

直拉法晶体生长过程非稳态流体热流耦合

黄伟超 刘丁 焦尚彬 张妮

Thermo-fluid coupling of unsteady flow in Czochralski crystal growth

Huang Wei-Chao Liu Ding Jiao Shang-Bin Zhang Ni

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 208102 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.208102

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.208102>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I20>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

定向凝固过程中枝晶侧向分枝生长行为与强制调控规律

Growth behaviors and forced modulation characteristics of dendritic sidebranches in directional solidification

物理学报.2015, 64(14): 148101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.148101>

基于元胞自动机方法的定向凝固枝晶竞争生长数值模拟

Simulation of dendritic competitive growth during directional solidification using modified cellular automaton method

物理学报.2014, 63(18): 188102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.188102>

5 at%Yb³⁺: YNbO₄ 的提拉法晶体生长和光谱特性

Growth and spectral properties of 5 at%Yb:YNbO₄ crystal

物理学报.2012, 61(22): 228103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.228103>

Pr_{1-x}Ce_xB₆ 阴极材料的原位反应合成及性能研究

Synthesis and properties of multiple boride Pr_{1-x}Ce_xB₆ cathodes by reactive spark plasma sintering

物理学报.2012, 61(22): 228104 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.228104>

掺铈 YVO₄ 晶体的发光特性及铈离子的价态分析

Spectroscopic properties of cerium doped YVO₄ crystals and analysis on valence state of cerium ion

物理学报.2012, 61(22): 228105 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.228105>

直拉法晶体生长过程非稳态流体热流耦合*

黄伟超¹⁾²⁾ 刘丁^{1)2)†} 焦尚彬¹⁾ 张妮²⁾

1)(西安理工大学, 晶体生长设备及系统集成国家地方联合工程研究中心, 西安 710048)

2)(陕西省复杂系统控制与智能信息处理重点实验室, 西安 710048)

(2015年5月19日收到; 2015年6月18日收到修改稿)

为了改善复杂对流形态下的晶体生长品质, 提出了一种改进的格子 Boltzmann 方法研究非稳态熔体流动和传热的耦合性质. 该方法基于不可压缩轴对称 D2Q9 模型, 构建了包含旋转惯性力和热浮力等外力项的演化关系, 实现了对轴对称旋转流体的速度、温度和旋转角速度的计算与分析. 结果表明, 非稳态熔体中的流、热耦合性质与格拉斯霍夫数和雷诺数的相互作用有关; 通过调节高雷诺数, 可有效抑制熔体中的自然对流, 改善温度分布, 有助于提高单晶的品质. 数值计算结果与实际硅单晶生长试验均证明了所提方法的正确性及有效性.

关键词: 格子 Boltzmann, 晶体生长, 轴对称旋转, 热流耦合

PACS: 81.10.-h, 47.11.Qr, 47.55.pb, 82.70.-y

DOI: 10.7498/aps.64.208102

1 引言

半导体晶体材料及其属性在计算机和通信领域占有至关重要的地位. 直拉 (CZ) 法是目前制备高品质集成电路用半导体材料的主要方法. 在 CZ 法晶体生长系统中, 由温度梯度产生的自然对流, 以及由坩埚、晶体旋转产生的强迫对流相互作用, 使坩埚内的熔体存在不稳定的热场和流动形态复杂的流场. 这种热、流耦合的情况在热动力学和流体动力学领域都属于十分复杂的问题. 涡流和热效应相互耦合产生了非稳态流场, 它加大了整个系统建模与控制的难度, 而且是影响晶体品质的主要因素. 因此, 研究晶体生长过程熔体中非稳态流场的热、流耦合机理及温度分布特性, 是改进晶体生长工艺、提高晶体品质的重要途径.

晶体生长过程时间长、工艺复杂多变、成本高, 完全依靠试验手段进行研究是不可行的. 数值仿真的方法由于具有时效快、成本低、实现简单的优

势被广泛采用. 有限元、有限差分等传统计算流体动力学 (CFD) 的方法已经应用到晶体生长研究的数值仿真中, 并取得了相当有价值的成果^[1-4]. 这些方法都是在宏观层面求解 Navier-Stokes (N-S) 方程中离散化的对流项, 实现流体数值计算. 宏观方法需要选择合适的对流模型, 对于晶体生长这种复杂对象来说, 不同的对流模型对计算结果的影响很大, 因此无法精确确定对流模型及相关参数. 格子 Boltzmann 方法 (LBM) 是一种介于宏观 N-S 方程和微观分子运动理论之间的介观方法, 它假设流体是由若干粒子组成, 这些粒子比流体分子的级别大, 但是在宏观上又认为是无限小; 单一粒子的运动不会影响宏观结构, 可以通过构造有规律的演化机理对流体粒子进行演化计算, 从而得到相关物理量的数值结果. 经过 20 多年的发展, LBM 已经广泛应用于复杂流固问题、多相流、热流分布等多个领域的研究^[5-7]. 在晶体生长的研究方面, Halliday 等^[8]提出了一种轴对称 D2Q9 模型, 并模拟了等温轴对称流动; Peng 等^[9]用混合模式研究

* 国家自然科学基金重点项目 (批准号: 61533014)、国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2014CB360500) 和高等学校博士学科点专项科研基金 (批准号: 2013611813001) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: Liud@xaut.edu.cn

直拉法晶体生长中的轴对称熔体流动; Weinstein 和 Miller^[10] 提出了三维模型的熔体流动、热传递和晶面生长的数值模拟方法, 并数值仿真了生长界面处的运动变化情况; Huang 等^[11] 给出了 CZ 法晶体生长中精确的轴对称旋转 LBM 模型. 这些成果为 LBM 在晶体生长领域的应用奠定了基础, 从不同的角度研究了熔体对流和温度分布, 但是对于晶体生长过程中非稳态熔体的流、热耦合与晶体品质关系的研究却很少.

