

## 非定常三次元有限要素法による MCZ 融液の流れ解析

## —第 2 報 磁場の影響の考察—

Unsteady Three-Dimensional Finite Element Analysis of a MCZ Melt Flow  
—Investigation of Magnetic Field Effects—

大 島 ま り\*

Marie OSHIMA

## 1. はじめに

単結晶生成過程では、融液内の対流によって起こる熱および物質の輸送が結晶の品質に影響を与えるため、対流をコントロールすることは単結晶生成プロセスのうえで重要な課題である<sup>1)</sup>。近年、最も一般的に用いられている単結晶生成過程である CZ 法 (Czochralski Method) においては、シリコンなどの融液が導電性流体であることを利用した磁界印加引き上げ法 (Magnetic-Field Applied Czochralski Method: MCZ Method) が融液内の対流の抑制・コントロールする方法として提案されている<sup>2)</sup>。

磁場の配置としては、水平磁場<sup>3)</sup>、垂直磁場<sup>4)</sup>、最近ではカスプ磁場<sup>5)</sup>などについて実験を中心として研究が進められている。しかし、高温場でしかも磁場の存在のために、実験によって詳細な融液の流動挙動を把握するのは困難である。一方、プレ・ポストなどのコンピュータ技術および数値解析手法の発達により、実験計測では観測することのできない、るつぼ内部の流れを数値解析によりコンピュータ上に再現することが可能となってきた。

融液の磁場下での数値解析は、軸対称を中心に行われてきた<sup>6)</sup>が、三次元解析も行われるようになってきた<sup>7)</sup>。著書らは、有限要素法による三次元の電磁熱流体解析コードの開発を行ってきた<sup>8)</sup>。本論文では、特に磁場の融液流動パターンおよび温度の空間分布に与える影響に着目し、磁場の強度および磁場配位をパラメトリックに変化させることにより、融液の流動・温度挙動の解析を行った。解析は 5 ケースについて行い、水平磁場配位では非軸対称な流れおよび温度分布が観察され、磁場の融液の速度・温度の空間分布に与える影響について考察し、知見を深めた。

## 2. 有限要素法による三次元電磁熱流体解析

解析においては、磁場下における強制対流と自然対流の現象に注目している。また、シリコン融液の磁気レイノルズ数 ( $R_m = \mu_e \sigma_e R_c V$ , ここで  $\mu_e$  は透磁率,  $\sigma_e$  は電気伝導度,  $R_c$  はるつぼ半径,  $V$  は代表速度) は 1 より小さいため、磁場と速度場のカップリングがないと仮定でき、磁場については電気ポテンシャル  $\phi$  を用いて表すことができる。基礎方程式の導出についての詳細は、文献<sup>8)</sup>に記載している。

パラメトリックに磁場を変化させて磁場の影響を見るため、無次元化を基礎方程式にほどこす。その結果、無次元化された基礎方程式は以下の 4 式で表わされる。

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla P + \frac{1}{R_e} \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{G_r}{R_e^2} \mathbf{T} + \frac{H_a^2}{R_e} [-\nabla \phi \times \mathbf{B} + (\mathbf{u} \times \mathbf{B}) \times \mathbf{B}] \quad (2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T = \frac{1}{P_r R_e} \nabla^2 T \quad (3)$$

$$\nabla^2 \phi = \nabla \cdot (\mathbf{u} \times \mathbf{B}) \quad (4)$$

ここで、 $\mathbf{u}$ ,  $P$ ,  $T$ ,  $\mathbf{B}$  は速度ベクトル, 圧力, 温度, 磁束密度ベクトルである。また、式中の無次元数  $R_e$ ,  $G_r$ ,  $H_a$ ,  $P_r$  はおのおの、レイノルズ数, グラスホフ数, ハルトマン数, プラントル数であり、以下で与えられる。

$$R_e = \frac{\Omega_c R_c^2}{\nu}, \quad G_r = \frac{g \beta R_c^3 (T_h - T_c)}{\nu^2}, \quad P_r = \frac{\nu}{\alpha}, \quad H_a = B_0 R_c \sqrt{\frac{\sigma}{\rho \nu}} \quad (5)$$

ここで、 $R_c$ ,  $\Omega_c$ ,  $T_h$ ,  $T_c$ ,  $B_0$  はるつぼの半径, るつぼの回転速度, るつぼ壁の温度, 結晶/融液境界の温度, そして印加磁束密度の大きさである。また、 $\nu$ ,  $g$ ,  $\beta$ ,  $\alpha$ ,

