эволюция с ростом числа Грасгофа пространственной формы термогравитационной конвекции газа (а), полей изотерм во всей расчетной области (б) и в кристалле (в). На примере данной фиксированной геометрии, характерной для промежуточной стадии технологического процесса, можно увидеть следующие закономерности развития пространственной формы течения и полей изотерм с ростом перепада температуры. При малых числах Грасгофа  $Gr \leq 100$  поле температуры в газовой среде несущественно отличается от режимов теплопроводности. В области между кристаллом и холодной стенкой корпуса интенсивность течения относительно низкая. Изотермы в газе практически параллельны образующим кристалла, точно так же, как и в режиме теплопроводности. С ростом перепада температуры пространственная форма течения, как видно на рис. 2, до чисел  $Gr \leq 10^4$  принципиально не меняется, но существенно растет интенсивность течения (рис. 3). С ростом интенсивности течения локальная структура

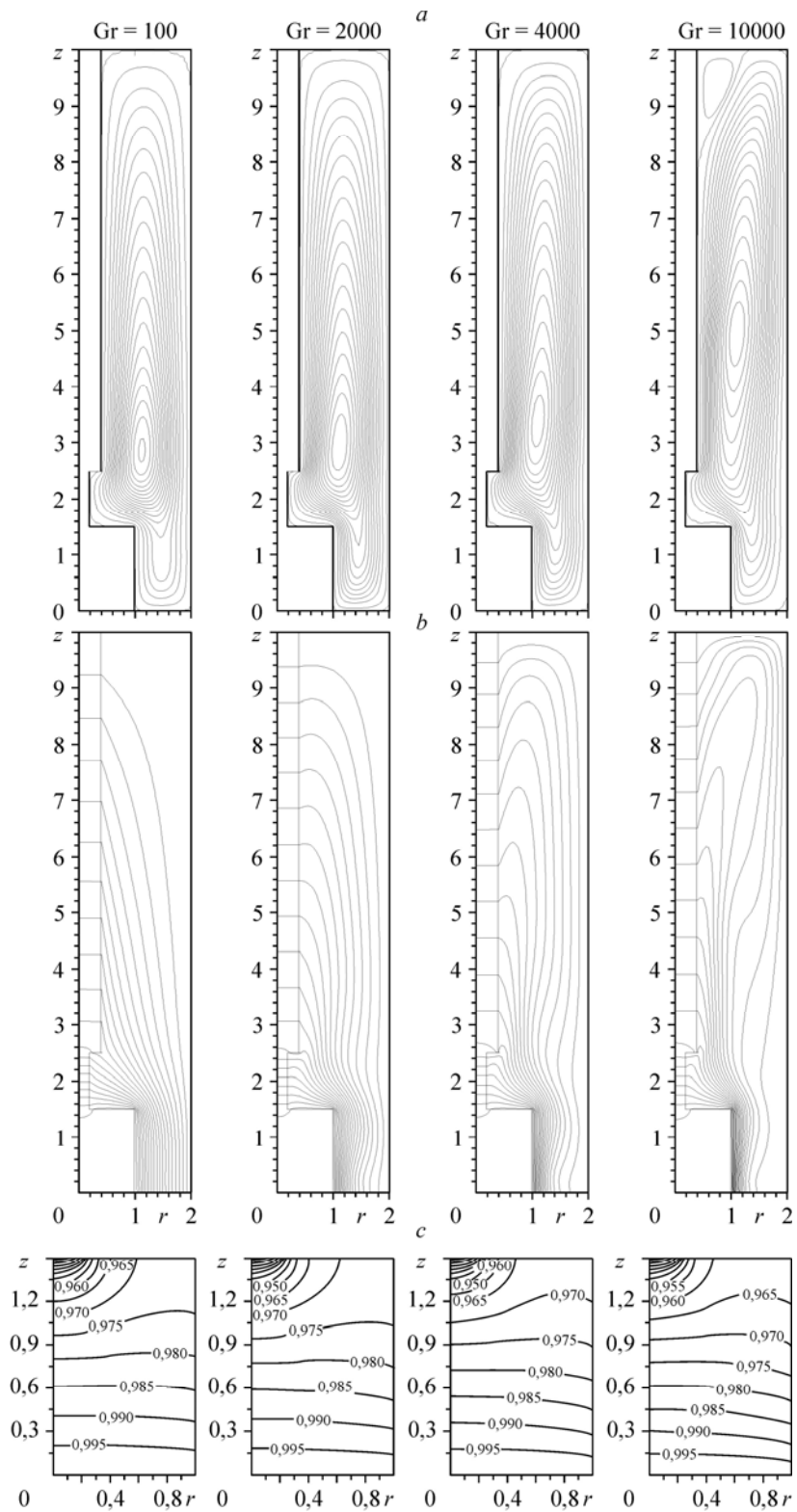


Рис. 2. Зависимости полей изолиний функции тока (a) и изотерм в расчетной области (b) и в кристалле (c) от числа Грасгофа.