本文将晶体生长模型近似为二维轴对称旋转模型, 并将其转化到标准 LBM 的笛卡尔坐标系下求解. 研究 CZ 法晶体生长的基础是 Wheeler benchmark 问题, 因此将熔体中的对流和传热作为主要研究内容. 文中构建了包含二维轴对称旋转的 LBM 演化方程组, 简化熔体区域为方腔形状, 采用 D2Q9 模型求解格子 Boltzmann 方程非稳态熔体中的流体速度, 采用 D2Q4 模型求解温度和旋转角速度; 分析在高雷诺 (Re) 数和高格拉斯霍夫 (Gr) 数相互作用下非稳态熔体的热、流耦合关系, 得出旋转产生的强迫对流能够抑制自然对流, 改善温度分布. 通过硅单晶生长试验, 证明本文给出的模型数值仿真实验正确, 有助于实际的生产工艺.

2 数学模型

2.1 控制方程

CZ 法晶体生长的二维轴对称结构如图 1 所示. 上层部分是直径为 R_X 、旋转角速度为 Ω_X 的晶体区域; 下层部分是直径为 R_C 、高度为 H 、旋转角速度为 Ω_C 的熔体区域. 晶体和熔体同轴心, 直径 $R_X = 0.4R_C$, 旋转角速度方向相反. 在圆柱坐标系中的控制方程如下:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial(ru)}{\partial r} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0, \quad (1a)$$

$$u \frac{\partial u}{\partial r} + w \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} + v \left(\nabla^2 u - \frac{u}{r^2} \right) + \frac{v^2}{r}, \quad (1b)$$

$$u \frac{\partial v}{\partial r} + w \frac{\partial v}{\partial z} = v \left(\nabla^2 v - \frac{v}{r^2} \right) - \frac{uv}{r}, \quad (1c)$$

$$u \frac{\partial w}{\partial r} + w \frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + v \nabla^2 w + g\beta(T - T_c), \quad (1d)$$

$$u \frac{\partial T}{\partial r} + w \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{k}{\rho c_p} \nabla^2 T, \quad (1e)$$

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \quad (1f)$$

式中, u, v, w 分别表示径向、方位角和轴向的速度分量; p 是压力; T 是熔体温度; T_c 是坩埚侧壁温度; v 是动态黏度系数; g 是重力加速度; β 是热膨胀系数; k 是热扩散率; ρ 是熔体密度; c_p 是潜热.

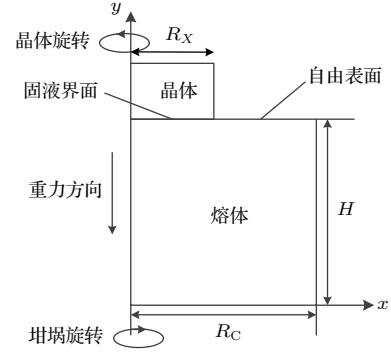


图 1 晶体生长的二维轴对称结构图

Fig. 1. The two-dimensional axisymmetric structure of crystal growth.

2.2 标准格子 Boltzmann 方法

目前, 在 LBM 中, 应用最为广泛的是 LBGK (lattice-Bhatnagar-Gross-Krook) 模型^[12]. 以二维直角坐标系为例, 标准 LBM 的演化方程为

$$f_i(x + \delta e_{ix}, y + \delta e_{iy}, t + \delta) - f_i(x, y, t) = -\frac{1}{\tau} (f_i(x, y, t) - f_i^{\text{eq}}(x, y, t)), \quad (2)$$

式中, τ 是单松弛时间, 表示平衡状态的衰减速度; f_i 是 t 时刻某点 (x, y) 处沿 i 方向粒子的速度分布函数; δ 是时间步长; f_i^{eq} 是平衡态分布函数, 可表示为

$$f_i^{\text{eq}} = \rho \omega_i \left[1 + \frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} \right)^2 - \frac{\mathbf{u}^2}{2c_s^2} \right], \quad (3)$$

式中, $\mathbf{e}_i (e_{ix}, e_{iy})$ 是沿 i 方向的粒子速度; ω_i 是数值积分公式的权系数; $\mathbf{u} (u_x, u_y)$ 是粒子在 x, y 方向的速度分量; $c_s = \sqrt{3}/3c$, c 是格子速度, 表示网格步长和时间步长的比值. 宏观流体的密度 ρ 和动量 $\rho \mathbf{u}$ 可以通过分布函数得到:

$$\rho = \sum_{i=0}^N f_i, \quad \rho \mathbf{u} = \sum_{i=0}^N f_i \mathbf{e}_i.$$

2.3 轴对称旋转格子 Boltzmann 方程

对于轴对称格子 Boltzmann 方法处理晶体生长问题, 需要将圆柱坐标系的控制方程转化到二维笛卡尔坐标系下. 在本文中, 将坐标轴 (z, r) 变为 (y, x) , 对称轴为 y 轴, 将速度分量 (u, v, w) 变为 (u, w, v) , 就得到了一个伪笛卡尔坐标系统. 在伪笛卡尔坐标系统下, 将上述圆柱坐标系的控制方程 (1) 转化如下:

$$\partial_b u_b = -\frac{u}{x}, \quad (4a)$$

$$\begin{aligned} & \partial_t u_a + \partial_b (u_b u_a) + \frac{1}{\rho} \partial_b p - v \partial_b (\partial_b u_a) \\ &= -\frac{u_a u}{x} + \frac{v}{x} \left(\partial_x u_a - \frac{u}{x} \delta \right) + \frac{w^2}{x} \delta + G, \end{aligned} \quad (4b)$$

$$\begin{aligned} & \partial_t v + \partial_b (u_b v) \\ &= v \partial_b (\partial_b v) + \frac{v}{x} \left(\partial_x v - \frac{v}{x} \right) - 2 \frac{uv}{x}, \end{aligned} \quad (4c)$$

$$\partial_t T + \partial_b (u_b T) = k \partial_b (\partial_b v) + S_T, \quad (4d)$$

式中, u_a 表示速度 u 或者 w ; u_b 表示 x, y 方向的速度分量 ($b = x, y$); G 是热浮力, 在 Boussinesq 假设下可以表示为 $G = g\beta(T - T_c)\delta e_i$; 能量方程 (4d) 的源项 $S_T = (k/x)\partial_x T - T(u/x)$, k 由普朗特数 Pr 决定.

