

На правах рукописи

КАЛАЕВ Владимир Владимирович

**РЕШЕНИЕ СОПРЯЖЕННОЙ ЗАДАЧИ ГИДРОДИНАМИКИ И
ТЕПЛООБМЕНА В УСТРОЙСТВАХ ЧОХРАЛЬСКОГО
ДЛЯ ВЫРАЩИВАНИЯ КРИСТАЛЛОВ КРЕМНИЯ**

Специальность 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург 2003

Работа выполнена в ООО “Софт-Импакт”, Санкт-Петербург, Россия.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук
Жмакин Александр Игоревич.

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор
Полежаев Вадим Иванович;
кандидат технических наук, доцент
Мазаев Кирилл Михайлович.

Ведущая организация: Институт Математического Моделирования РАН.

Защита состоится «10» июня 2003 года в 16:00 часов на заседании диссертационного совета Д 212.229.07 в Санкт-Петербургском Государственном Политехническом Университете (195251, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29, корп. 1, кафедра гидроаэродинамики).

Отзыв на автореферат в двух экземплярах, заверенный печатью учреждения, просьба направлять по вышеуказанному адресу на имя учёного секретаря диссертационного совета.

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке Санкт-Петербургского Государственного Политехнического Университета.

Автореферат разослан « 5 » мая 2003 года.

Учёный секретарь диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук,
доцент

Д.К. Зайцев

Общая характеристика работы

Актуальность проблемы

Метод Чохральского является основным способом выращивания объемных полупроводниковых кристаллов из расплава для электронной промышленности. Постоянно происходит совершенствование ростовой технологии, вызванное ужесточением требований к структурному качеству кристаллической решетки. Возрастающие экономические требования вызывают необходимость модификации ростовой технологии для производства кристаллов большего диаметра. С ростом диаметра кристаллов растут и объемы тиглей с расплавом полупроводникового материала. Для технологии роста трехсотмиллиметровых кристаллов кремния диаметр тигля достигает 650–800 мм, а начальная глубина расплава может быть порядка 500 мм. Высокие градиенты температуры, характерные для процесса Чохральского, приводят к активному естественно-конвективному движению расплава, которое обычно контролируется вращением тигля и кристалла, а иногда посредством наложения магнитного поля. Течение расплава является турбулентным уже при росте кристаллов диаметром 100 мм и становится развитым турбулентным в тиглях, используемых для вытягивания трехсотмиллиметровых кристаллов. Характеристики турбулентного теплопереноса в значительной мере определяют устойчивость процесса кристаллизации, геометрию границы раздела кристалл/расплав, скорость растворения кварцевого тигля, содержащего расплав, и транспорт примесей в расплаве. Традиционный эмпирический метод оптимизации ростовой технологии является чрезвычайно дорогостоящим и медленным. Разработка адекватной математической модели ростового процесса является исключительно актуальной, т.к. оптимизация с активным применением вычислительного аппарата требует меньшего количества экспериментов и может быть сделана в более сжатые сроки. Основной проблемой моделирования роста кристаллов является расчет турбулентного течения расплава и теплообмена в зоне кристаллизации, включающей кристалл, расплав и тигель. В настоящее время данная проблема подробно изучена лишь для задач с ламинарной конвекцией, в то время как экспериментальная информация о реальных турбулентных течениях достаточно скудна, а расчетные аппараты только разрабатываются.

Цели работы

1) Разработка, реализация и тестирование программного комплекса для математического моделирования течения и теплообмена при росте кристаллов кремния в сопряженной двумерной и трехмерной нестационарной постановках.

2) Тестирование и методические исследования на модельных задачах с использованием двух подходов моделирования турбулентного течения: в рамках осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье-Стокса (Reynolds averaged Navier-Stokes equations, RANS) и с использованием метода Моделирования Крупных Вихрей (Large Eddy Simulation, LES).

3) Проведение параметрических расчетов реальных ростовых процессов и верификация с использованием доступной экспериментальной информации. Изучение гидродинамического воздействия течения газа на турбулентное течение расплава в ростовой системе. Исследование турбулентного теплопереноса и конвекции в расплаве (число Рэлея $Ra=10^7-10^8$) при промышленном росте кристаллов кремния с использованием трехмерных нестационарных расчетов.