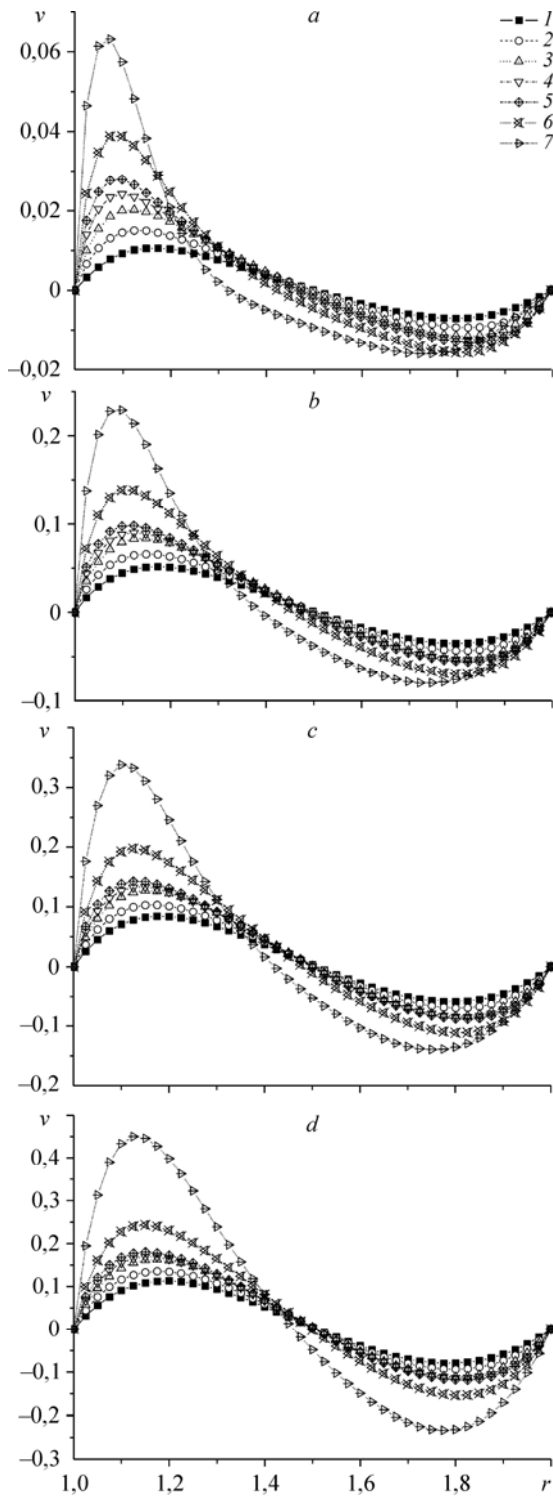


Рис. 3. Профили вертикальной компоненты скорости в зависимости от числа Грасгофа в различных сечениях по высоте.

$z = 0,1$  (a),  $0,3$  (b),  $0,5$  (c),  $1$  (d);  $Gr = 100$  (1),  $500$  (2),  $1000$  (3),  $2000$  (4),  $3000$  (5),  $4000$  (6),  $10000$  (7).

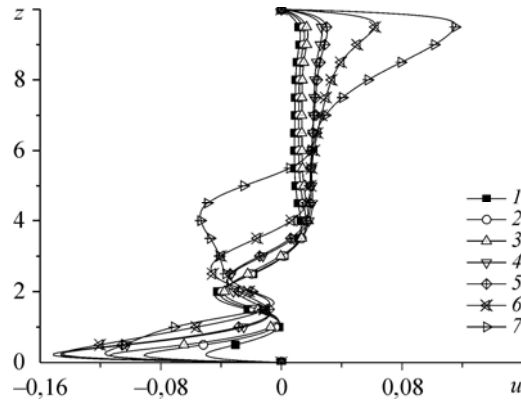
все в большей степени приближается к погранслоному типу, что видно по эволюции профилей осевой компоненты скорости вниз по течению на образующей кристалла на рис. 3. В целом, течение имеет форму единой замкнутой конвективной ячейки, что видно на рис. 2 и 4, где показана эволюция профилей радиальной компоненты скорости в центральном сечении  $r = 1,5$ . На поле скорости в расчетной области в целом и на форму профилей осевой компоненты скорости существенно влияет геометрия расчетной области (см. рис. 3). Пограничный слой вначале развивается на образующих кристалла. Затем на верхней кромке кристалла начинается зона схода (а при больших значениях  $Gr$  — отрыв) пограничного слоя. Далее следует течение в каверне цилиндрической формы в зоне перехода от кристалла к затравке и от затравки к штоку. Начиная от нижнего среза штока, формируется новый пограничный слой.