本文在轴对称、不可压缩格子 Boltzmann D2Q9 模型^[13] 中加入热浮力和旋转惯性力, 演化方程由 (2) 式变为

$$\begin{aligned} & f_i(x + \delta e_{ix}, y + \delta e_{iy}, t + \delta) - f_i(x, y, t) \\ &= -\frac{1}{\tau} (f_i(x, y, t) - f_i^{\text{eq}}(x, y, t)) \\ &+ \delta \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) G f_i^{\text{eq}} + \delta F, \end{aligned} \quad (5)$$

式中, $\delta(1 - 1/(2\tau))G f_i^{\text{eq}}$ 表示由加热引起的热浮力项, δF 表示由坍塌和晶体旋转而产生的惯性力项. 离散速度 D2Q9 模型结构如图 2 所示, 权重系数 ω_i 和粒子速度 e_i 可表示为

$$\begin{aligned} \omega_i &= 4/9, & e_i &= (0, 0), & i &= 0, \\ \omega_i &= 1/9, & e_i &= (\cos[(i-1)\pi/2], \\ & \sin[(i-1)\pi/2]), & i &= 1, 2, 3, 4, \\ \omega_i &= 1/36, & e_i &= (\cos[(2i-1)\pi/4], \\ & \sin[(2i-1)\pi/4]), & i &= 5, 6, 7, 8. \end{aligned}$$

无量纲单松弛时间 τ 与流体黏度系数满足关系为 $\nu = c_s^2 \delta (\tau - 0.5)$. 在演化方程中外加惯性力源项 F 表示为

$$F = \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) F_a \frac{e_i - u}{c_s^2} f_i^{\text{eq}}, \quad (6)$$

式中, F_a 是由伪笛卡尔坐标系下的流体动量方程转化得到. 本文通过 Chapman-Enskog 展开演化方程的泰勒级数给出 F_a 的表示形式为

$$\begin{aligned} F_a &= -\frac{u_a u}{x} + \frac{v}{x} \left(\partial_x u_a - \frac{u}{x} \delta \right) \\ &+ \frac{v^2}{x} \delta - \frac{\omega_i \rho u}{x}. \end{aligned} \quad (7)$$

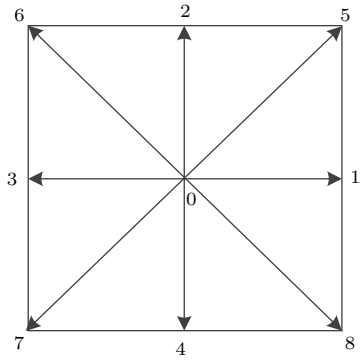


图 2 离散速度 D2Q9 模型

Fig. 2. The discrete velocity vectors for D2Q9.

2.4 热扩散和旋转角速度的格子 Boltzmann 方程

利用 LBM 求解流体中的热扩散问题, 又称为热格子 Boltzmann 方法. 本文解决热扩散问题是采用基于 Boussinesq 假设的耦合格子 BGK (CLBGK) 模型^[14]. 温度场采用了 D2Q4 模型的温度分布函数, 其演化方程如下:

$$\begin{aligned} & T_i(x + \delta e_{ix}, y + \delta e_{iy}, t + \delta) - T_i(x, y, t) \\ &= -\frac{1}{\tau_T} (T_i(x, y, t) - T_i^{\text{eq}}(x, y, t)) + \delta S_i, \end{aligned} \quad (8)$$

式中, $i = 1, 2, 3, 4$, 其平衡态温度分布函数为 $T_i^{\text{eq}} = 0.25T(1 + 2e_i \cdot u/c^2)$; 宏观温度由温度分布函数求得, $T = \sum_{i=1}^4 T_i$; τ_T 是无量纲温度分布松弛时间, 与热扩散系数的关系为 $k = 0.5c^2(\tau_T - 0.5)$; S_i 更新了 (4d) 式中的源项 S_T , 定义 $S_i = 0.25S_T$.

对于动量方程旋转角速度的求解, 引入了第三个格子 Boltzmann 方程. 角速度分布函数与温度分

布函数类似, 采用 D2Q4 模型, 其演化方程为

$$h_i(x + \delta e_{ix}, y + \delta e_{iy}, t + \delta) - h_i(x, y, t) = -\frac{1}{\tau_h}(h_i(x, y, t) - h_i^{eq}(x, y, t)) + \delta I_i, \quad (9)$$

式中, $i = 1, 2, 3, 4$, 其平衡态角速度分布函数为 $h_i^{eq} = 0.25v(1 + 2e_i \cdot u/c^2)$; 宏观温度由温度分布函数给出, $v = \sum_{i=1}^4 h_i$; τ_h 是无量纲角速度分布松弛时间, 与运动黏度系数的关系为 $v = 0.5c^2(\tau_h - 0.5)$; 定义源项 $I_i = 0.25[v(\partial_x w - w/x) - 2uw]/x$.

3 边界条件与无量纲参数

3.1 边界条件

对于流动和传热问题, 确定完善的边界条件是十分重要的. 在 CZ 法晶体生长熔体中包括三种不同类型的边界, 分别是对称轴边界、壁面边界以及自由表面边界. 对称轴边界使用镜面反弹格式, 粒子迁移过后, 通过 (5) 式可以得到在 2, 3, 4, 6, 7 方向的分布函数, 如图 2 所示, 1, 5, 8 方向的分布函数可以通过镜面反弹格式得到, 即 $f_1 = f_3, f_5 = f_6, f_8 = f_7$; 在自由表面边界处依然使用镜面反弹格式, 粒子迁移过后, 可以得到在 1, 2, 3, 5, 6 方向的分布函数, 4, 7, 8 方向的分布函数可以通过镜面反弹格式得到, 即 $f_4 = f_2, f_7 = f_6, f_8 = f_5$. 其余边界都属于壁面边界, 采用非平衡态分布外推格式 [15].

