

## 非定常三次元有限要素法による MCZ 融液の流れ解析

Unsteady Three-Dimensional Finite Element Analysis of a MCZ Melt Flow

大 島 ま り \*  
Marie OSHIMA

## 1. は じ め に

近年の著しい情報化社会の発達には、半導体をはじめとするエレクトロニクス技術の進歩に起因する。最近では、半導体製品は超高密度化し、さらに高信頼性が要求されるようになり、その設計・製造過程が極度に困難になってきている<sup>1), 2)</sup>。これまではドライ・アンド・エラーにより設計の変更と製造過程の改良を行い、製品を完成してきたが、高品質の大口径単結晶の作成が要求される現在では、従来の手法では膨大な費用と期間を必要とし、経済性および生産性の上で効率的でない。このような状況を打破する方法として注目されているのがシミュレーション技術である。コンピュータの記憶容量と演算速度の飛躍的な進歩とグラフィクス能力の向上により、シミュレーション技術はさまざまな分野に応用され始め、単結晶作成過程においても複雑な物理現象を解明するために、積極的に用いられるようになってきた<sup>3)</sup>。

大口径単結晶の作成過程は、一般にチョクラルスキー (Czochralski: CZ) 法が用いられている<sup>1)</sup>。結晶品質低下の原因としては、不純物の非均一分布および温度変動による「しま」が考えられ、これらは作成時における融液の流動および温度挙動によって引き起こされる<sup>4)</sup>。したがって、融液内の熱流動挙動を定量的に評価することは必要不可欠であり、数値解析手法が重要な役割をはたしている。

CZ りつば内の流動現象には、図 1 に示すように、1) りつばと結晶の回転による強制対流、2) りつば壁の温度差による自然対流、3) 自由表面上のマランゴニ対流、などが上げられる<sup>5)</sup>。融液内の流れは、このような対流により、非軸対称の三次元的な流れであり、また非定常現象の影響である温度振動を示す<sup>6)</sup>。最近では、結晶品質劣化の原因を作る熱対流をコントロールするために、半導体融液が導電性流体であることを利用して、CZ 装置に磁場を印加する MCZ (Magnetic CZ) 法が有効な

\* 東京大学生産技術研究所 第 2 部

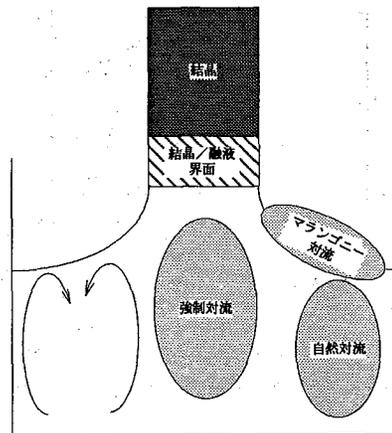


図 1 CZ りつば内の熱流動現象

方法として提案されている<sup>7)-9)</sup>。

本研究では、MCZ 法における融液の流れの挙動を把握するために、有限要素法を用いて非定常三次元における電磁—熱—流動のための数値解析コードの開発を行っている。そこで、本報では、磁場の方向あるいは強度などのパラメータを変化させることにより、磁場の融液の流れおよび温度挙動に与える影響を考察した。

## 2. 電磁熱流体の基礎方程式

MCZ 法における融液の熱流動解析では、流体場と温度場および電磁場の支配方程式を連成させて、解く必要がある<sup>10)-12)</sup>。

融液は非圧縮性流体と仮定できる。また、融液の電磁流体の特徴として、融液中の誘電電流によって生じる電磁場は無視することができ、内部磁場は時間によらず一定であると仮定できる。

以上の仮定により、磁場の影響を考慮した融液の熱流体解析のための支配方程式は、流体場については連続の式とナビエ・ストークスの式、温度場については熱移流拡散の式、電磁場については電気ポテンシャルのポアソ

ンの式の計四式からなる。

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} \vec{u} = -\frac{1}{\rho} \vec{\nabla} P + \nu \nabla^2 \vec{u} - \beta \vec{g}(T - T_s) + \frac{1}{\rho} \vec{j} \times \vec{B} \tag{2}$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot (\vec{u}T) + k \nabla^2 T \tag{3}$$

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

ここで、 $\vec{u}$  は速度ベクトル ( $u, v, w$ )、 $p$  は圧力、 $T$  と  $T_s$  は温度と基底温度、 $\rho$  は密度、 $\nu$  は動粘性係数、 $\beta$  は体積膨脹係数、 $\vec{g}$  は重力加速度ベクトル、 $\vec{j}$  は電流密度ベクトル、 $\vec{B}$  は磁束密度ベクトル、 $k$  は熱伝導率、 $\phi$  は電気ポテンシャルである。(2)式の右辺第三項の  $\beta \vec{g}(T - T_s)$  はブシネスク近似に基づく自然対流による外力項であり、第四項の  $\frac{1}{\rho} (\vec{j} \times \vec{B})$  は電磁力による外力項である。なお、 $\vec{j}$  は電気ポテンシャルを導入し、オームの法則を用いることにより次のように与えられる。

$$\vec{j} = \sigma (-\vec{\nabla} \phi + \vec{u} \times \vec{B}) \tag{5}$$

ここで、 $\sigma$  は融液の導電率である。

### 3. 有限要素法による離散化

有限要素法では支配方程式(1)-(5)を重み残差法を用いて弱形式化した後、ガラーキン法により空間方向の離散化を行う。

時間方向の離散化は速度あるいは圧力の取り扱いにより陽解法、準陽解法、準陰解法および陰解法と分類される。ここでは、速度を陽に圧力を陰に扱いながら圧力を緩和していく MAC 法について述べる。