Профили осевой компоненты скорости на верхней кромке кристалла и на передней кромке штока показаны на рис. 5. Видно, что при увеличении числа  $Gr$  меняется соотношение количества газа, которое вдоль холодной стенки корпуса участвует в течении ко дну расчетной

области, и количество газа, которое вовлекается в поворотное течение над верхним торцом кристалла. Наличие поворотного течения и изменения положения максимума радиальной компоненты скорости в поворотном течении с ростом  $Gr$  хорошо просматривается на рис. 4. На качественном уровне относительную

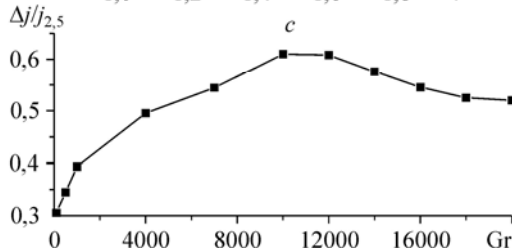
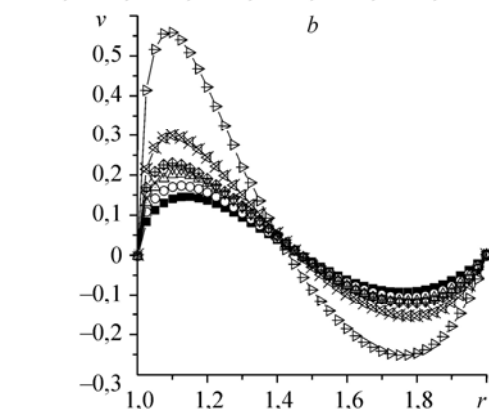
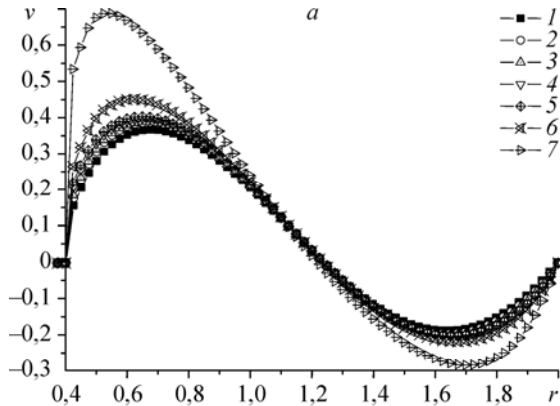


Рис. 4. Профили радиальной компоненты скорости в центральном сечении  $r = 1,5$  в зависимости от числа Грасгофа.  
 $Gr = 100$  (1),  $500$  (2),  $1000$  (3),  $2000$  (4),  $3000$  (5),  $4000$  (6),  $10000$  (7).



долю газа, уходящего в поворотное течение, можно определить из сравнения профилей на рис. 5, *a* и *b*. Масштаб координаты  $r$  на рис. 5, *a* и *b* одинаков. На количественном уровне доли газа, продолжающего участвовать в движении в осевом направлении и уходящего в по-

воротный поток, определены из интегралов пристеночных участков (на холодной стенке) профилей вертикальной компоненты скорости по площадям кольцевых зазоров на уровне  $z = 1$  и  $2,5$ . Результаты таких оценок приведены на рис. 5, *c*. На данном рисунке  $j_{2,5}$  и  $j_1$  означают количества газа стекающего вдоль холодной стенки ростовой камеры на заданных высотах  $z$ . Формирование поворотного течения обусловлено, с одной стороны, переходом от большого радиуса кристалла



к существенно меньшему радиусу штока, а с другой стороны, влиянием все более выраженной устойчивой стратификации газа по температуре и плотности (рис. 6). Относительная доля газа, протекающего в придонную область и участвующего в охлаждении кристалла, с ростом числа Грасгофа увеличивается в диапазоне  $Gr \leq 3000$ , а затем очень слабо понижается в диапазоне  $3000 \leq Gr \leq 10^4$ , что видно по рис. 5, *c*. В соответствии с этим перестраивается поле температуры в газе в нижней части кольцевой области. Это заметно по характерному изменению формы изотерм вблизи стенки корпуса и вблизи нижнего торца кристалла на рис. 2, а также по радиальным распределениям температуры в газе на рис. 7.