在本文中, 定义 $\lambda_1 = H/R_C, \lambda_2 = R_X/R_C$, 具体的速度和温度边界条件设定如下: 当 $x = 0, 0 \leq y \leq \lambda_1$, 则 $u = w = \frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial T}{\partial x} = 0$; 当 $x = 1, 0 \leq y \leq \lambda_1$, 则 $u = v = 0, w = \Omega_C R_C, T = T_C$; 当 $y = 0, 0 \leq x \leq 1$, 则 $u = v = \frac{\partial T}{\partial y} = 0, w = x\Omega_C R_C$; 当 $y = \lambda_1, 0 \leq x \leq \lambda_2$, 则 $u = v = 0, w = x\Omega_X R_X, T = T_X$; 当 $y = \lambda_1, \lambda_2 \leq x \leq 1$, 则 $\frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial w}{\partial y} = v = 0, T = T_X + \frac{(x - \lambda_2)}{(1 - \lambda_2)}(T_C - T_X)$.

3.2 无量纲参数

文中涉及的无量纲参数包括晶体旋转产生的雷诺数 Re_x 、坩埚旋转产生的雷诺数 Re_c 、普朗特数 Pr 以及格拉斯霍夫数 Gr . 这些参数分别被定义为

$$Re_X = \frac{R_C^2 \Omega_X}{v}, \quad Re_C = \frac{R_C^2 \Omega_C}{v}, \quad Pr = \frac{v}{k},$$

$$Gr = \frac{g\beta(T_C - T_X)R_C^3}{v^2}.$$

定义无量纲温度 $T' = (T - T_X)/(T_C - T_X)$; $Pr = 0.05$. 当自然对流存在, 即 $Gr \neq 0$ 时, 动态黏度系数由 Gr 得到; 当自然对流不存在, 即 $Gr = 0$ 时, 动态黏度系数 $v = R_C^2 \Omega_X / Re_X$.

流函数 ψ 定义为

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = -xw, \quad \frac{\partial \psi}{\partial y} = -xu. \quad (10)$$

流函数的最大值和最小值分别用 ψ_{\max} 和 ψ_{\min} 表示.

仿真中, 计算区域的初始速度和温度均为 0, 收敛条件表示为

$$\frac{\sum_{i,j} \|u(x_j, y_i, t - 1) - u(x_j, y_i, t)\|^2}{\sum_{i,j} \|u(x_j, y_i, t)\|^2} < 10^{-8}. \quad (11)$$

4 结果与分析

4.1 模型验证

格子的数量决定了 LBM 求解速度与精度, 因此在进行数值仿真之前需要确定合理的网格精度. 本文选择 A2 模式为样本, 即 $Gr = 0, Re_x = 10^3, Re_c = 0$ 时, 分别用不同精度网格求取 ψ_{\min} 和 ψ_{\max} 并与文献 [16] 的结果比较. 在表 1 中可以清楚地看到, 当网格精度在 100×100 时, 所获得的结果与参考结果最为接近, 因此本文的仿真均采用此网格精度.

表 1 不同网格精度下的计算结果比较

Table 1. Results comparison for different grid resolution.

网格精度	ψ_{\min}	ψ_{\max}
50 × 50	-5.4778	1.8726×10^{-5}
100 × 100	-4.7219	9.6523×10^{-5}
150 × 150	-4.6139	4.6588×10^{-5}
200 × 200	-4.1810	4.9623×10^{-5}
文献 [16]	-5.1492	4.8799×10^{-4}

选取 12 组不同参数组合的模式进行仿真计算, 得到了流函数的最大值与最小值, 如表 2 所

列. 这12种模式可以分为5组, 其中, A组只包含晶体旋转, $Re_c = Gr = 0$; B组包含晶体和坩埚的旋转, 二者转动方向相反; C组只包含自然对流, $Re_c = Re_x = 0$; D组包含了自然对流与晶转产生的强迫对流; E组包含了自然对流与晶转、坩转产生的强迫对流.

为了证明本文模型的正确性, 选择文献[16]中的结果与当前结果进行比较. 文献[16]使用了有限体积的方法. 在表2中还计算了本文结果与文献结果之间的相对误差. 相对误差的计算公式为

$$d_{rel} = \frac{|\max(\psi_B) - \max(\psi_P)|}{|\max(\psi_B) + \min(\psi_P)|} + \frac{|\min(\psi_B) - \min(\psi_P)|}{|\max(\psi_B) + \min(\psi_P)|} \quad (12)$$

在表2所列的结果中, 由于E组实验在文献[16]中没有体现, 无法进行比较, 因此仅给出作者的实验数据. 选择A2模式和B2模式计算出的结果与参考结果相差较大, 其相对误差达到了11.97%和13.93%. 其余8组数据的相对误差均小于10%. 鉴于两种求解方法的不同, 同时参考了文献[11]中的实验结果, 认为本文所给出的LBM模型能够进行CZ法晶体生长的数值模拟研究.

表2 12组模式计算结果比较
Table 2. Results comperation for the 12 test cases.

	Gr	Re_c	Re_x	ψ_{min}	ψ_{max}	$\psi_{min}^{[16]}$	$\psi_{max}^{[16]}$	$d_{rel}/\%$
A1	0	10^2	0	-2.5573×10^{-1}	3.7412×10^{-6}	-2.3447×10^{-1}	1.5642×10^{-6}	9.10
A2	0	10^3	0	-4.7219×10^0	9.6523×10^{-5}	-5.3642×10^0	1.5257×10^{-4}	11.97
A3	0	10^4	0	-3.9242×10	2.9996×10^{-1}	-4.0443×10	1.9320×10^{-1}	3.21
B1	0	10^2	-25	-5.1614×10^{-2}	1.0807×10^{-1}	-5.0203×10^{-2}	1.1796×10^{-1}	6.82
B2	0	10^3	-250	-1.6011×10^0	9.1640×10^{-1}	-1.6835×10^0	1.2414×10^0	13.93
B3	0	10^4	-2500	-8.4371×10^0	6.2875×10^0	-8.5415×10^0	5.2708×10^0	8.17
C1	10^5	0	0	-9.7910×10^{-4}	2.7469×10	-1.1936×10^{-3}	2.8437×10	6.92
C2	10^6	0	0	-3.0112×10^{-1}	9.1738×10	-3.9699×10^{-1}	9.2100×10	0.49
D1	10^5	10^3	0	-7.4092×10^{-4}	2.9548×10	-4.7092×10^{-4}	2.8393×10	4.07
D2	10^5	10^4	0	-7.4691×10^{-1}	2.3675×10	-6.5631×10^{-1}	2.4819×10	4.85
E1	10^6	10^4	-10^3	-2.6339×10^{-1}	3.7007×10	—	—	—
E2	10^6	10^4	-10^4	-8.6510×10	1.8546×10^2	—	—	—

4.2 高Gr数下熔体热、流性质分析

Gr 是表征自然对流的重要参数. 在CZ法晶体生长中, 材料的属性往往是确定的, Gr 数的变化将取决于熔体中的温度梯度. 高 Gr 数代表了熔体中与熔体边界存在更高的温度差, 这会使得自然对流加快, 熔体中的热量传输随着流动的加快变得更加剧烈.

