УДК 532.526.2

ОДНОМЕРНЫЙ ПОГРАНИЧНЫЙ СЛОЙ В ЗАДАЧЕ О БЕСТИГЕЛЬНОЙ ЗОННОЙ ПЛАВКЕ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Ю. В. Пивоваров, Н. Ю. Пивоваров*

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 630090 Новосибирск, Россия
* Всероссийский научно-исследовательский институт противопожарной обороны МЧС России, 143903 Балашиха, Россия
E-mails: pivov@hydro.nsc.ru, nikola-pivovarov@mail.ru

Изучается поведение касательной к свободной границе компоненты скорости частиц расплава кремния при бестигельной зонной плавке в магнитном поле. Показано, что неучет конвективных членов в скин-слое, примыкающем к свободной границе, приводит к ошибочным результатам: касательная скорость не может выйти на постоянное значение при движении по нормали к свободной границе, что в свою очередь приводит, как показано ранее при полном решении задачи, к уменьшению на порядок характерной скорости частиц расплава вне скин-слоя.

Ключевые слова: несжимаемая жидкость, свободная граница, пондеромоторная сила, скин-слой, конвективные члены.

DOI: 10.15372/PMTF20220404

Введение. Для получения монокристаллов кремния большого радиуса (более 5 см) используется метод бестигельной зонной плавки в магнитном поле, который состоит в следующем. Верхняя (заготовка) и нижняя (выращиваемый монокристалл) части цилиндрического вертикального образца медленно движутся вниз и вращаются в противоположных направлениях. Часть нижней границы заготовки покрыта жидкой пленкой, остальная часть граничит с плавающей зоной, находящейся между заготовкой и монокристаллом и поддерживаемой в жидком состоянии неподвижным источником высокочастотного электромагнитного поля — индуктором. Токи, наводимые индуктором, сосредоточены в тонком скин-слое, примыкающем к свободной границе расплава. Они приводят к выделению джоулева тепла и создают пондеромоторную силу, направленную ортогонально свободной границе, экспоненциально убывающую при увеличении расстояния от нее и являющуюся одним из источников конвекции в расплаве.

В работе [1] осесимметричная задача о бестигельной зонной плавке в магнитном поле решена численно в полной постановке с упрощающим предположением о малости конвективных членов по сравнению с вязкими в уравнении импульса в скин-слое. Это предположение позволяет снести пондеромоторную силу из уравнения импульса в граничное условие для завихренности и в результате не измельчать значительно сетку в окрестности свободной границы. Процессы, происходящие внутри скин-слоя, не рассматриваются, а полученное граничное условие сносится с внутренней границы скин-слоя на свободную поверхность. Термокапиллярная (обусловленная зависимостью поверхностного натяжения от температуры) и пондеромоторная силы в данном условии равноправны.

Результаты расчетов, проведенных в [1], показали, что при описанном выше подходе течение является нестационарным и незначительно зависит от пондеромоторной и термокапиллярной сил, так как при их равенстве нулю линии тока в расплаве меняются несущественно. Отсюда можно сделать вывод, что доминирующими являются термогравитационная (обусловленная зависимостью плотности расплава от температуры) конвекция и конвекция, обусловленная вращением твердых частей образца.

В работе [2] проведены расчеты, в которых пондеромоторная сила не сносится в граничное условие для завихренности, а входит в правую часть уравнения импульса. При этом установлено, что течение близко к стационарному, а характерная скорость расплава, обусловленная пондеромоторной силой, на порядок выше полученной в [1] (см. также [3, 4]). В этом случае доминирующей является конвекция, обусловленная пондеромоторной силой (электроконвекция). Это объясняется тем, что конвективные члены в уравнении импульса в скин-слое не являются малыми по сравнению с вязкими членами.

В настоящей работе изучается механизм описанного явления. Выводится уравнение одномерного пограничного слоя в окрестности свободной границы. При этом производные по касательной к ней заменяются их характерными значениями. Показано, что наличие конвективных членов в уравнении для касательной скорости приводит к тому, что при увеличении расстояния от свободной границы эта скорость сначала резко уменьшается, а затем выходит на постоянное значение. При отсутствии конвективных членов выход скорости на постоянное значение невозможен.

