УДК 532.522

О ВЛИЯНИИ ТЕРМОКАПИЛЛЯРНЫХ СИЛ НА НАЧАЛЬНЫЙ УЧАСТОК ПЛЕНКИ РАСПЛАВА

В. И. Яковлев

Институт теоретической и прикладной механики СО РАН, 630090 Новосибирск

Выполненный ранее анализ полей вблизи верхней тройной точки процесса бестигельной зонной плавки дополнен анализом с учетом термокапиллярных сил на поверхности расплава. Показано, что влияние этих сил в общем случае велико и только при малом градиенте температуры по поверхности расплава, когда термокапиллярные силы малы, может быть сформирована пленка расплава с радиусами кривизны макроскопических размеров; при этом угловые координаты сечения пленки расплава также малы.

Геометрические характеристики начального участка стационарной пленки расплава, формируемой в процессе бестигельной зонной плавки, исследованы в [1]. В результате анализа локальных гидродинамического и температурных полей вблизи тройной точки получены соотношения, связывающие угловые координаты и радиусы кривизны границ поперечного сечения пленки расплава с величинами внешних тепловых потоков. При этом в качестве гидродинамического условия принималось условие отсутствия касательных напряжений на свободной поверхности пленки. Установлено, что при различных тепловых условиях возможны разные геометрические конфигурации начального участка пленки.

Данная работа является продолжением [1] и содержит результаты исследования влияния термокапиллярных сил. Здесь используются прежние обозначения; ссылки на формулы из [1] отмечены звездочкой.

При учете термоконвекции и термокапиллярных сил общая задача, вообще говоря, не расщепляется на гидродинамическую и тепловую подзадачи, как в [1], так как в уравнении движения присутствует член, описывающий силы плавучести, связанные с градиентом температуры. Однако, как замечено в [1], уравнения гидродинамики не оказывают влияния на локальные параметры пленки расплава; таким образом, термоконвекция на них не влияет. Термокапиллярные силы влияют на одно из гидродинамических граничных условий на свободной поверхности расплава, связанное с касательными напряжениями. Фактически это единственное изменение, к которому приводит учет термокапиллярных сил, так как уравнения теплопроводности и все тепловые граничные условия остаются без изменения; следовательно, возможность расщепления общей задачи сохраняется.

Граничное условие для тангенциальных напряжений на свободной границе расплава при учете термокапиллярных сил имеет вид [2]

$$\Big(\sigma_{n\tau} - \frac{\partial\alpha}{\partial\tau}\Big)\Big|_{\gamma_l} = 0.$$

(Влиянием газовой фазы, как и в [1], пренебрегаем.) Это условие, будучи снесено на окружность $r_2 = R_2$, в нулевом приближении сводится к следующему:

$$-\rho_l\nu\Big(\frac{1}{R_2^2}\,\frac{\partial^2\psi}{\partial\alpha_2^2} - \frac{\partial^2\psi}{\partial r_2^2} + \frac{1}{R_2}\,\frac{\partial\psi}{\partial r_2}\Big)\Big|_0 + \frac{d\alpha}{dT}\Big|_{T_0}\,\frac{\partial\theta_l}{\partial\alpha_2}\Big|_0\,\frac{1}{R_2} = 0. \qquad (1)$$

Здесь $d\alpha/dT\big|_{T_0}$ — производная коэффициента поверхностного натяжения расплава по температуре в точке плавления; $(\partial\theta_l/\partial\alpha_2)\big|_0$ — производная температуры поверхности расплава по углу α_2, взятая в точке $\alpha_2 = 0$. Решение $\theta_l(r_1, \alpha_1)$ из [1] остается в силе и при учете термокапиллярных сил, откуда $\partial\theta_l(r_1, \alpha_1)/\partial\alpha_2 = (\partial\theta_l/\partial r_1)(\partial r_1/\partial\alpha_2) + (\partial\theta_l/\partial\alpha_1)(\partial\alpha_1/\partial\alpha_2)$ и с учетом $(1.2)^*$, $(1.3)^*$, $(3.8)^*$, $(3.11)^*$, $(3.14)^*$

$$\frac{\partial\theta_l}{\partial\alpha_2}\Big|_0 = S_0'(R_1)(-R_2\sin\beta) = -\frac{W_l^{(0)} - \Lambda_l\theta_{l*}}{\lambda_l\cos\beta}\,R_2\sin\beta. \tag{2}$$