Научная новизна работы

1) Впервые численно изучено в сопряженной постановке гидродинамическое воздействие прокачиваемого газа на расплав при получении кристаллов кремния по методу Чохральского для различных ростовых параметров.

2) В рамках LES впервые проведены и верифицированы трехмерные нестационарные расчеты гидродинамики и сопряженного теплопереноса в зоне кристаллизации, включающей тигель, кристалл и расплав, при росте кристаллов по методу Чохральского, дополненные расчетом геометрии границы кристалл/расплав.

3) С использованием LES изучены структура трехмерного течения расплава при $Ra=10^7-10^8$, осредненные по времени поля скорости, кинетическая энергия турбулентности крупных и энергонесущих вихревых структур, а также характеристики турбулентного теплопереноса для различных ростовых режимов. Это позволило выявить основные недостатки традиционного RANS моделирования в применении к задачам течения расплава.

Достоверность полученных результатов

Сравнение тестовых расчетов, полученных с использованием программного пакета, разработанного в рамках данной работы, показало хорошее совпадение с экспериментальными и расчетными данными других авторов. Решение задач конвекции и теплопереноса в реальных тиглях успешно верифицировано с использованием экспериментальных данных по распределению температуры в ростовом узле, пульсациям температуры в турбулентном течении расплава и геометрии границы раздела кристалл/расплав.

Практическая ценность работы

1) Программный комплекс, разработанный в рамках диссертации, позволяет решать модельные задачи для накопления ценной методической информации, а также сопряженные задачи конвекции, теплообмена и кристаллизации в реальных ростовых узлах.

2) Показано, что течение газа влияет на структуру конвекции в расплаве при реальных ростовых параметрах и это нужно учитывать при отработке технологии роста. Численное моделирование с использованием разработанных моделей позволяет изучать и предсказывать данный эффект для реальных ростовых систем.

3) Разработанная на базе LES трехмерная нестационарная модель зоны кристаллизации позволяет получать ценную информацию о характеристиках турбулентного течения расплава и процессе кристаллизации. Возможно применение данной модели для оптимизации ростовых процессов с целью обеспечения стабильного вытягивания кристалла с нужной геометрией фронта кристаллизации.

Апробация работы

Основные результаты работы докладывались на российских и международных конференциях и семинарах: XXVII Неделя Науки СПбГТУ (С.-Петербург, 1998), Европейской конференции ENUMATH (Явьяскилия, Финляндия, 1999), Европейской конференции E-MRS (Страсбург, Франция, 1999), IX Национальной Конференции по Росту Кристаллов (Москва, 2000), Международной конференции E-MRS – IUMRS (Страсбург, Франция, 2000), Международной конференции AMIF (Чиоко, Италия, 2000), 12^{ой} Американской конференции по выращиванию кристаллов и эпитаксии (Колорадо, США, 2000), Международной конференции GADEST (Катания, Италия,

2001), Международной конференции ICCG13–ICVGE11 (Киото, Япония, 2001), Национальной Конференции "Кремний - 2002" (Новосибирск, 2002), X Национальной Конференции по Росту Кристаллов (Москва, 2002), 14^{ой} Американской конференции по выращиванию кристаллов и эпитаксии (Сиэтл, США, 2002), Европейской конференции E-MRS (Страсбург, Франция, 2002), Европейской конференции ETC9 (Саумптон, Великобритания, 2002), Международной конференции ETMM5 (Пагуерра, Испания, 2002), Международной конференции MNE (Москва, 2002), Международной конференции ICSSC (Закопань, Польша, 2002), семинаре Института Кристаллографии РАН (Москва, 2002), Институт Монокристаллов НАНУ (Харьков, 2002), семинаре "Численное моделирование процессов тепло- и массообмена" Институт проблем механики РАН (Москва, 2002), семинаре Института Математического Моделирования РАН (Москва, 2003), семинаре сектора Численного Моделирования ФТИ им А. Ф. Иоффе РАН (С.-Петербург, 2003), семинаре кафедры гидроаэродинамики СПбГТУ (С.-Петербург, 2003).

Публикации по теме диссертации

Основные результаты работы изложены в десяти научных публикациях.

Структура и объём работы

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы из 121 наименования. Работа изложена на 168 страницах машинописного текста, включая 13 таблиц и 68 рисунков.

Содержание работы

Во введении обсуждается актуальность и основные задачи данной работы.