Рис. 5. Профили вертикальной компоненты скорости в зависимости от числа Грасгофа в сечениях по высоте.

$z = 2,5$  (*a*),  $1,5$  (*b*);  $Gr = 100$  (1),  $500$  (2),  $1000$  (3),  $2000$  (4),  $3000$  (5),  $4000$  (6),  $10000$  (7); *c* — относительная доля газа, стекающего в придонную область в зависимости от числа Грасгофа.

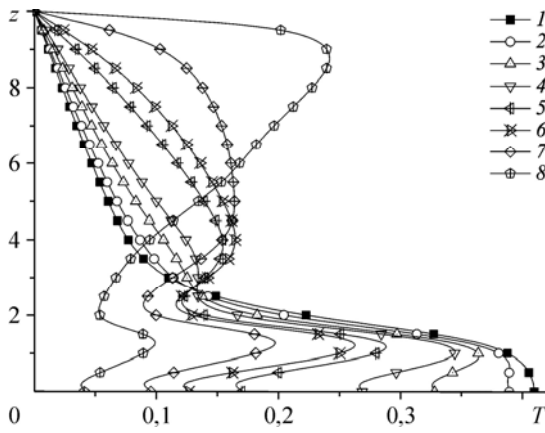


Рис. 6. Распределения температуры по высоте слоя газа в сечении  $r = 1,5$ . Режим теплопроводности  $Gr = 0$  (1), 100 (2), 500 (3), 1000 (4), 2000 (5), 3000 (6), 4000 (7), 10000 (8).

С ростом перепада температуры и интенсивности конвективного течения газа эффекты устойчивой стратификации в ядре объема газа становятся все более существенными. Кристалл погружается во все более холодную окружающую среду. Растут абсолютные значения

локальных тепловых потоков с образующей кристалла, возрастают абсолютные значения осевых и радиальных градиентов температуры в кристалле (рис. 2, с). Одновременно в верхней части кольцевого объема происходит накопление горячего газа (рис. 6). Температурное расслоение газа в верхней части ростовой камеры становится заметным при числах Грасгофа  $Gr \geq 2000$ . Полностью ядро становится стратифицированным при числах Грасгофа  $Gr \geq 10^4$ . Появление стратифицированного ядра объясняется ростом интенсивности циркуляции газа и выносом нагретого газа от кристалла в верхнюю часть полости. Это хорошо видно по профилям температуры на рис. 6. В процессе накопления горячего газа в верхней части кольцевого объема меняются условия теплообмена в угловой области между штоком и верхней холодной стенкой ростовой камеры. Это видно по изменению наклона изотерм по нормали к образующим штока на рис. 2. Меняются направления радиальных градиентов температуры и локальных тепловых потоков на образующих штока. В этом случае не газ подогревается стенкой, а наоборот, перегретый газ натекает на относительно холодную стенку, отдавая тепло. Инверсия теплового потока наблюдается в пристеночных областях затравки и штока при числах  $4000 \leq Gr \leq 10^4$ . На рис. 2, b видно, что с ростом числа Грасгофа область инверсии локального теплового потока смещается вниз по образующей штока. При теплоотдаче от газа к штоку (затравке,

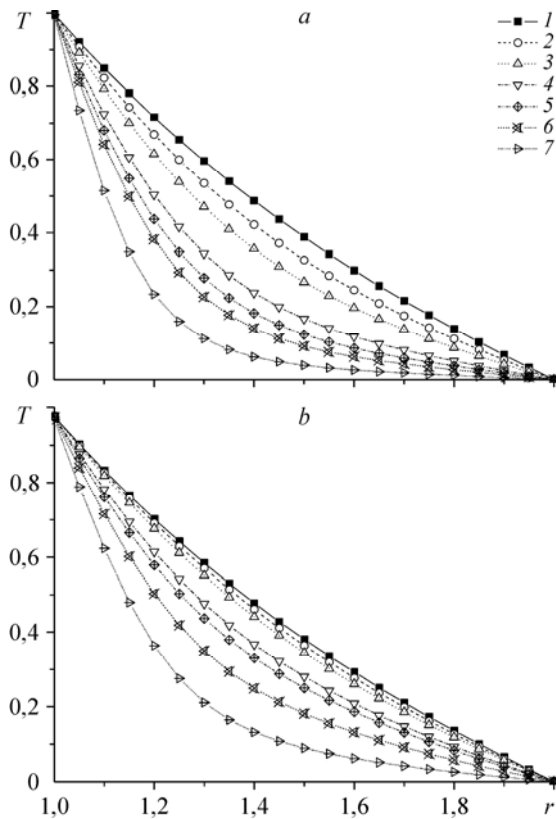


Рис. 7. Профили температуры в газе в зависимости от числа Грасгофа в различных сечениях по высоте.