Первое слагаемое в скобках в (1) согласно $(2.13)^*$ равно нулю; остальные легко вычисляются из $(1.2)^*$, $(1.3)^*$, $(2.10)^*$, $(2.11)^*$. В результате с учетом (2) условие (1) приводится к виду

$$\psi_0''(R_1)R_2\cos^2\beta + \tilde{R}(1-\tilde{\rho})v_0(\cos\varphi\sin^2\beta + \sin\varphi\sin 2\beta) - v_0\cos\varphi/\cos\beta =$$
$$= \frac{1}{\rho_l\nu}\,\frac{d\alpha}{dT}\Big|_{T_0}\,\frac{W_l^{(0)} - \Lambda_l\theta_{l*}}{\lambda_l\cos\beta}\,R_2\sin\beta, \tag{3}$$

только правой частью отличающемуся от соответствующего выражения в [1]. Исключив $\psi_0''(R_1)$ из (3) и $(2.15)^*$, получаем соотношение

$$\tilde{R}(1-\tilde{\rho})\cos(\varphi+2\beta) - \cos 2\beta\,\frac{\cos\varphi}{\cos\beta} + \frac{1}{\rho_l\nu}\,\frac{d\alpha}{dT}\Big|_{T_0}\,\frac{R_2}{v_0}\,\frac{W_l^{(0)} - \Lambda_l\theta_{l*}}{\lambda_l\cos\beta}\,\sin^3\beta = 0,$$

являющееся обобщением $(2.16)^*$ на случай учета термокапиллярных сил. С использованием параметров $q_l^{(0)}$, P^l, введенных в [1], и безразмерного параметра

$$Ma = \frac{1}{\rho_l\nu}\Big(-\frac{d\alpha}{dT}\Big|_{T_0}\Big)\frac{\tilde{Q}}{c_l v_0} \tag{4}$$

рассматриваемое соотношение приобретает вид

$$\tilde{R}(1-\tilde{\rho})\cos(\varphi+2\beta) - \cos 2\beta\,\frac{\cos\varphi}{\cos\beta} - R_2P^{(l)}\tilde{\rho}q_l^{(0)}Ma\,\frac{\sin^3\beta}{\cos\beta} = 0 \tag{5}$$

и при учете термокапиллярных сил заменяет прежнюю "универсальную" зависимость $(4.3)^*$; соотношение $(4.4)^*$ остается без изменения. Таким образом, система линейных уравнений (5) и $(4.4)^*$ для безразмерных переменных $\tilde{R}$, $R_2P^{(l)}$ определяет исследуемые радиусы кривизны. Перепишем $(4.4)^*$ в виде

$$R_2P^{(l)} = (\tilde{R}B + q_l^{(0)}\operatorname{tg}\beta)/D, \tag{6}$$

где

$$D = \Big(q_l^{(1)} + \frac{\cos 2\beta}{\cos 2\varphi}\,q_s^{(1)}\Big) - q_l^{(0)}\operatorname{tg}\beta(\sin\beta\cos\varphi + \chi_l) + q_s^{(0)}\tilde{P}\,\frac{\cos 2\beta}{\cos 2\varphi}\,(\sin^2\varphi + \chi_s\operatorname{tg}\varphi),$$

$$B = \frac{q_s^{(0)}}{\cos\varphi}\,\frac{\sin 2(\varphi-\beta)}{\cos\varphi} + \cos(\varphi+2\beta).$$