Первая глава диссертации содержит обзор литературы по изучаемой тематике, обсуждение имеющихся экспериментальных результатов и накопленного опыта математического моделирования. На основе анализа экспериментальных данных показано, что конвекция расплава кремния носит трехмерный стохастический характер при росте кристаллов диаметром 100 мм и является развито турбулентной для роста кристаллов диаметром 300 мм (например, [Gräbner O. et al., Mater. Sci. Eng. B – 2000. – Vol.73 – P.130-133]). Также отмечаются экспериментальные данные, свидетельствующие о зависимости перепада температуры в расплаве от характеристик его течения, что указывает на необходимость сопряженного

рассмотрения конвекции расплава и теплопереноса в тигле. Анализируются современные достижения математического моделирования глобального теплообмена и течения расплава.

Вторая глава содержит описание математических моделей и численных алгоритмов, использованных для реализации программного комплекса. Решаются уравнения Навье-Стокса для гипозвукового течения газа, уравнение теплопереноса и уравнения транспорта скалярных величин. Для расчетов течений несжимаемой жидкости данные уравнения применяются без модификаций. Для дискретизации уравнений используется метод конечного объема [Ferziger J.H. & Peric M., Springer – 1999. – 391P.] на структурированных многоблочных сетках. Система уравнений рассматривается в стационарной и нестационарной формулировках, в двумерной и трехмерной системах декартовых координат и в цилиндрической системе координат для двумерных областей. Аппроксимации диффузионных и нестационарных слагаемых выполнены со вторым порядком точности, реализовано несколько способов аппроксимации конвективных слагаемых: противопоточные схемы 1-го и 3-го порядка, центральные разности 2-го и 4-го порядков точности. Аппроксимация конвективных слагаемых дополнена учетом нелинейности распределений гидродинамических величин вдоль элемента поверхности. В ходе итерационного процесса применяется метод SIMPLEC для нахождения приращений поля давления и скорости.

Третья глава посвящена тестированию разработанного программного комплекса и решению модельных задач. Показаны результаты применения различных вариантов аппроксимации конвективных слагаемых на примере решения задач о течении несжимаемой жидкости в плоском канале и в круглой трубе. Продемонстрирована возможность получения решений, совпадающих с аналитическими, на существенно неортогональных сетках при использовании высоких порядков аппроксимации и учете нелинейности распределения скорости в расчете конвективного переноса. Задача о естественной конвекции в кубической полости с боковыми стенками, имеющими разную температуру, используется для тестирования решения уравнений Навье-Стокса в присутствии силы плавучести. Получено отличное соответствие с данными других авторов при $Ra=10^4-10^6$. Для апробации процесса решения трехмерных нестационарных задач в широком

диапазоне чисел Рэлея ($Ra=10^4-10^8$) была рассмотрена задача о течении в цилиндрической полости с подогревом снизу [Verzicco R., Camussi R., Phys. Fluids – 1997. – Vol.9/5 – P.1287-1295]. При этом были исследованы возможности прямого численного моделирования и метода моделирования крупных вихрей на сетках с количеством ячеек порядка 100000. Для изучения возможностей вычислительного модуля в применении к задачам с естественной конвекцией в присутствии эффектов вращения тигля и кристалла исследована модельная задача ламинарного и турбулентного течения расплава в методе Чохральского [Wheeler A.A., J. Crystal Growth – 1990. – Vol.102. – P.691-695].

В четвертой главе описаны исследования конвекции и теплопереноса при выращивании кристаллов кремния диаметрами 100 и 300 мм. Решается задача конвекции и сопряженного теплообмена теплопроводностью и излучением в реальных ростовых устройствах (см. Рис.1-2). Для расчетов конвекции и теплообмена в расплаве и газе, а также для расчета геометрии фронта кристаллизации использовался программный пакет, разработанный в рамках данной диссертации. Для расчета теплообмена излучением был использован программный пакет CGSim, разработанный в ООО “Софт-Импакт” (www.softimpact.ru). Граничное условие для температуры T на границе непрозрачной “1” и прозрачной “2” для излучения областей имеет вид:

$$\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial n}\right)_1 = \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial n}\right)_2 + \sigma_b \varepsilon_{rad} T_w^4 - Q_{rad}^{in}, \quad (1)$$