MAC 法に基づく有限要素行列式は以下のようになる。

$$\mathbf{C}^t \mathbf{M}^{-1} \mathbf{C} \mathbf{p}^{n+1} = -\frac{1}{\Delta t} \mathbf{C}^t \mathbf{u}^n + \mathbf{C}^t \mathbf{M}^{-1} [\mathbf{B}(\mathbf{u}) \mathbf{u}^n + \mathbf{D}_u \mathbf{u}^n - \mathbf{f}^n_u] \tag{6}$$

$$\mathbf{D}_\phi \phi_n = -\mathbf{C}^t_\phi \mathbf{u}^n b + \mathbf{f}^n_\phi \tag{7}$$

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^n + \Delta t \mathbf{M}^{-1} [\mathbf{C} \mathbf{p}^{n+1} - (\mathbf{B}(\mathbf{u}) \mathbf{u}^n + \mathbf{D}_u \mathbf{u}^n) + \mathbf{f}^n_u] \tag{8}$$

$$\mathbf{T}^{n+1} = \mathbf{T}^n + \Delta t \mathbf{M}^{-1} [-\mathbf{B}(\mathbf{u}) \mathbf{T}^n + \mathbf{D}_T \mathbf{T}^n] + \mathbf{f}^n_T \tag{9}$$

ここで、 $\mathbf{M}$ 、 $\mathbf{C}$ 、 $\mathbf{C}^t_k$ 、 $\mathbf{B}$ 、 $\mathbf{D}_k$  はそれぞれ、質量、勾配、発散、対流および拡散マトリックスを表す。添字  $k = u, T, \phi$  は速度、温度、電気ポテンシャルの式に相当する。

(6)式の  $\mathbf{C}^t \mathbf{M}^{-1} \mathbf{C}$  は離散化されたラプラシアンに相当し、対称正定値の行列となる。したがって、(6)と(7)式は共役勾配 (CG) 法を適用することにより、計算の効率化を図ることができる。

### 4. 解析結果および考察

#### 4.1 解析モデル

図 2 に、CZ 法による単結晶作成過程の融液の解析モデルを示す。一般には融液部の境界条件のみを取り出して設定することは難しく、実験あるいは全体モデルによ

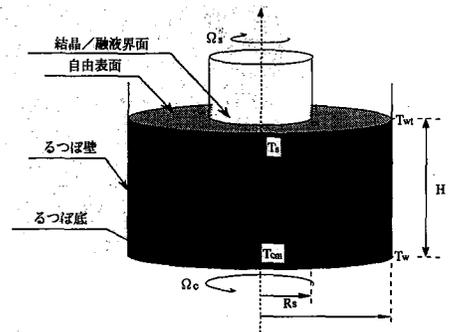


図 2 MCZ 法における解析モデル

表 1 解析形状および境界条件

解析条件			
るつぼ半径	(cm)	Rc	3.150
結晶半径	(cm)	Rs	1.125
融液深さ	(cm)	H	3.600
結晶/融液界面温度	(K)	Ts	1685.0
るつぼ底面中心温度	(K)	Tcm	1705.0
るつぼ壁底部温度	(K)	Twb	1745.0
るつぼ壁上部温度	(K)	Twt	1745.0

る解析結果との融合が必要となる<sup>12)</sup>。解析では、以上の点を念頭においた上で境界条件を設定し、モデル解析を行った。

1) るつぼは、速度  $\Omega_c$  で回転している。るつぼの温度に関しては、底辺中心部で  $T_{cm}$ 、下部壁の温度が  $T_{wb}$ 、上部壁の温度が  $T_{wt}$  である。底辺部では中心から半径  $r$  方向に、るつぼ壁では底面からの融液の深さ  $z$  方向に線形に変化するような温度分布をつける。

2) 自由表面の形状は平坦とする。速度に関しては、自由表面上では free slip として、自由表面を通しての熱の収支はないものとする。

3) 固体/融液は速度  $\Omega_s$  で回転しており、固体/融液の形状は定常で、平坦とする。温度に関しては  $T_s$  の一定温度とする。

4) るつぼは、絶縁壁とする。

#### 4.2 解析結果

解析はシリコン融液について行った。したがって、物理定数のシリコンのものを用い、解析に用いた形状および境界条件は、表 1 にまとめる。

磁場の融液挙動に与える影響を観察するために、垂直磁場および水平磁場を印加した場合の速度分布と温度分布を、磁場なしの場合と比較した結果を図 3 に示す。磁場は、おのおのの方向に 1000.0 ガウスを印加し、流れが定常状態に達すると思われる無次元時間 30.0 秒の分布を表している。