Разрешив уравнения (5), (6) относительно $\tilde{R}$, $R_2P^{(l)}$, получим

$$R_2P^{(l)} = \frac{(1-\tilde{\rho})q_l^{(0)}\cos(\varphi+2\beta)\sin\beta + B\cos 2\beta\cos\varphi}{D(1-\tilde{\rho})\cos\beta\cos(\varphi+2\beta) - \tilde{\rho}Maq_l^{(0)}B\sin^3\beta}, \tag{7}$$

$$\tilde{R} = \frac{D\cos 2\beta(\cos\varphi/\cos\beta) + \tilde{\rho}Ma(q_l^{(0)}\sin^2\beta/\cos\beta)^2}{D(1-\tilde{\rho})\cos(\varphi+2\beta) - \tilde{\rho}Ma(q_l^{(0)}/\cos\beta)B\sin^3\beta}.$$

Следует отметить, что безразмерный параметр (4) велик. (Например, для кремния в условиях [3] Ma порядка $5\cdot 10^6$.) Это обстоятельство приводит к тому, что в условиях, когда коэффициенты при Ma в формулах (7) отличны от нуля и конечны, искомые величины становятся порядка $R_2P^{(l)} = O(1/Ma)$, $\tilde{R} = O(1)$. С учетом $P^{(l)} \approx 1/50$ см$^{-1}$ (см. [1]) отсюда следует, что R_2, R_1 порядка $50(5\cdot 10^6)^{-1}$ см $= 10^{-5}$ см $=$ 0,1 мкм. Будем считать, что радиусы кривизны таких микроскопических размеров в рассматриваемом процессе интереса не представляют, и определим условия, при которых эти радиусы приобретают макроскопические значения миллиметрового диапазона и безразмерный параметр $R_2P^{(l)}$ достигает, например, конечных значений

$$R_2P^{(l)} \sim 10^{-2}. \tag{8}$$

Чтобы при этом выполнялось соотношение $\tilde{R} = R_2/R_1 = O(1)$, как следует из (5), необходимо выполнение условия

$$(q_l^{(0)}/\cos\beta)\sin^3\beta \ll 1. \tag{9}$$

Оно может быть выполнено в следующих случаях:

а) $q_l^{(0)}/\cos\beta \ll 1$ при конечном $\sin^3\beta$;

б) $\sin^3\beta \ll 1$ при конечном $q_l^{(0)}/\cos\beta$;

в) оба рассматриваемых множителя малы.

Вариант "а" исключается условием $q_s^{(0)} > 0$ существования твердой фазы на границе γ (условием (3.19)*). Действительно, как следует из (4.2)*, $q_s^{(0)}/\cos\varphi = (q_l^{(0)}/\cos\beta) - \sin\varphi$, и при $q_l^{(0)}/\cos\beta \ll 1$ условие $q_s^{(0)} > 0$ выполняется при $\sin\varphi < q_l^{(0)}/\cos\beta \ll 1$, т. е. при $\sin\beta \ll 1$. Таким образом, для существования конечных $\tilde{R}$ при $Ma \sim 10^6$ условие (9) дополняется условием

$$\beta = \tilde{\rho}\varphi \ll 1. \tag{10}$$

При выполнении условий (9), (10) коэффициент при Ma в выражении (7) также мал и имеется возможность уменьшить влияние этого большого параметра, чтобы получить значения $R_2P^{(l)}$, удовлетворяющие условию (8). Следовательно, при учете термокапиллярных сил радиусы кривизны макроскопических размеров возникают лишь при условии (10). При этом

$$\tilde{R} = \frac{1 + \tilde{\rho}Ma(R_2P^{(l)})\tilde{\rho}^3\varphi^3}{1-\tilde{\rho}} + O(\varphi^2),$$

$$R_2P^{(l)} = \frac{1 + (1-\tilde{\rho})(\tilde{\rho}q_l^{(0)} + 2q_s^{(0)})\varphi}{[q_l^{(1)} + q_s^{(1)} + (\tilde{\rho}q_l^{(0)}\chi_l + \tilde{P}q_s^{(0)}\chi_s)\varphi](1-\tilde{\rho}) - \tilde{\rho}Maq_l^{(0)}\beta^3} + O(\varphi^2).$$