对具有较高 Gr 数的熔体中的温度分布与流线形态进行了仿真, 图3为温度分布的仿真结果. 从图3中可见, 当 Gr 为 10^4 时, 熔体中温度以热传递为主, 分布较平直, 自然对流几乎不影响温度分布; 当 Gr 增加到 10^5 , 可以看到熔体中的温度分布开始变形, 以自然对流的涡流形态为变化趋势; 当 Gr 为

10^6 时, 自然对流对温度分布的影响十分明显, 这时熔体流动加快, 促进了热扩散; 当 Gr 增加到 10^7 , 温度分布受自然对流影响严重, 温度梯度在边界处密集. 综合对比图3(a)—(d), 当 Gr 的级数达到 10^6 时, 热对流强于热传递, 自然对流占主导地位, 促进了熔体流动. 在图3(d)中, 虽然具有更高的 Gr 数, 但自然对流趋势过于显著, 导致了固液界面处温度梯度分布不平衡, 不利于实际的晶体生长. 图4是不同 Gr 数下的流线形状. 由于只有 Gr 数的作用, 因此流线呈现的漩涡为自然对流所生成. 当 Gr 为 10^4 时, 流线的形状与熔体区域的方形类似, 随着 Gr 数的增大, 熔体受到自然对流的作用不断加大, 熔体流速加快, 促使流线形状变得越来越圆.

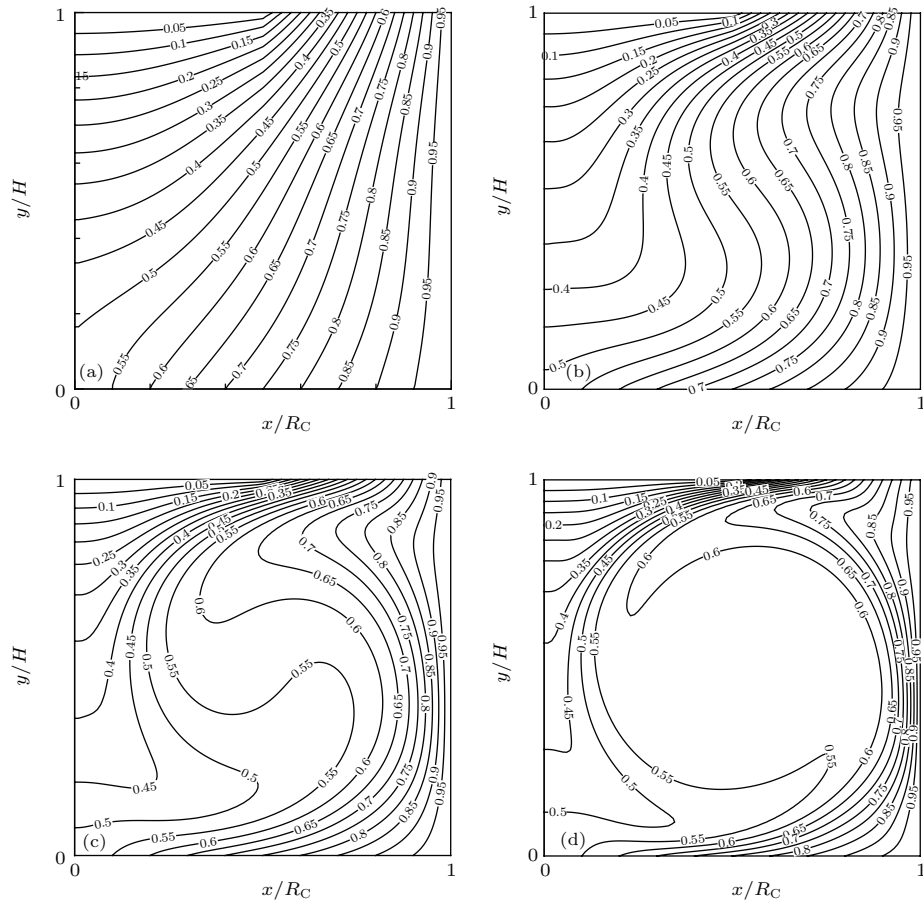


图3 不同 Gr 数下的熔体温度分布 (a) $Gr = 10^4$; (b) $Gr = 10^5$; (c) $Gr = 10^6$; (d) $Gr = 10^7$
 Fig. 3. Isotherms for different Gr : (a) $Gr = 10^4$; (b) $Gr = 10^5$; (c) $Gr = 10^6$; (d) $Gr = 10^7$.