\*東京大学生産技術研究所 第 2 部

$\alpha, \rho$  は融液の動粘性係数, 重力加速度, 体積膨張率, 熱拡散係数, 導電率, そして密度である。

重み付き残差法を用いて, 支配方程式(1)-(4)を弱形式化した後, ガラーキン有限要素法により空間方向の離散化を行う。なお, 用いた要素は速度一次・圧力ゼロ次の三次元六面体である。計算スキームには MAC 法を, 時間積分法にはオイラーの陽解法を用いている。

以上より, 解くべき有限要素行列方程式は以下で与えられる。

$$C^t M^{-1} C P^{n+1} = -\frac{1}{\Delta t} C^t u^n + C^t M^{-1} (B(u) u^n + D_u u^n - f_u^n) \quad (6)$$

$$D_\phi \phi + C_\phi u B = f_\phi \quad (7)$$

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t M^{-1} [C P^{n+1} - (B(u) u^n + D_u u^n) + f_u^n] \quad (8)$$

$$T^{n+1} = T^n + \Delta t M^{-1} [- (B(u) T^n + D_T T^n) + f_T^n] \quad (9)$$

ここで,  $M, C, C_k^t, B(u), D_k$  はおのおの, 質量, 勾配, 発散, 対流および拡散マトリックス,  $f_k^n$  は外力ベクトルである。添え字  $k=u, T, \phi$  に対応し, 添え字  $n$  は時間ステップを示す。

数値解析上, 記憶容量および計算時間などの計算負荷が最も大きい部分は, 圧力と電気ポテンシャルのポアソン方程式(6)と(7)である。そこで, 式(5)の  $C^t M^{-1} C$  は離散化されたラプラシアン, また式(6)の  $D_\phi$  もラプラシアンに相当することから, 正定値対称行列の最も効率的な高速解法である共役勾配法 (Conjugate Gradient Method) を用いる。したがって, アルゴリズムとしては共役勾配法により圧力と電気ポテンシャルを求めた後, 式(8)と(9)から, 速度と温度を求める。

### 3. 解析結果および考察

#### 3.1 解析モデル

図1にMCZ法による単結晶作成過程の融液の解析モデルを示す。また, 表1に解析形状および解析条件をまとめ, 表2に用いたシリコン融液の物理定数を示す。したがって, おのおのの無次元数は  $Re_c = 1154, Gr_c = 1.4 \times 10^6, Pr_c = 0.01$  を用いた。

速度境界条件については, 結晶部が速度  $\Omega_s$  で時計方向に, るつば部が速度  $\Omega_c$  で反時計方向に回転しており, 自由表面についてはスリップ条件をかしている。一方, 温度はるつば壁面および底面は高温  $T_h$  で, 結晶部はシリコンの融点温度である低温  $T_c$  に保たれている。また, るつばは絶縁壁とする。

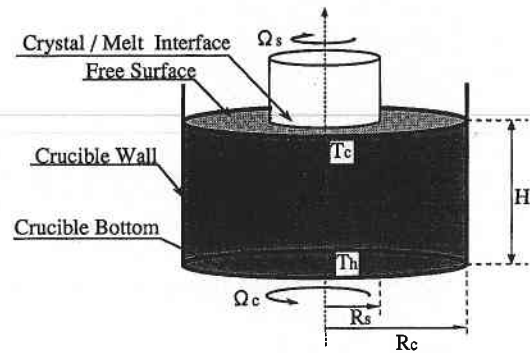


図1 磁界印加チヨクラルスキー法における解析モデル

表1 解析形状および解析条件

Parameters		
Crucible Radius	(cm) $R_c$	3.15
Crystal Radius	(cm) $R_s$	1.13
Melt Depth	(cm) $H$	3.15
Crystal / Melt Interface Temperature	(K) $T_c$	1685.0
Crucible Temperature	(K) $T_h$	1745.0
Crucible Rotation Rate	(rpm) $\Omega_c$	30.0
Crystal Rotation Rate	(rpm) $\Omega_s$	-15.0

表2 シリコ融液の物理定数

Physical Properties		
Melt Density	(g/cm <sup>3</sup> ) $\rho$	2.33
Kinematic Viscosity	(cm <sup>2</sup> /s) $\nu$	0.0043
Volumetric Expansion Coefficient	(/K) $\beta$	$1.41 \times 10^{-5}$
Thermal Diffusivity	(cm <sup>2</sup> /s) $\alpha$	0.125
Electrical Conductivity	(/Ω cm <sup>2</sup> ) $\sigma$	$1.25 \times 10^4$