где λ – теплопроводность, σ_b – постоянная Стефана-Больцмана, ε – коэффициент излучения, Q_{rad}^{in} – входящий радиационный поток. Обмен граничными условиями между программами осуществлялся следующим образом. Программный модуль решения задачи радиационного теплообмена в конце каждой итерации записывал файлы, содержащие радиационные потоки, температуру поверхности твердых элементов и тепловые потоки из твердых элементов. Расплавная и газовая задачи, в свою очередь, записывали файлы, содержащие тепловые потоки из жидкостей и температуру поверхностей. Далее было организовано перекрестное чтение файлов и перезаполнение обновляемых граничных условий, включающее поиск ближайших соседних узлов и интерполяцию. Сходимость обменного процесса

контролировалась по возмущениям невязок решаемых уравнений в отдельных задачах. На внешней границе расчетной области было установлено изотермическое условие ($T=300\text{ K}$). На входе в ростовую установку использовалось фиксированное значение скорости, а на выходе – фиксированное значение давления и экстраполяция скорости. Значение скорости на входе вычислялось из известного массового расхода прокачиваемого газа. На Рис.2 изображена конвекция газа при давлении в узле 1500 Па и расходе 1500 ст.л/ч.

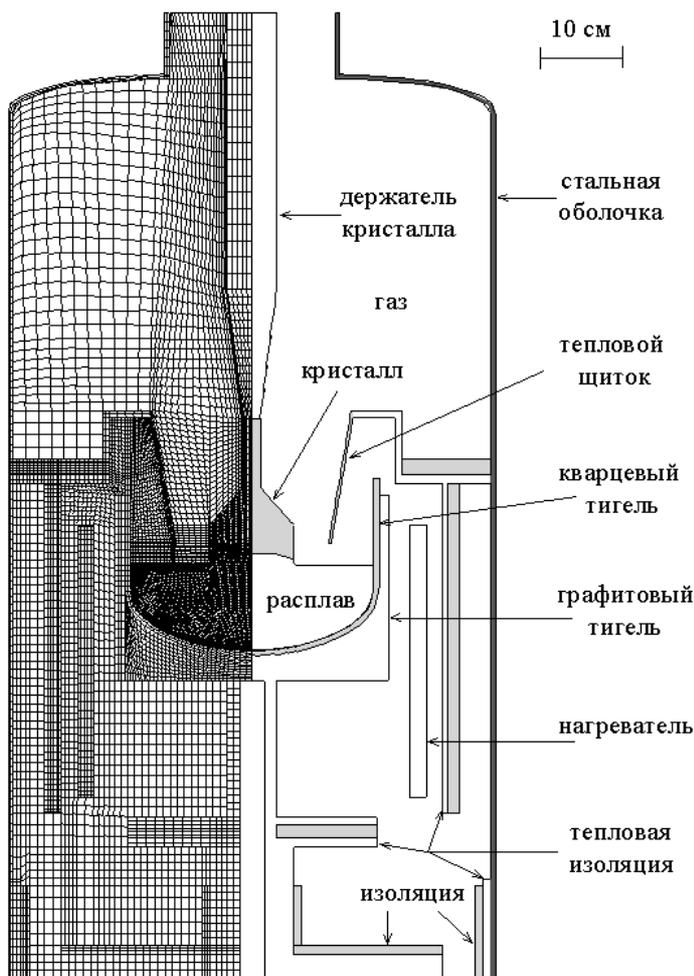


Рис.1. Структурированная расчетная сетка (слева) и схема ростовой системы EKZ-1300 для роста кристаллов кремния диаметром 100 мм (справа).