$z = 0,1$  (a),  $1$  (b);  $Gr = 100$  (1), 500 (2), 1000 (3), 2000 (4), 3000 (5), 4000 (6), 10000 (7).

кристаллу) формируется прослойка газа, имеющая температуру ниже температуры газа в ядре. При критических условиях (критическая толщина пограничного слоя или критическая масса охлажденного газа) формируется опускной поток по стенке штока навстречу основному течению. При числах Грасгофа  $Gr \geq 10^4$  в верхней части возникает зона отрыва свободноконвективного пограничного слоя (рис. 2). Видно, что возникновение обратного градиента температуры по нормали к образующей составного цилиндрического тела еще не является основной причиной для возникновения отрыва, т. е. отрыв имеет пороговый характер. С описанными выше этапами развития глобальной структуры течения коррелирует распределение по высоте полости радиальной компоненты скорости в центральном сечении  $r = 1,5$  (рис. 4). Отмеченные качественные перестройки пространственной формы течения и поля температуры сопровождаются соответствующими изменениями локальных характеристик, таких как профили скорости и температуры, локальные тепловые потоки (рис. 3–8).

Внимание, обращенное на анализ полей скорости и температуры в области над кристаллом, не является чрезмерным, т. к. отвод тепла от кристалла в шток за счет теплопроводности остается значительным и при большой длине кристалла, и при больших перепадах температуры в рассматриваемой системе. При всех перепадах температуры интенсивность теплоотвода от кристалла в шток определяет градиенты температуры в верхней части кристалла. Поэтому изменение поля температуры в верхней части штока, обусловленное появлением устойчивой стратификации газа по высоте, может существенно повлиять на величину теплового потока от кристалла в затравку.

На рис. 6 видно, как с ростом числа Грасгофа при достижении достаточно интенсивного движения газа формируется устойчиво стратифицированное ядро и в нижней части полости. Протяженность устойчиво стратифицированного ядра в придонной области примерно соответствует высоте кристалла. Как видно на рис. 4, несмотря на явную тенденцию к формированию замкнутого вторичного вихря в придонной области, этого не происходит. На рис. 6 видно, что с ростом числа Грасгофа устойчиво стратифицированный слой газа в придонной области формируется существенно раньше, чем в верхней части ростовой камеры. Анализ рис. 2, 7 показывает, что с ростом числа Грасгофа все заметнее происходит рост толщины теплового пограничного слоя вниз по потоку на образующих кристалла. Формирование устойчивой стратификации газа в области  $0,5 \leq z \leq 1,3$  приводит к снижению радиальных градиентов температуры и локальных тепловых потоков с образующих кристалла в его верхней части (рис. 8).

С ростом числа Грасгофа относительная температура газа в нижней части полости монотонно снижается (рис. 6). Верхняя граница поворотного течения в придонной области смещается с  $z = 1$  до 1,5 (рис. 4). Т. е. на весь кристалл натекает охлажденный на корпусе камеры газ. Но положение максимума радиальной компоненты скорости вблизи дна практически

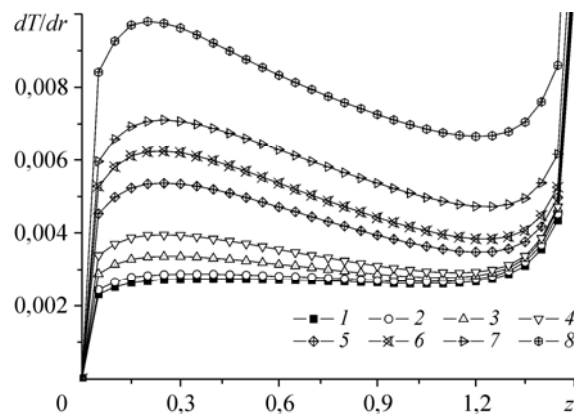


Рис. 8. Радиальные градиенты температуры на боковой поверхности кристалла.

$Gr = 0$  (1), 100 (2), 500 (3), 1000 (4), 2000 (5), 3000 (6), 4000 (7), 10000 (8).