磁場の影響を考察するため, 磁場配置および磁場の強度をパラメトリックに変化させた次の5ケースについて解析を行った。

- 1) Case 1 :  $Ha=0$
- 2) Case 1 :  $Ha=25$  (x-方向水平磁場)
- 3) Case 1 :  $Ha=25$  (z-方向垂直磁場)
- 4) Case 1 :  $Ha=50$  (x-方向水平磁場)
- 5) Case 1 :  $Ha=50$  (z-方向垂直磁場)

#### 3.2 解析結果

磁場なしの場合には, 図2に示されているように自然対流による大きな渦が中心部に, そして, 強制対流によると思われる小さな渦がるつば壁上部に見られる。それに対して, 磁場を印加した場合には, 図3に見られるようになる。るつば壁上部の渦は見られず, 自然対流による渦のみがるつば中心部に見られる。また, 印加磁場の方向により, 渦の生成および位置が変化するようすが図3より観察される。特に, 図4に示されているように, 水平磁場の場合には全体の流動・温度が抑制されるとともに, 非軸対称性がくずれ。このようなおのおのの磁場の影響を図5にまとめた。

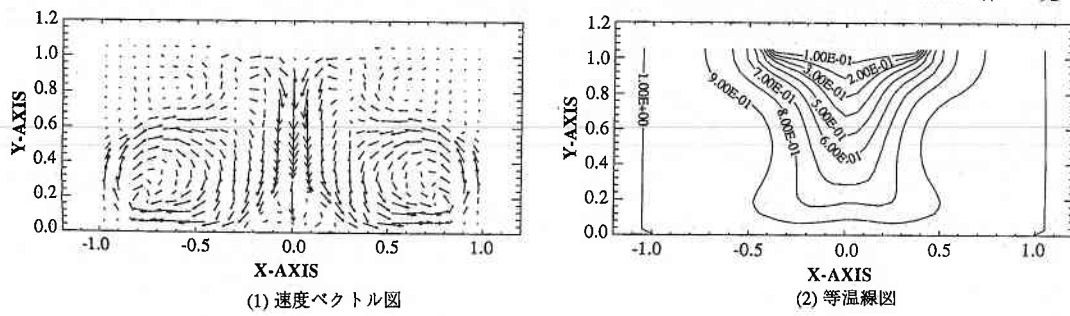


図 2 CASE 1 についての垂直断面上での速度および温度分布 ( $Ha=0$ )