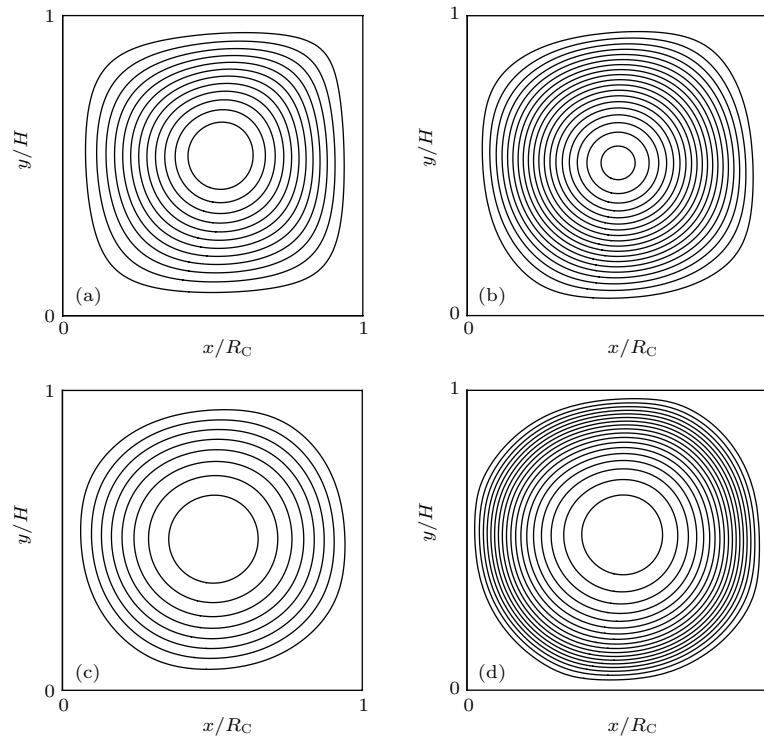


图4 不同 Gr 数下的熔体流线形状 (a) $Gr = 10^4$; (b) $Gr = 10^5$; (c) $Gr = 10^6$; (d) $Gr = 10^7$
 Fig. 4. Streamlines for different Gr : (a) $Gr = 10^4$; (b) $Gr = 10^5$; (c) $Gr = 10^6$; (d) $Gr = 10^7$.

4.3 高 Gr 数和高 Re 数耦合下的熔体对流分析

在晶体生长中, 晶体和坩埚的旋转对熔体起到搅拌的作用, 使温度分布更加均匀, 但旋转产生的强迫对流改变了原本单一的自然对流形态. 旋转速度的大小对熔体对流形态有较大影响. 晶体和坩埚的转速用无量纲 Re 数表示. Re 数是判别流动特性的依据, 普遍认为 Re 数小于 2300 的流动属于层流, 在 2300—4000 之间属于过渡状态, Re 数大于 4000 属于湍流状态. 存在高 Re 数的流体流动较不稳定, 微小的速度变化都会引起湍流, 造成晶体生长失败.

本文分别研究了高 Re_x 数、高 Re_c 数与高 Gr 数耦合作用时的流体流动形态. 仿真实验设定 $Gr = 2.5 \times 10^6$, 网格精度为 100×100 . 当只存在晶体旋转的情况下, $Re_x = 10^4$, 仿真结果如图 5 所示. 图 5 (a) 是熔体的流线形状, 大的漩涡区域与高

Gr 数的结果类似, 自然对流仍占主导地位. 晶体下方的小涡流是由晶体旋转产生的. 图 5 (b) 是温度分布, 可以看出, 当加入了旋转, 自然对流被削弱, 温度分布变得均匀. 当只存在坩埚旋转的情况下, $Re_c = -10^4$, 仿真结果如图 6 所示. 图 6 (a) 中出现了两个较大的涡流, 分别来自于自然对流 (左边) 和坩埚旋转. 由于坩埚旋转对熔体流动的影响较大, 所以在图 6 (b) 中, 温度分布变得更加均匀. 当晶体和坩埚旋转同时存在时, $Re_x = 10^4$, $Re_c = -10^3$, 仿真结果如图 7 所示. 由于 Re_c 较低, 图 7 (a) 中最右边由坩埚产生的强迫对流被压缩到熔体边沿, 晶转产生的强迫对流依旧存在于晶体下方. 当增加 Re_c 到 -10^4 时, 仿真结果如图 8 所示. 与图 7 (a) 相比, 图 8 (a) 中坩埚旋转产生的强迫对流区域加大, 压缩了中部的自然对流. 在三种对流的相互作用下, 图 8 (b) 所示的熔体温度分布变得更加均匀, 固液界面下方的温度梯度分布均匀且平直, 有利于生长高品质晶体.

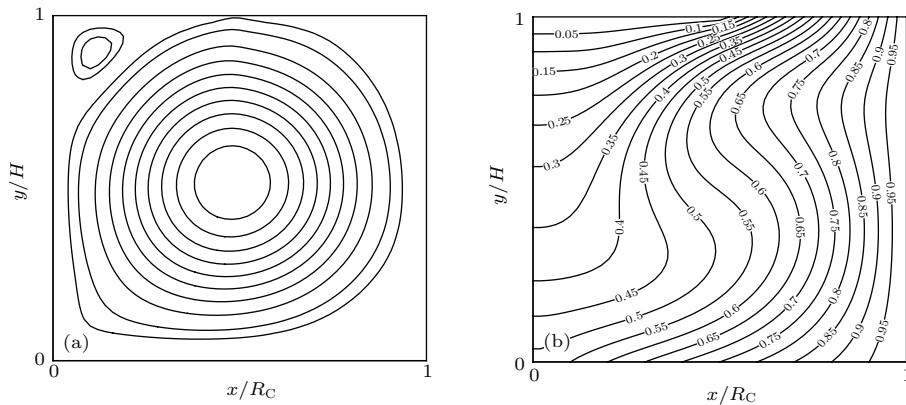


图 5 流线与温度分布结果 ($Gr = 2.5 \times 10^6$, $Re_x = 10^4$, $Re_c = 0$) (a) 流线; (b) 温度分布

Fig. 5. Streamlines and isotherms for $Gr = 2.5 \times 10^6$, $Re_x = 10^4$, $Re_c = 0$: (a) Streamlines; (b) isotherms.

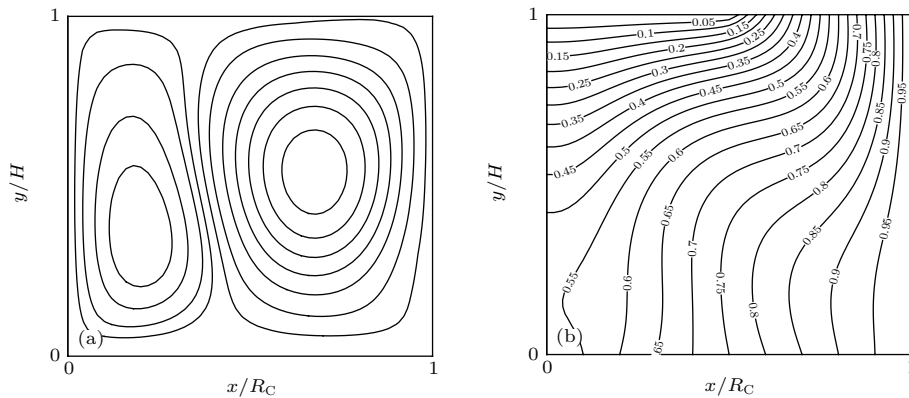


图 6 流线与温度分布结果 ($Gr = 2.5 \times 10^6$, $Re_x = 0$, $Re_c = -10^4$) (a) 流线; (b) 温度分布

Fig. 6. Streamlines and isotherms for $Gr = 2.5 \times 10^6$, $Re_x = 0$, $Re_c = -10^4$: (a) Streamlines; (b) isotherms.