(В этих формулах сохранены слагаемые, пропорциональные $Ma\varphi^3$, из-за большого коэффициента Ma при них.) В пределе $\beta = \varphi = 0$ $\tilde{R}\big|_{\varphi=0} = (1-\tilde{\rho})^{-1}$, $R_2P^{(l)}\big|_{\varphi=0} = [(q_l^{(1)} + q_s^{(1)})(1-\tilde{\rho})]^{-1}$, т. е. радиус кривизны поверхности расплава R_2 на порядок превосходит соответствующую величину R_1 для межфазной поверхности, так как $\tilde{\rho} \approx 0{,}9$, а величина R_2 зависит от скорости увеличения теплового потока на поверхности расплава при удалении от тройной точки. Для получения $R_2P^{(l)}$ порядка 10^{-2} необходимо, чтобы величина $q_l^{(1)} + q_s^{(1)}$ была порядка 10^3. Следует отметить, что пленка расплава с этими предельными угловыми координатами, очевидно, не реализуется. Это вытекает из формул

$$\begin{aligned} \theta_s\big|_\gamma &= (\rho_s v_0 \tilde{Q} R_1/\lambda_s)(-q_s^{(0)}\varphi\alpha_1 + (q_s^{(0)}/2)\alpha_1^2) + O(\alpha_1^3), \\ \theta_l\big|_{\gamma_l} &= (\rho_s v_0 \tilde{Q} R_2/\lambda_l)(-q_l^{(0)}\beta\alpha_2 + (q_l^{(0)}/2)(\tilde{R}-1)\alpha_2^2) + O(\alpha_2^3) \end{aligned} \tag{11}$$

для температуры поликристалла на границе γ и температуры поверхности расплава, полученных из решений [1] и справедливых при $\beta = \tilde{\rho}\varphi \ll 1$. При $\beta = \varphi = 0$

$$\theta_s\big|_\gamma = (\rho_s v_0 \tilde{Q} R_1/\lambda_s)(q_s^{(0)}/2)\alpha_1^2 + O(\alpha_1^3), \quad \theta_l\big|_{\gamma_l} = (\rho_s v_0 \tilde{Q} R_2/\lambda_l)(q_l^{(0)}/2)(\tilde{R}-1)\alpha_2^2 + O(\alpha_2^3), \tag{12}$$

а условие $(4.2)^*$ сводится к требованию $q_l^{(0)} = q_s^{(0)}$. Так как при отклонении от тройной точки температура поверхности поликристалла должна уменьшаться, а температура поверхности расплава быть выше температуры плавления, переменные (12) должны удовлетворять условиям

$$\theta_s\big|_\gamma < 0 \quad \text{при} \quad \alpha_1 > 0, \qquad \theta_l\big|_{\gamma_l} > 0 \quad \text{при} \quad |\alpha_2| > 0. \tag{13}$$

Решения (12) совместно с требованием $q_l^{(0)} = q_s^{(0)}$ противоречат этим условиям. Следовательно, предельные углы $\varphi = \beta = 0$ не могут быть реализованы, а реализуются углы $0 < \varphi \ll 1$, $\beta = \tilde{\rho}\varphi$, т. е. пленка расплава начинается с малого ненулевого угла клина. При этом, как показывают главные члены разложений (11), условия (13) выполняются при $q_s^{(0)} > 0$, $q_l^{(0)} = q_s^{(0)} + \varphi > 0$. Фактически полученный результат означает, что радиусы кривизны макроскопических размеров возникают лишь при малой температуре на поверхности расплава, когда термокапиллярные силы малы.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Яковлев В. И.** О границах начального участка пленки расплава, формируемой при бестигельном зонном переплаве полупроводниковых материалов // ПМТФ. 2000. Т. 41, № 3. С. 139–148.
2. **Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.** Гидродинамика. М.: Наука, 1986.
3. **Muhlbauer A., Muiznieks A., Virbulis J., et al.** Interface shape, heat transfer and fluid flow in the floating zone growth of large silicon crystals with the needle-eye technique // J. Crystal Growth. 1995. V. 151. P. 66–79.

Поступила в редакцию 12/X 2000 г.