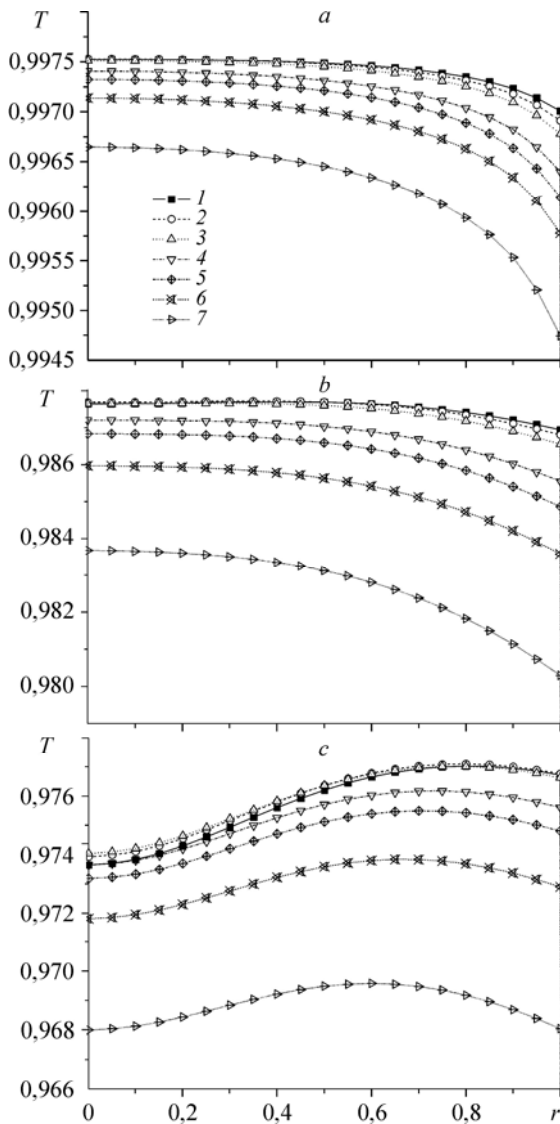


Рис. 9. Радиальные распределения температуры в кристалле в различных сечениях по высоте в зависимости от числа Грасгофа.

$z = 0,1$  (a),  $0,5$  (b),  $1$  (c);  $Gr = 100$  (1),  $500$  (2),  $1000$  (3),  $2000$  (4),  $3000$  (5),  $4000$  (6),  $10000$  (7).

остается на одном уровне  $z = 0,2-0,3$ . Именно здесь наиболее интенсивно на кристалл натекает холодный газ. С ростом числа  $Gr$  натекающий поток становится все более размазанным по высоте и со все менее выраженным максимум скорости, что видно на профиле 7 рис. 4. Безразмерная амплитуда радиальной компоненты скорости растет с увеличением числа Грасгофа в области  $Gr \leq 3000$ . Затем в диапазоне между  $3000$  и  $10^4$  монотонно падает. Из анализа данных рис. 4, 8–10 видна корреляция между изменениями локальной структуры остронаправленного течения холодного газа на нижнюю часть кристалла, локальной теплоотдачей с его поверхности и полем температуры в нем. Относительная роль молекулярной теплопроводности от фронта

кристаллизации к затравке и конвективной теплоотдаче с боковой поверхности кристалла в газ не очевидна из анализа полей изотерм в кристалле, представленных на рис. 2. Она может быть определена из анализа данных на рис. 9, 10. Из данных на рис. 9 видно, что при числах  $Gr \leq 10^3$  конвективная теплоотдача относительно слабо влияет на радиальные распределения температуры в кристалле и на радиальные потоки тепла по всей его высоте. При числах  $Gr \geq 3000$  растут радиальные градиенты температуры за счет интенсификации теплоотдачи с боковой поверхности. Соответственно, растет радиальная неоднородность поля температуры. Распределения осевых градиентов температуры и потоков тепла в кристалле качественно меняются по высоте. При  $z \leq 0,45$  осевые градиенты температуры выше в приповерхностном слое кристалла, чем в приосевой области. При  $z \geq 0,5$  начинают резко возрастать осевые градиенты температуры в приосевой области. В верхней части кристалла существенным становится сток тепла от кристалла в затравку. Это видно по качественным изме-

Рис. 10. Радиальные распределения осевых градиентов температур в кристалле в различных сечениях по высоте в зависимости от числа Грасгофа.

$z = 0,1$  (a),  $1$  (b);  $z = 1,4$  (c); Gr =  $= 100$  (1),  $500$  (2),  $1000$  (3),  $2000$  (4),  $3000$  (5),  $4000$  (6),  $10000$  (7).