Заметим, что ошибка, обусловленная неучетом конвективных членов в уравнении импульса в скин-слое, допускается не только в работе [1], но и в более поздних работах. Так, в [5] рассчитывалось распределение примеси в монокристалле кремния, получаемом методом бестигельной зонной плавки в магнитном поле. При этом поле скоростей в расплаве рассчитывалось с помощью метода, описанного в [1], и осреднялось по времени, а затем решалась стационарная задача о распределении примеси в растущем монокристалле. В [6] аналогичная задача определения поля скоростей и распределения примеси в растущем монокристалле решалась в трехмерной постановке. В работах [7, 8] рассматривались задачи, аналогичные решенным в [5, 6] соответственно, но при наличии дополнительного низкочастотного индуктора.

Существует также третий подход к решению задачи, который заключается в том, что силовое действие индуктора на расплав учитывается только как магнитное давление на его поверхность [9, 10]. В этом случае электроконвекция в расплаве отсутствует.

1. Вывод уравнения одномерного пограничного слоя. В работе [2] получено выражение для осредненной по периоду колебаний тока объемной плотности функции пондеромоторной силы, действующей на частицы расплава со стороны индуктора в окрестности свободной границы Г, в гауссовой системе единиц. В единицах системы СИ данная сила равна

$$\bar{f}_n(s,n) = \frac{\mu_0 H_s^2(s)}{2\varepsilon_m}\, \mathrm{e}^{-2n/\varepsilon_m},$$

где $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$ Н/А^2 — магнитная постоянная вакуума [11]; $\varepsilon_m = (\mu_0\gamma_m\omega_0/2)^{-1/2} = 2{,}854 \cdot 10^{-4}$ м — толщина скин-слоя; $\gamma_m = 1{,}111 \cdot 10^6$ $(\text{Ом}\cdot\text{м})^{-1}$ — коэффициент электропроводности расплава; $\omega_0 = 1{,}76 \cdot 10^7$ рад/с — круговая частота тока; s, n — переменные касательной и внутренней нормали к свободной границе Г, образующие положительно ориентированную систему координат; $H_s(s)$ — амплитуда колебаний во времени касательной компоненты вектора напряженности магнитного поля на свободной границе Г:

$$H_s^2(s) = H_0^2 f(s),$$

функция $f(s)$ имеет единичный максимум; $H_0 = 2{,}511 \cdot 10^4$ А/м — максимум функции $H_s(s)$ (см. [2. С. 31; 4. С. 83; 11. С. 488]).

Уравнение для завихренности $\omega(s,n)$ в окрестности свободной границы Г имеет вид [2, 3]

$$\nu_m\Big(\frac{\partial}{\partial s}\Big(\frac{1}{r}\,\frac{\partial\,(r\omega)}{\partial s}\Big) + \frac{\partial}{\partial n}\Big(\frac{1}{r}\,\frac{\partial\,(r\omega)}{\partial n}\Big)\Big) - u\,\frac{\partial\omega}{\partial s} - \hat{v}\,\frac{\partial\omega}{\partial n} = \frac{1}{\rho_m}\,\frac{\partial \bar{f}_n}{\partial s}, \tag{1}$$

где $\nu_m = 3{,}2 \cdot 10^{-7}$ м^2/с — кинематическая вязкость расплава; $\rho_m = 2530$ кг/м^3 — его плотность; u, $\hat{v}$ — компоненты вектора скорости частиц расплава в направлениях s, n; r — полярный радиус, зависимостью от которого в дальнейшем пренебрегается.

Проведем замену переменных

$$n = lE_m y, \qquad E_m = \varepsilon_m/l, \qquad s = lx,$$

где $l = 0{,}015$ м — характерный размер (толщина) расплавленной зоны; E_m — безразмерная толщина скин-слоя; x, y — новые независимые переменные. Тогда

$$\frac{\partial}{\partial n} = \frac{1}{lE_m}\,\frac{\partial}{\partial y}, \qquad \frac{\partial}{\partial s} = \frac{1}{l}\,\frac{\partial}{\partial x}.$$

Главный член в представлении завихренности имеет вид

$$\omega = \frac{1}{lE_m}\,\frac{\partial u}{\partial y}. \tag{2}$$

Уравнение (1) принимает вид

$$\frac{\nu_m}{l^3E_m^3}\,\frac{\partial^3 u}{\partial y^3} - \frac{1}{l^2E_m}\Big(u\,\frac{\partial^2 u}{\partial x\,\partial y} + v\,\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\Big) = \frac{\mu_0 H_0^2 f'(x)\,\mathrm{e}^{-2y}}{2\rho_m E_m l^2}, \qquad v = \frac{\hat{v}}{E_m}.$$