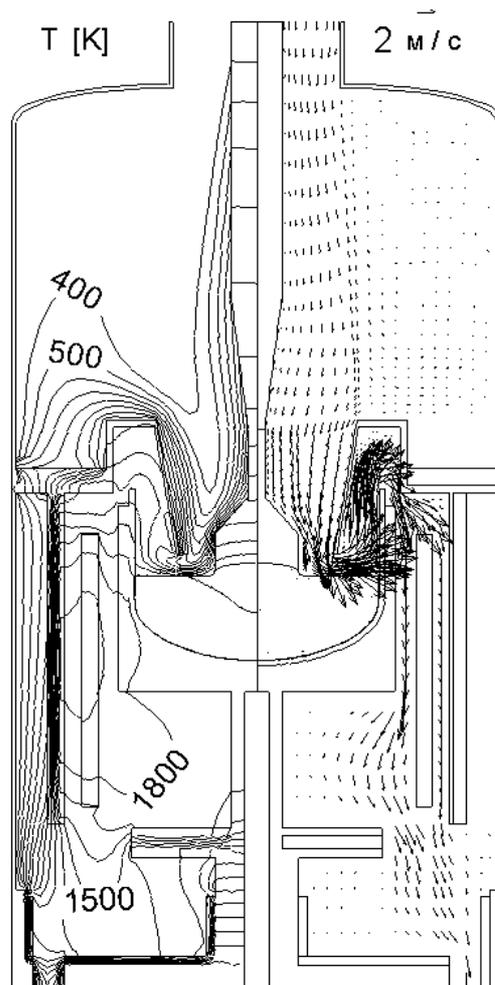


Рис.2. Распределение температуры в ростовом узле (слева) и вектора скорости инертного газа, прокачиваемого через систему (справа).

Решение задачи глобального теплообмена верифицировано с использованием измерений температуры в кристалле и в тепловой изоляции вокруг нагревателя [Dornberger E. et al., J. Crystal Growth – 1997. – Vol.180 – P.461-467]. Сопоставление проведенных расчетов и экспериментальных данных, приведенное на Рис.3,

показывает, что решение задачи глобального теплообмена дает возможность с высокой точностью предсказывать тепловое состояние в элементах ростового узла. В расчетах тепловых параметров в зоне кристаллизации особую важность приобретает адекватный учет конвекции расплава. Расчет турбулентного течения расплава в терминах RANS с использованием $k-\varepsilon$ модели турбулентности Чена [Chien K.-Y., AIAA Journal – 1982. – Vol.20 – P.33-38] был включен в расчет глобального теплообмена таким образом, что температура на границах расплава находилась из сопряжения радиационных и кондуктивных тепловых потоков, а скорость u на свободной поверхности расплава “1” рассчитывалась с учетом сдвигового напряжения газа “2” над расплавом и напряжения Марангони:

$$\left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial u_{\tau_i}}{\partial n}\right)_1 = \left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial u_{\tau_i}}{\partial n}\right)_2 + \frac{\partial \sigma}{\partial T} \text{grad}_{\tau_i}(T), \quad (2)$$

$$(\vec{u})_1 = (\vec{u})_2$$

где μ_{eff} – эффективная вязкость, σ - коэффициент поверхностного натяжения, τ_i – вектор касательной к элементу поверхности. Детальное описание модели глобального теплообмена и конвекции опубликовано в работе [8].

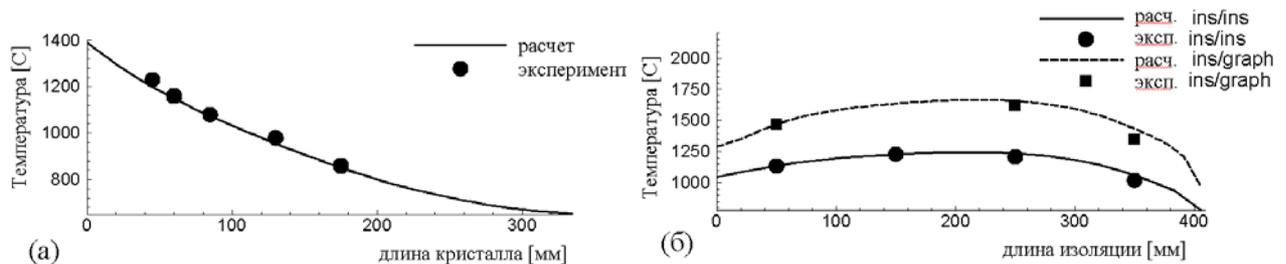


Рис.3. Сравнение рассчитанной температуры (линии) с данными эксперимента (символы): вдоль оси вращения кристалла (а), в боковой изоляции (б, ins/ins) и между боковой изоляцией и графитовым блоком (б, ins/graph).