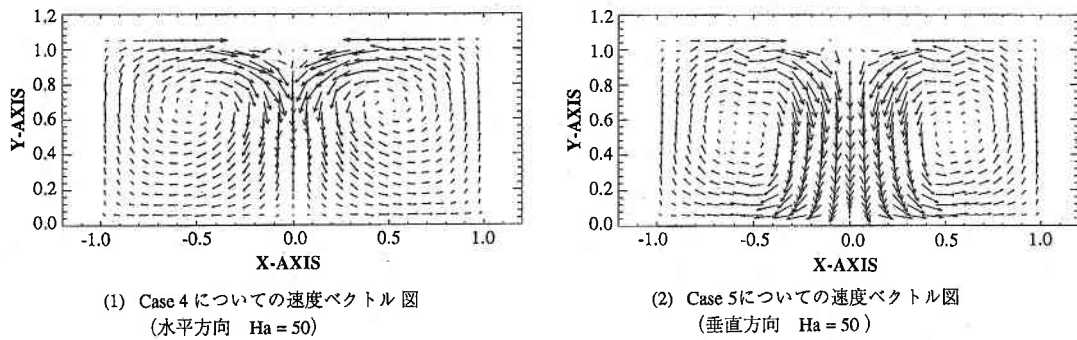


図 3 異なる印加磁場配位における垂直断面上での速度分布の比較

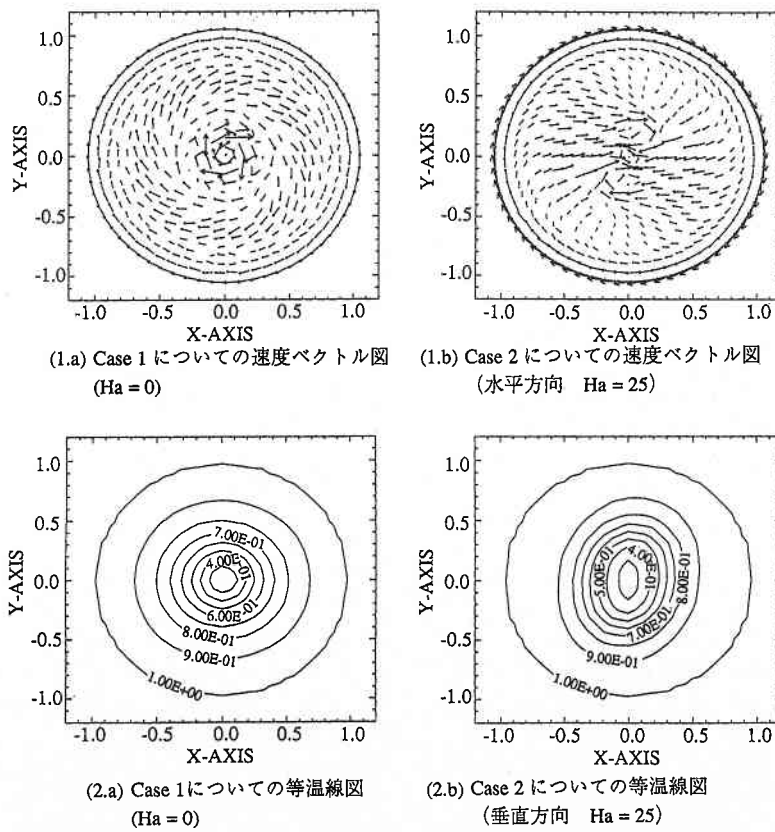


図 4 異なる印加磁場配位における 水平断面 ( $z=0.8H$ ) 上での速度および温度分布の比較

研究速報

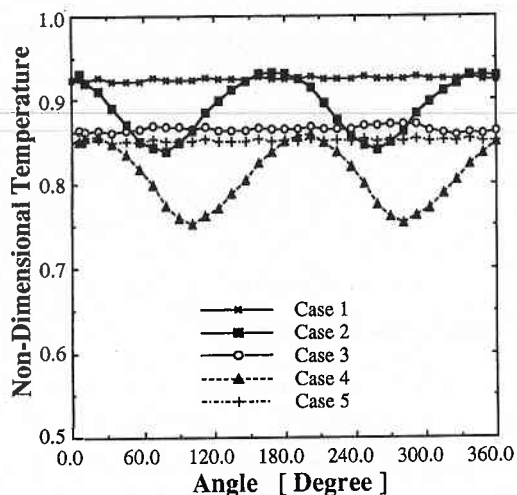


図5 異なる印加磁場配位における垂直断面 ( $z=0.8H$ ) 上周方向 ( $r=0.6R_c$ ) での温度分布の比較

図より、印加磁場が大きくなるにしたがい、温度は全体に抑制され、水平磁場の場合には約180°の空間周期をもって、温度が分布することが示されている。

通常、ローレンツ力により、磁場に対して垂直方向の速度成分が抑えられることから、定性的に磁場の融液の速度場および温度場の空間分布に与える影響の考察ができたといえるであろう。

4. おわりに

MCZ法における融液の流れの解析手法として有限要素法を用いて、非定常三次元における電磁熱一流動のた

めの数値解析コードの開発を行なった。解析コードを用いて、磁場の方向あるいは強度などのパラメーターを変化させたところ、以下の結論が得られた。

- 1) 垂直磁場の場合は流れの対称性を保つことができるが、磁場により流れ全体が抑制され、強制対流による影響が小さくなる。
- 2) 水平磁場の場合は磁場により流れ全体が抑制されると同時に、流れの対称性が乱され、空間方向に180°の周期をもつ非対称流れとなる。

本論文では、融液の流動パターンあるいは温度の空間分布に焦点をおいて、解析を行ってきた。今後は、単結晶生成過程で問題となる温度振動について、非定常解析を行うことにより非定常現象を考察する予定である。

(1993年11月10日受理)

参考文献

- 1) 中山恒, 機械の研究, 39 (1987), 131.
- 2) 干川圭吾 ほか1名, 日本結晶学会誌, 27 (1985), 177.
- 3) 星 金治 ほか2名, 半導体研究, 工業調査会 (1982), p. 256.
- 4) Hoshikawa, K., J. Crystal Growth, 21(1982), p. L545.
- 5) Hirata, H. and Hoshikawa, K., J. Crystal Growth, 125 (1992), p. 181.
- 6) Munakata, T. and Tanasawa, I., J. Crystal Growth, 106 (1990), p. 566.
- 7) Mihelcic, M. and Wingerath K., J. Crystal Growth, 82 (1987), p. 318.
- 8) 大島まり ほか2名, 機論, 562B (1993), p. 1848.