Проведя еще одну замену

$$u = v_1\tilde{u}, \qquad v = v_1\tilde{v}$$

($v_1 = 0{,}1$ м/с — характерная скорость [2, 4]) и опуская знак “$\sim$” над безразмерными компонентами вектора скорости, запишем уравнение пограничного слоя в безразмерном виде

$$\frac{\partial^3 u}{\partial y^3} - \frac{v_1 lE_m^2}{\nu_m}\Big(u\,\frac{\partial^2 u}{\partial x\,\partial y} + v\,\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\Big) = \frac{\mu_0 H_0^2 lE_m^2 f'(x)\,\mathrm{e}^{-2y}}{2\rho_m\nu_m v_1}. \tag{3}$$

Далее выполним аппроксимацию

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 2K_u\,\frac{u}{P_m^0}, \qquad f'(x) = \frac{2K_f}{P_m^0}, \tag{4}$$

где K_u, K_f — безразмерные подгоночные коэффициенты; $P_m^0 = 3$ — безразмерный периметр свободной границы.

Подставляя (4) в (3), находим
$$u''' - \frac{v_1 l E_m^2}{\nu_m}\Big(\frac{2K_u}{P_m^0}\, uu' + vu''\Big) = \frac{\mu_0 H_0^2 l E_m^2 K_f \,\mathrm{e}^{-2y}}{\rho_m \nu_m v_1 P_m^0}$$
(штрих означает производную по y).

Из уравнения неразрывности
$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0$$
получаем
$$v = -\int\limits_0^y \frac{\partial u}{\partial x}\, d\tilde{y} = -\frac{2K_u}{P_m^0}\int\limits_0^y u\, d\tilde{y}.$$
Тогда
$$u''' - C_1\Big(uu' - \int\limits_0^y u\, d\tilde{y}\, u''\Big) = C_2\,\mathrm{e}^{-2y}, \tag{5}$$
где
$$C_1 = \frac{2v_1 l E_m^2 K_u}{\nu_m P_m^0}, \qquad C_2 = \frac{\mu_0 H_0^2 l E_m^2 K_f}{\rho_m \nu_m v_1 P_m^0} \text{ —} \tag{6}$$
безразмерные параметры. При $K_u = 0{,}4$, $K_f = 1{,}3$ имеем
$$C_1 = 0{,}451\,25, \qquad C_2 = 22{,}973. \tag{7}$$

Таким образом, искомым одномерным уравнением пограничного слоя для касательной скорости $u(y)$ является уравнение (5), в котором учитываются (6), (7).

2. Вывод граничного условия. Граничное условие Марангони на свободной границе Γ имеет вид [12]
$$\boldsymbol{s}\cdot P\cdot \boldsymbol{n} = \frac{\partial\sigma}{\partial s}, \tag{8}$$
где $\boldsymbol{s}$, $\boldsymbol{n}$ — единичные векторы касательной и нормали к свободной границе; P — тензор напряжений; $\sigma(s)$ — функция поверхностного натяжения.

Можно показать, что имеет место приближенное равенство [2]
$$\boldsymbol{s}\cdot P\cdot \boldsymbol{n} = -\rho_m \nu_m \omega. \tag{9}$$
Характерное значение $\partial\sigma/\partial s$ равно
$$\frac{\partial\sigma}{\partial s} = \sigma_T\,\frac{\partial T}{\partial s} = -\frac{2\sigma_T\,\Delta T}{l P_m^0}, \tag{10}$$
где $\sigma_T = -\partial\sigma/\partial T = 10^{-4}$ Н/(м $\cdot$ К); ΔT — характерный перепад температуры. Вообще говоря, перегрев свободной границы расплава составляет приблизительно 40 К, однако наиболее существенно температура T изменяется на ее концах, а в центральной ее части можно положить $\Delta T = 3{,}75$ К (см. рис. 10,*а* в [2] или рис. 6,*а* в [4]). Подставляя (2), (9), (10) в (8), получаем
$$\frac{\partial u}{\partial y}\Big|_{y=0} = C_3 = \frac{2\sigma_T\,\Delta T\, E_m}{\rho_m \nu_m v_1 P_m^0} = 0{,}058\,67. \tag{11}$$
(Точное значение C_3, полученное из анализа данных [2, 4] при $s = lP_m^0/2$, составляет $C_3 = 0{,}059\,37$.)