С помощью сопряженной модели гидродинамики в двумерной осесимметричной постановке в рамках осреднения по Рейнольдсу исследовано влияние течения газа на структуру течения и характеристики турбулентного переноса в расплаве. Обнаружено, что течение газа над свободной поверхностью расплава может приводить к возникновению циркуляционной зоны под тепловым щитком (см. Рис.4.в). Расчеты турбулентной конвекции расплава в приближении осреднения по

Рейнольдсу с получением стационарного решения привлекательны в силу относительно малых требований к вычислительным ресурсам. Однако RANS расчеты зачастую не позволяют предсказывать характеристики тепло- и массопереноса в расплаве с требуемой точностью (например, [Müller G. et al., *Microelectr. Eng.* – 1999. – Vol.1 – P.135-142]).

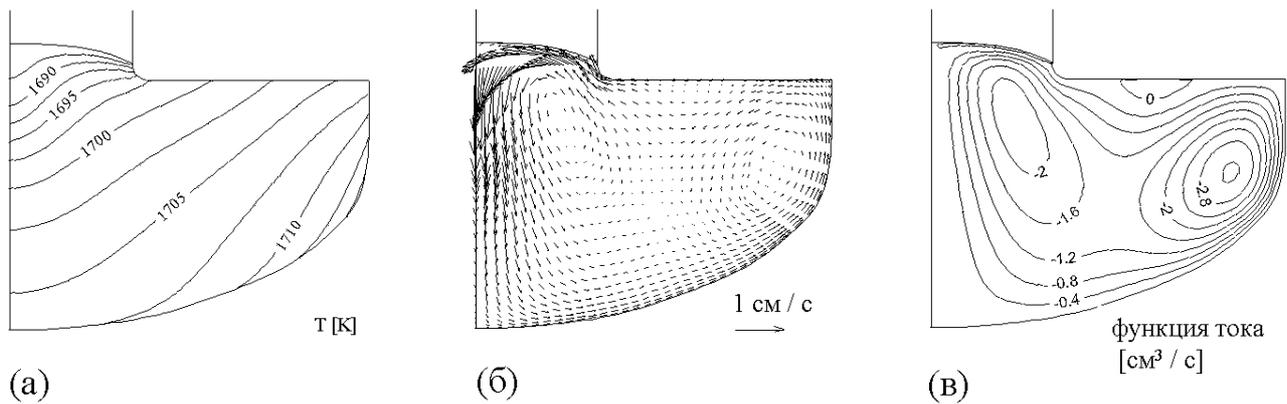


Рис.4. Распределение температуры (а), скорости (б) и функции тока в расплаве (в). Вращение тигля – 5 об/мин, расход аргона – 1500 ст.л/ч, высота кристалла 50 мм, скорость кристаллизации 2 мм/мин, давление аргона - 1500 Па, вращение кристалла – 20 об/мин.

Альтернативой RANS моделированию является прямое численное моделирование и LES. Прямое численное моделирование предполагает, что все вихревые структуры от самых крупных (размера расчетной области) до вихрей колмогоровского масштаба разрешаются в рамках расчетной сетки и выбранной аппроксимации без применения моделей турбулентности. LES позволяет использовать доступные вычислительные ресурсы для большего диапазона турбулентных течений, т.к. требуется лишь прямое численное разрешение крупных и энергонесущих структур, а мелкомасштабные вихревые структуры моделируются с помощью специальной (подсеточной) модели турбулентности. Адекватные расчеты течений расплава в реальных тиглях, использующихся для роста кристаллов диаметром 100-300 мм, технически возможны на сегодняшний день только в рамках LES. В данных расчетах на базе LES используется модель подсеточной турбулентности, опубликованная в работе [Ivanov N.G. et al., *J. Crystal Growth* – 2003. – Vol.250/1-2 – P.183-188]. Как и в RANS подходе, для учета влияния течения расплава на перепад температуры между тиглем и кристаллом необходимо сопряженное рассмотрение теплообмена в расплаве и тигле. Включение кристалла в расчетную область необходимо для расчетов геометрии фронта кристаллизации.