нениям радиальных распределений температуры на рис. 9 и осевых градиентов температуры в кристалле на рис. 10.

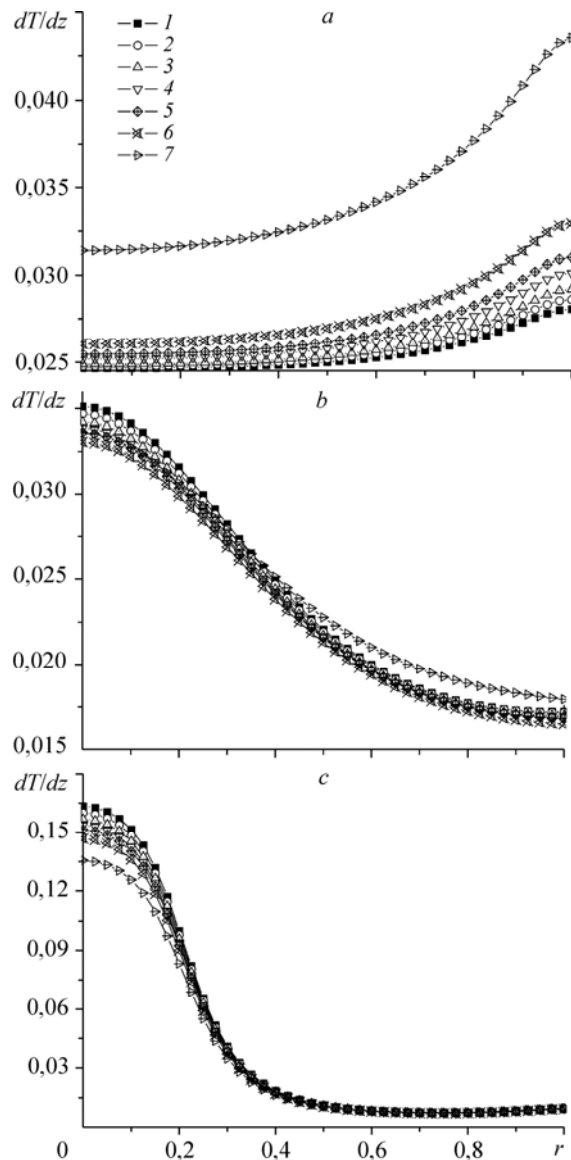
### Заключение

При фиксированной геометрии расчетной области исследованы эволюция структуры течения и сопряженный конвективный теплообмен в режиме термогравитационной конвекции с ростом перепада температуры и влияние особенностей течения на согласованные поля температуры в газе и в кристалле.

При небольших числах Грасгофа ( $Gr \leq 100$ ) влияние конвекции на распределение температуры в газе относительно невелико. Поэтому радиальные распределения температуры в газе близки к линейным. Это характерно для так называемых режимов теплопроводности, при которых гидродинамика газа слабо

влияет на температурные поля в большей части объема газа, за исключением торцевых зон поворотных течений. С ростом числа Грасгофа наблюдается переход от слабоинтенсивного ползущего течения к режиму пограничного слоя. Одним из индикаторов перехода является формирование устойчиво стратифицированного ядра в слое газа.

Особенностью задачи является то, что центральное тело подогревается снизу и конвекция развивается у тела с продольным градиентом температуры. Газ, разогреваясь у нижнего торца, поднимается вверх и перепад температуры между кристаллом и газом постепенно уменьшается. При больших характерных перепадах температуры в рассматриваемой системе это приведет к тому, что вниз по потоку температура натекающего газа превзойдет температуру кристалла и тепловой поток изменит свое направление. Естественно ожидать, что при увеличении длины кристалла на его образующей возникнут условия для формирования отрыва пограничного слоя.



Представленные результаты позволяют на качественном и количественном уровнях увидеть основные тенденции перестройки взаимосвязанных полей температуры в газе и в составном твердом теле “кристалл–затравка–шток”, а также определить тенденции в изменениях радиальных и осевых градиентов температуры при увеличении числа Gr. Данные, приведенные на рис. 2, с, 9, 10, представляют практический интерес для совершенствования одномерной теории В.В. Воронкова о поведении точечных дефектов в кристалле, основные положения и физические предпосылки которой подробно описаны и анализируются в монографии [18].