3. Метод и результаты расчета. Уравнение (5) с константами C_1, C_2, определенными равенствами (6), (7), и начальными условиями Коши при $y = 0$ решаются с использованием явной схемы Эйлера. Вводятся функции

$$u_2 = u''(y), \qquad u_1 = u'(y), \qquad u_0 = u(y), \qquad u_{-1} = \int\limits_0^y u(\tilde{y})\, d\tilde{y}.$$

Отрезок $y \in [0, 10]$ разбивается на K равных частей, и решение разностной задачи осуществляется по следующему алгоритму.

1. Задаются начальные условия Коши

$$u_{-1,0} = 0, \qquad u_{0,0} = U_0, \qquad u_{1,0} = C_3, \qquad u_{2,0} = U_2. \tag{12}$$

2. Для всех $k = \overline{1, K}$ полагается

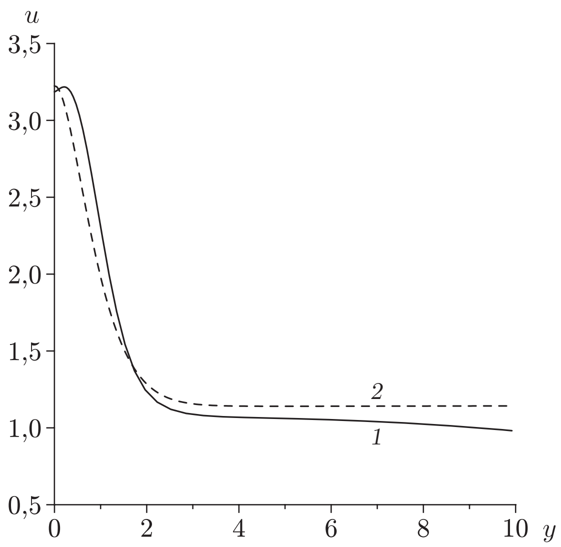
$$u_{2,k} = u_{2,k-1} + (C_1(u_{0,k-1}u_{1,k-1} - u_{-1,k-1}u_{2,k-1}) + C_2\, \mathrm{e}^{-2hk})h,$$
$$u_{\alpha,k} = u_{\alpha,k-1} + (u_{\alpha+1,k} + u_{\alpha+1,k-1})h/2, \qquad \alpha = \overline{1, -1},$$

где $h = 10/K$ — шаг сетки по переменной y; $u_{\alpha,k} = u_\alpha(hk)$; $k = \overline{0, K}$; $\alpha = \overline{-1, 2}$.

При фиксированном значении U_0 в (12) U_2 подбирается таким образом, чтобы $u_1(y) \to 0$ при $y \to 10$. В свою очередь U_0 подбирается таким образом, чтобы $u_0(y) \approx U_0/3$ при $y = 10$.

Результаты расчетов показывают, что решение задачи близко к полученному в [2, 4] при $K_u = 0{,}4$, $K_f = 1{,}3$ (см. (5)–(7)). При этом $K = 20\,000$, $U_2 = -7{,}3547$.

На рисунке показаны зависимость $u(y)$, полученная в результате решения полной задачи о бестигельной зонной плавке в магнитном поле (см. рис. 9,*б* в [2] и рис. 5,*б* в [4]), и аналогичная зависимость, полученная с помощью описанного выше метода пограничного слоя. Видно, что полученные зависимости достаточно близки, однако имеют следующее различие: в первом варианте $u''(0) = 7{,}6273$, во втором $u''(0) = -7{,}3547$. Устранить это различие не удалось, по-видимому, вследствие малого запаса устойчивости решения с положительной второй производной при $y = 0$.