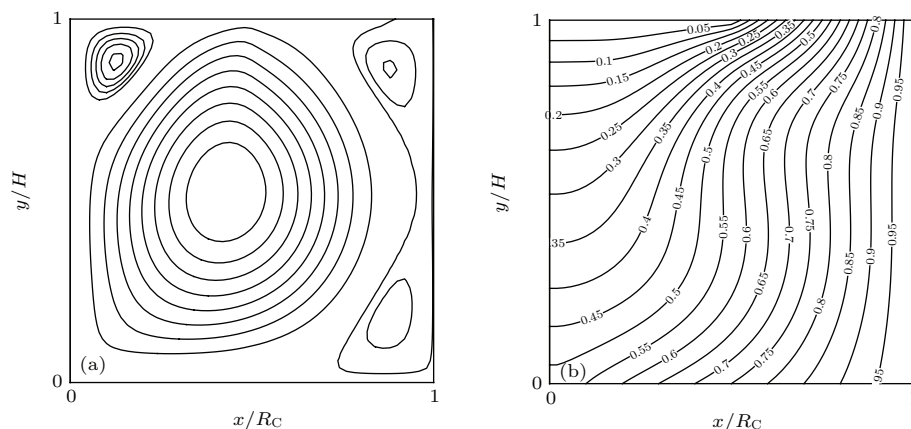


图7 流线与温度分布结果 ($Gr = 2.5 \times 10^6$, $Re_x = 10^4$, $Re_c = -10^3$) (a) 流线; (b) 温度分布

Fig. 7. Streamlines and isotherms for $Gr = 2.5 \times 10^6$, $Re_x = 10^4$, $Re_c = -10^3$: (a) Streamlines; (b) isotherms.

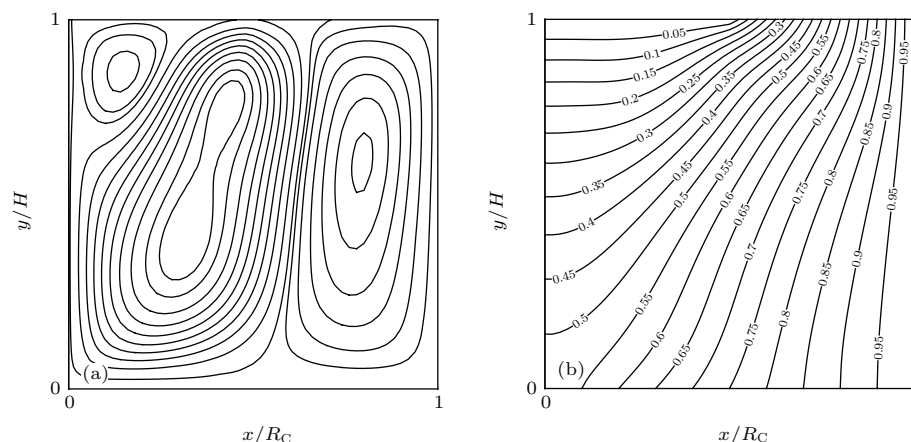


图8 流线与温度分布结果 ($Gr = 2.5 \times 10^6$, $Re_x = 10^4$, $Re_c = -10^4$) (a) 流线; (b) 温度分布

Fig. 8. Streamlines and isotherms for $Gr = 2.5 \times 10^6$, $Re_x = 10^4$, $Re_c = -10^4$: (a) Streamlines; (b) isotherms.

5 实验验证

本文以晶体生长设备与集成国家工程中心自主研发的TD-120型单晶炉为实验平台,以300 mm大尺寸硅单晶生长为实验对象,其中硅晶体的主要属性及部分实验参数列于表3. 根据上述的数值仿真结果,将无量纲的晶转雷诺数和坩转雷诺数转化为实际的旋转速度,进行晶体生长实验. 当只加入晶体旋转时,自由表面处的熔体波动依然十分剧烈,无法生长出单晶体;当只加入坩坩旋转时,熔体中心在自然对流的影响下使固液界面形状凸向晶体,严重影响了晶体品质. 根据仿真参数,结合实际的生产经验,设置 $Re_x = 3 \times 10^4$, $Re_c = -1 \times 10^4$,即晶体旋转速度约为10 r/min,坩坩的旋转速度约为4 r/min. 在保证其他参数正确、生长工艺稳定的

情况下,可以成功生长出硅单晶体. 图9为实验成功生长的300 mm硅单晶体.

表3 实验中的主要参数
Table 3. Parameters used in the experiment.

参数	量值
密度 $\rho/\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	2329
动态黏滞系数 $\nu/\text{Pa}\cdot\text{s}$	8×10^{-4}
热膨胀系数 β/K^{-1}	1.5×10^{-4}
热扩散率 $\alpha/\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$	2.6×10^{-5}
熔点 T_{melt}/K	1685
晶体直径 d_X/mm	300
坩坩直径 d_C/mm	660
加热温度 T/K	1750

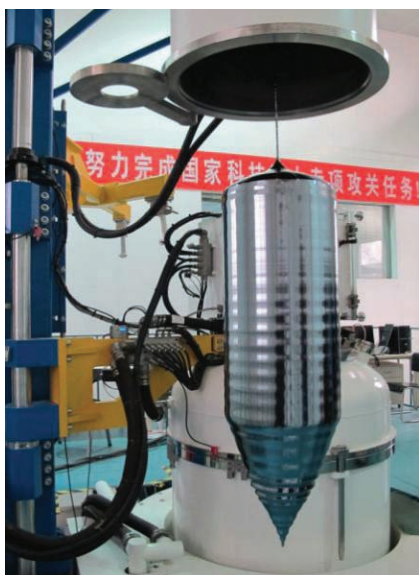


图9 实验生长出的硅单晶体

Fig. 9. The silicon single crystal obtained from the experiment.