磁場印加をすることにより、磁場印加方向に対して垂

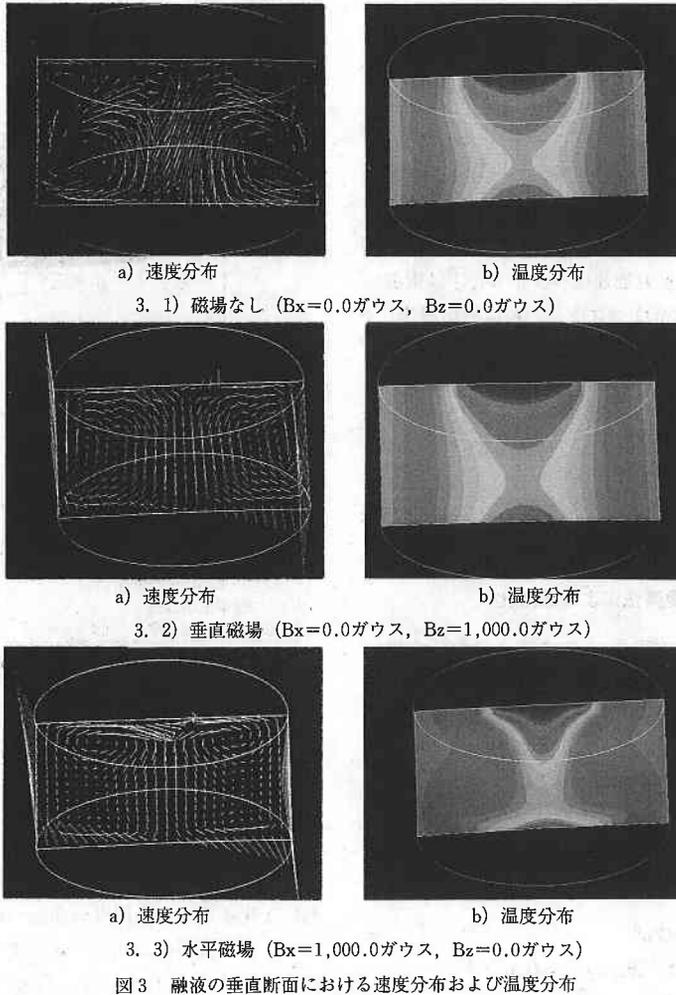


図 3 融液の垂直断面における速度分布および温度分布

直方向の対流が大幅に抑制されるようすが観測される。垂直方向に印加した場合には、水平方向流れが抑制されるため、磁場なし (図3.1) の場合には、強制対流による二次渦が存在するのに対して、自然対流による一次渦しか観測されない。また、水平方向磁場の場合には、垂直方向流れが抑制されるために、るつぼ底面と上部の2箇所に渦が分かれて発生し、流れのパターンの対称性が乱される。

解析でも確かめられたように、垂直磁場は流れの対称性を保つことができる。しかし、磁場なしの場合と比較して、磁場により流れ全体が抑制され、強制対流によるミキシング効果がつたわりにくいため、自由表面付近に不純物層が形成され結晶内の不純物濃度が高くなると思われる。一方、水平磁場では流れの対称性が乱れるため、結晶/融液境界面に不均一な温度じまあるいは不純物分

布が引き起こされる可能性がある。

## 5. 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—流体のための数値解析コードの開発を行った。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、非対称性となる。

(1992年10月26日受理)

## 参 考 文 献

- 1) 中山恒, 機械の研究, 第39巻, p.131 (1987).
- 2) 高須信一郎 他, 応用物理, 第59巻, p.1044 (1990).
- 3) Brown, R.A., et al., Journal of Crystal Growth, Vol.97, p.99 (1989).
- 4) 今石宣之 他, 化学工業, 第52巻, p.803 (1988).
- 5) Cartwright, R., et al., Journal of Crystal Growth Vol.94, p.321 (1989).
- 6) Kakimoto, K., et al., Journal of Crystal Growth, Vol.94, p.412 (1989).
- 7) 干川圭吾, 日本結晶結晶学会誌, Vol.37 (1985).
- 8) Ozoë, H., et al., Int. J. Heat Mass Transfer, Vol.32, p.1939 (1989).
- 9) 平田洋 他, Journal of Crystal Growth, Vol.96, p.747 (1989).
- 10) Mihelcic, M., et al. Journal of Crystal Growth, Vol.82, p.318 (1987).
- 11) 沢田郁夫 他, 製鉄研究, 330号, p.43 (1988).
- 12) 大島まり 他, 日本シミュレーション学会第12回計算電気・電子工学シンポジウム論文集, p.53 (1991).