### Список литературы

1. **Конаков П.К., Веревошкин Г.Е., Горяинов Л.А., Зарувинская Л.А., Конаков Ю.П., Кудрявцев В.В., Третьяков Г.А.** Тепло- и массообмен при получении монокристаллов. М.: Металлургия, 1971. 240 с.
2. **Шашков Ю.М.** Выращивание монокристаллов методом вытягивания. М.: Металлургия, 1982. 312 с.
3. **Полежаев В.И.** Гидродинамика, тепло- и массообмен при росте кристаллов // Итоги науки и техники. Сер. МЖГ. 1984. Т. 18. С. 198–268.
4. **Полежаев В.И., Буиз А.В., Везуб Н.А., Глушко Г.С., Грязнов В.Л., Дубовик К.Г., Никитин С.А., Простомолотов А.И., Федосеев А.И., Черкасов С.Г.** Математическое моделирование конвективного теплообмена на основе уравнений Навье–Стокса. М.: Наука, 1987. 272 с.
5. **Рейви К.** Дефекты и примеси в полупроводниковом кремнии. М.: Мир, 1984. 475 с.
6. **Мильвидский М.Г.** Полупроводниковые материалы в современной электронике. М.: Наука, 1986. 144 с.
7. **Анфимов И.М., Бердников В.С., Выговская Е.А., Кобелева С.П., Смирнова А.А., Осипов Ю.В., Торопова О.В., Мурашов В.Н.** Однородность распределения удельного электросопротивления в монокристаллическом кремнии, выращенном методом Чохральского // Изв. ВУЗов. Материалы электронной техники. 2007. № 4. С. 40–44.
8. **Бердников В.С., Борисов В.Л.** Экспериментальное моделирование гидродинамики расплава при выращивании монокристаллов методом Чохральского // Теплообмен при кристаллизации и конденсации металлов. Новосибирск: ИТ СО РАН СССР, 1981. С. 96–106.
9. **Бердников В.С., Борисов В.Л., Панченко В.И.** Экспериментальное моделирование гидродинамики и теплообмена при выращивании монокристаллов методом Чохральского // Теплофизические явления при кристаллизации металлов. Новосибирск: ИТ СО РАН СССР, 1982. С. 77–92.
10. **Бердников В.С., Борисов В.Л., Марков В.А., Панченко В.И.** Лабораторное моделирование макроскопических процессов переноса в расплаве при выращивании монокристаллов методом вытягивания // Гидродинамика и теплообмен в технологии получения материалов. М.: Наука, 1990. С. 68–88.
11. **Бердников В.С., Панченко В.И., Соловьев С.В.** Тепловая гравитационно-капиллярная конвекция в методе Чохральского // Теплофизика кристаллизации и высокотемпературной обработки материалов. Новосибирск: ИТ СО РАН СССР, 1990. С. 162–199.
12. **Бердников В.С., Панченко В.И., Соловьев С.В.** Конвективный теплообмен в режиме смешанной конвекции на модели метода Чохральского // Теплофизика кристаллизации и высокотемпературной обработки материалов. Новосибирск: ИТ СО РАН СССР, 1990. С. 199–221.
13. **Мюллер Г.** Выращивание кристаллов из расплава. Конвекция и неоднородности. М.: Мир, 1991. 143 с.
14. **Бердников В.С., Винокуров В.В., Панченко В.И., Соловьев С.В.** Теплообмен в классическом методе Чохральского // Инженерно-физический журнал. 2001. Т. 74, № 4. С. 122–127.
15. **Berdnikov V.S., Vinokurov V.V., Gaponov V.A., Markov V.A.** Complex simulation of crystal pulling from the melt // Proc. of the Fourth Intern. Conf. “Single crystal growth and heat & mass transfer”, (ICSC-2001), September 24-28, Obninsk, Russia, 2001. Vol. 1. P. 88–106.
16. **Berdnikov V.S., Vinokourov V.A., Vinokourov V.V., Gaponov V.A.** Mixed convection flow of the melt and heat transfer during Czochralski crystal growth // Proc. of the Fifth Intern. Conf. “Single crystal growth and heat & mass transfer”, Obninsk, 22-26 September, 2003. Vol. 1. P. 43–67.
17. **Бердников В.С.** Гидродинамика и теплообмен при вытягивании кристаллов из расплавов. Ч. 1: Экспериментальные исследования режима свободной конвекции // Материалы электронной техники. 2007. № 4. С. 19–27.
18. **Таланин В.И.** Моделирование и свойства дефектной структуры бездислокационных монокристаллов кремния. Запорожье: ГУ ЗИГМУ, 2007. 275 с.

*Статья поступила в редакцию 16 апреля 2010 г.,  
после доработки — 24 июня 2011 г.*