6 结 论

针对晶体生长过程涉及流体动力学和热动力学相互耦合等问题, 本文利用格子 Boltzmann 方法从介观的层面对 CZ 法晶体生长的熔体流动进行研究. 改进了旋转惯性力与热浮力相互作用下的 LBM 演化方程, 同时解决流体动力学方程、热方程和旋转角速度相互作用的熔体流动求解问题.

利用本文构建的 LBM 进行模拟轴对称旋转、自然对流下的流体流动, 结果与其他数值计算方法的数据相符合. 在自然对流下, 进行高 Gr 数的熔体流动模拟, 并比较不同 Gr 数下的热、流分布; 对高 Gr 数和高 Re 数相互作用的熔体流动进行仿真, 得到了高 Re 数下熔体流动的变化趋势. 依据数值

仿真的结果, 进行直拉硅单晶生长试验, 并成功生长出直径 300 mm 的硅单晶体. 从理论计算和实际试验两方面证明了本文所构建的 LBM 模型对于晶体生长模拟的正确性和适用性.

参考文献

- [1] Gu X, Li R, Tian Y 2014 *J. Cryst. Growth* **390** 109
- [2] Sabanskis A, Bergfelds K, Muiznieks A, Schröck Th, Krauze A 2013 *J. Cryst. Growth* **377** 9
- [3] Niemietz K, Galindo V, Pätzold O, Gerbeth G, Stelter M 2011 *J. Cryst. Growth* **318** 150
- [4] Xing H, Chen C L, Jin K X, Tan X Y, Fan F 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 8218 (in Chinese) [邢辉, 陈长乐, 金克新, 谭兴毅, 范飞 2010 物理学报 **59** 8218]
- [5] Liu Q Z, Kou Z M, Han Z N, Gao G J 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 234701 (in Chinese) [刘邱祖, 寇子明, 韩振南, 高贵军 2013 物理学报 **62** 234701]
- [6] Shi D Y, Wang Z K, Zhang A M 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 074703 (in Chinese) [史冬岩, 王志凯, 张阿漫 2014 物理学报 **63** 074703]
- [7] Xie J F, Zhong C W, Zhang Y, Yin D C 2009 *Chin. J. Theor. Appl. Mech.* **41** 635 (in Chinese) [解建飞, 钟诚文, 张勇, 尹大川 2009 力学学报 **41** 635]
- [8] Halliday I, Hammond L A, Care C M, Good K, Stevens A 2001 *Phys. Rev. E* **64** 011208
- [9] Peng Y, Shu C, Chew Y T, Qiu J 2003 *J. Comput. Phys.* **186** 295
- [10] Weinstein O, Miller W 2010 *J. Cryst. Growth* **312** 989
- [11] Huang H B, Lu X Y, Krafczyk M 2014 *Int. J. Heat Mass Tran.* **74** 156
- [12] Guo Z L, Shi B C, Wang N C 2000 *J. Comput. Phys.* **165** 288
- [13] He X, Luo L 1997 *J. Stat. Phys.* **88** 3
- [14] Guo Z, Shi B, Zheng C 2002 *Int. J. Numer. Meth. Fl.* **39** 325
- [15] Zou Q, He X 1997 *Phys. Fluids* **9** 1591
- [16] Bansch E, Davis D, Langmach H, Reinhardt G, Uhle M 2006 *Comput. Fluids* **35** 1400

Thermo-fluid coupling of unsteady flow in Czochralski crystal growth*

Huang Wei-Chao¹⁾²⁾ Liu Ding^{1)2)†} Jiao Shang-Bin¹⁾ Zhang Ni²⁾

1) (National & Local Joint Engineering Research Center of Crystal Growth Equipment and System Integration, Xi'an University of Technology, Xi'an 710048, China)

2) (Shaanxi Key Laboratory of Complex System Control and Intelligent Information Processing, Xi'an 710048, China)

(Received 19 May 2015; revised manuscript received 18 June 2015)

Abstract

In a crystal growth system, the crystal quality is greatly affected by the coupling properties between unsteady melt flow and thermal transfer. In this paper, an improved lattice Boltzmann method is proposed. This incompressible axisymmetric model based method transforms the fluid equations of cylindrical coordinate into those of the two-dimensional Cartesian coordinate and constructs the evolutionary relationship of the external force terms, such as rotational inertia force and the thermal buoyancy. In the unsteady melt, the temperature distribution and the rotational angular velocity are determined based on the D2Q4 model and the velocity of axisymmetric swirling fluid is calculated based on the D2Q9 model. The mirror bounce format is adopted as the boundary conditions of the free surface and the axis symmetry. For the remaining boundary conditions, the non-equilibrium extrapolation format is used. In the simulation, 12 sets of flow function results are obtained by choosing different sets of Grashof number and Reynolds number. By comparing with the finite crystal growth results, the effectiveness of the proposed method can be shown. Furthermore, by studying the convection shape and the temperature distribution of the melt under coupling between high Grashof number and high Reynolds number, it can be concluded that the thermal coupling properties and flow in the unsteady melt relate to Grashof number and Reynolds number. By adjusting the high Reynolds number generated by the crystal and crucible rotation, the strength of the forced convection in the melt can be changed. Therefore, the natural convection in the melt can be suppressed effectively and the temperature distribution results can be improved significantly. In addition, it is worth mentioning that the findings in this paper can be straightforwardly extended to the silicon single crystal growth experiment by turning the dimensionless crystal rotation Reynolds number and crucible rotation Reynolds number into the actual rotation speed.

Keywords: lattice Boltzmann, crystal growth, axisymmetric swirl, thermal-fluid coupling

PACS: 81.10.-h, 47.11.Qr, 47.55.pb, 82.70.-y

DOI: 10.7498/aps.64.208102

* Project supported by the Key Program of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61533014), the National Basic Research Program of China (Grant No. 2014CB360500), and the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 2013611813001).

† Corresponding author. E-mail: Liud@xaut.edu.cn