Зависимость $u(y)$, полученная при решении полной задачи о бестигельной зонной плавке в магнитном поле при $x = P_m^0/2$ (*1*), и зависимость $u(y)$, полученная в настоящей работе с помощью метода пограничного слоя (*2*)

Пренебрегая конвективными членами в уравнении импульса в скин-слое, как это сделано в [1, 5–8], в уравнении (5) положим $C_1 = 0$. Тогда это уравнение принимает вид

$$u''' = C_2\, \mathrm{e}^{-2y}\,. \qquad (13)$$

Общее решение уравнения (13) запишем следующим образом:

$$u = -C_2\, \mathrm{e}^{-2y}/8 + A_0 + A_1 y + A_2 y^2.$$

Из граничного условия (11) находим

$$u'(0) = (C_2\, \mathrm{e}^{-2y}/4 + A_1 + 2A_2 y)\big|_{y=0} = C_2/4 + A_1 = C_3.$$

Отсюда следует

$$A_1 = C_3 - C_2/4 = 0{,}058\,67 - 5{,}743\,25 = -5{,}6846.$$

Константы A_0, A_2 определяются в ходе решения полной гидродинамической задачи. Очевидно, что при любых значениях этих констант функция $u(y)$ не может выходить на постоянное значение при $y \to \infty$.

Заключение. Выведено уравнение одномерного пограничного слоя в окрестности свободной границы для задачи о бестигельной зонной плавке в магнитном поле. На основе анализа этого уравнения показано, что конвективные члены играют в нем ключевую роль: в случае их наличия касательная скорость по мере удаления от свободной границы сначала резко уменьшается, а затем выходит на постоянное значение, а в случае их отсутствия профиль касательной скорости близок к параболическому и на постоянное значение выйти не может. Решение полной гидродинамической задачи показывает, что в первом случае касательная скорость, обусловленная наличием быстропеременного электромагнитного поля, вне скин-слоя на порядок выше, чем во втором. Поэтому обусловленный игнорированием конвективных членов в скин-слое перенос вызванной этим полем силы из уравнения импульса в граничное условие для завихренности является некорректным.

ЛИТЕРАТУРА

1. **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.
2. **Пивоваров Ю. В.** Моделирование конвекции расплава полупроводникового материала при зонной плавке: Дис. ... канд. физ.-мат. наук. Новосибирск, 2006.
3. **Пивоваров Ю. В.** Расчет движения жидкости с переменной вязкостью в области с криволинейной границей // Вычисл. технологии. 2005. Т. 10, № 3. С. 87–107.
4. **Пивоваров Ю. В.** Численное моделирование конвекции в плавающей зоне // Вычисл. технологии. 2006. Т. 11, № 5. С. 81–94.
5. **Muhlbauer A., Muiznieks A., Virbulis J.** Analysis of the dopant segregation effects at the floating zone growth of large silicon crystals // J. Crystal Growth. 1997. V. 180. P. 372–380.
6. **Ratnieks G., Muiznieks A., Buliguns L., et al.** 3D numerical analysis of the influence of EM and Marangoni forces on melt hydrodynamics and mass transport during FZ silicon crystal growth // Magnetohydrodynamics. 1999. V. 35, N 3. P. 223–236.
7. **Raming G., Muiznieks A., Muhlbauer A.** Numerical investigation of the influence of EM-fields on fluid motion and resistivity distribution during floating-zone growth of large silicon single crystals // J. Crystal Growth. 2001. V. 230. P. 108–117.

8. **Lacis K., Muiznieks A., Ratnieks G.** 3D mathematical model system for melt hydrodynamics in the silicon single crystal FZ-growth process with rotating magnetic field // Magnetohydrodynamics. 2005. V. 41, N 2. P. 147–158.
9. **Яковлев В. И.** О границах начального участка пленки расплава, формируемой при бестигельном зонном переплаве полупроводниковых материалов // ПМТФ. 2000. Т. 41, № 3. С. 139–148.
10. **Овчарова А. С.** Расчет жидкого моста при производстве монокристаллов методом бестигельной зонной плавки // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 2003. Т. 43, № 7. С. 1062–1071.
11. **Яворский Б. М.** Справочник по физике / Б. М. Яворский, А. А. Детлаф. М.: Наука, 1981.
12. **Андреев В. К.** Применение теоретико-групповых методов в гидродинамике / В. К. Андреев, О. В. Капцов, В. В. Пухначев, А. А. Родионов. Новосибирск: Наука. Сиб. отд-ние, 1994.

Поступила в редакцию 13/VIII 2021 г.,
после доработки — 7/IX 2021 г.
Принята к публикации 27/IX 2021 г.