Геометрия фронта кристаллизации рассчитывается таким образом, чтобы обеспечить однородное распределение по фронту кристалла вертикальной компоненты скорости кристаллизации $u_{кр}$, определяемой выражением:

$$u_{кр} = \frac{1}{\rho \Delta H} \left(\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial n} \right)_{распл} - \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial n} \right)_{крист} \right) \quad (3)$$

где ΔH – удельная теплота кристаллизации, ρ – плотность кристалла. Таким образом, трехмерная расчетная область состоит из тигля, расплава и кристалла (см. Рис.5). На внешней границе расчетной области температурное граничное условие формулируется с учетом падающего радиационного потока и теплового потока в газ, рассчитанных в рамках осесимметричной постановки. Расчет излучаемого радиационного потока осуществляется с использованием актуальной для трехмерного расчета температуры. Таким образом, учитываются нелинейные эффекты в лучистом теплообмене, вызванные нестационарными перестроениями течения расплава. Для компонент вектора скорости на свободной поверхности расплава используется условие, учитывающие сдвиговое напряжение газа и эффект Марангони.

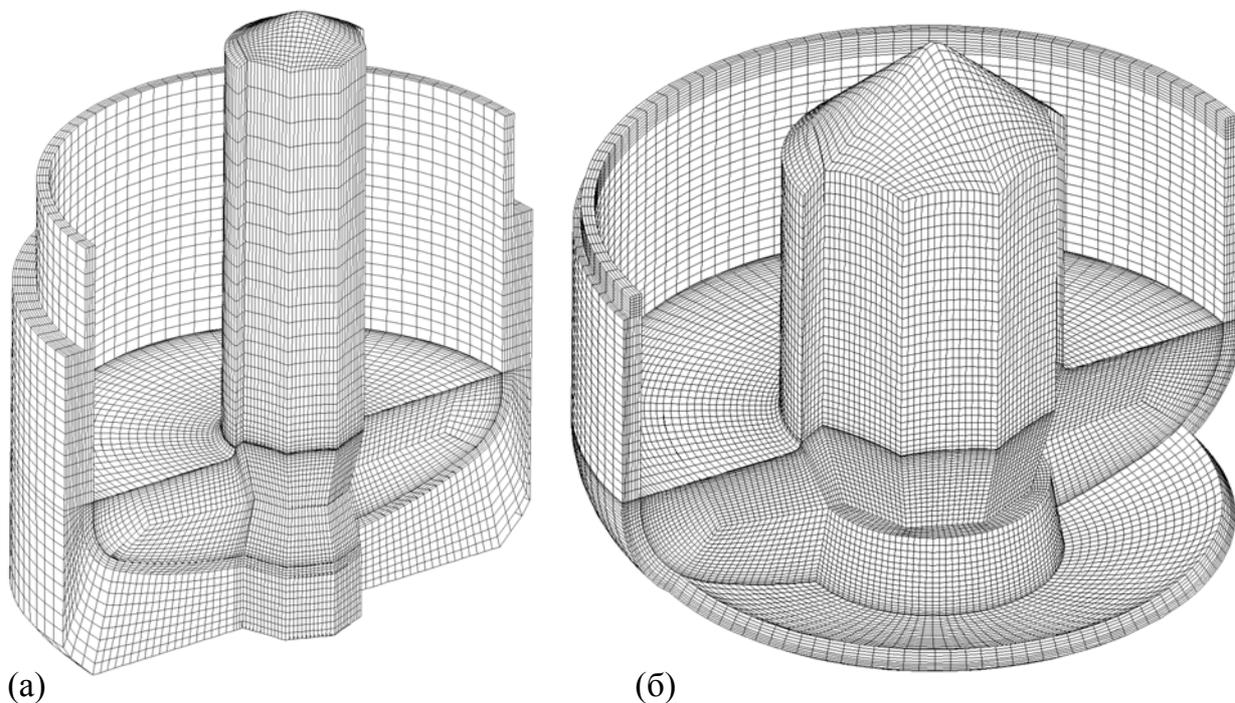


Рис.5. Трехмерные расчетные сетки в зоне кристаллизации при расчете роста кристалла диаметром 100 мм, содержащая 184032 ячейки (а), и при расчете роста кристалла диаметром 300 мм, содержащая 334020 ячейки (б).

LES расчеты показывают, что турбулентное течение расплава является существенно трехмерным уже при росте кристаллов диаметром 100 мм. На Рис.6.а-б представлены результаты расчетов для скорости вращения тигля 5 об/мин и кристалла –20 об/мин. Безразмерные параметры, оцененные для данного течения расплава, составляют: $Ra=2\cdot 10^7$, $Re_{\text{крист}}=1.7\cdot 10^4$, $Re_{\text{тигл}}=3.8\cdot 10^4$, $Ma=2.3\cdot 10^4$.

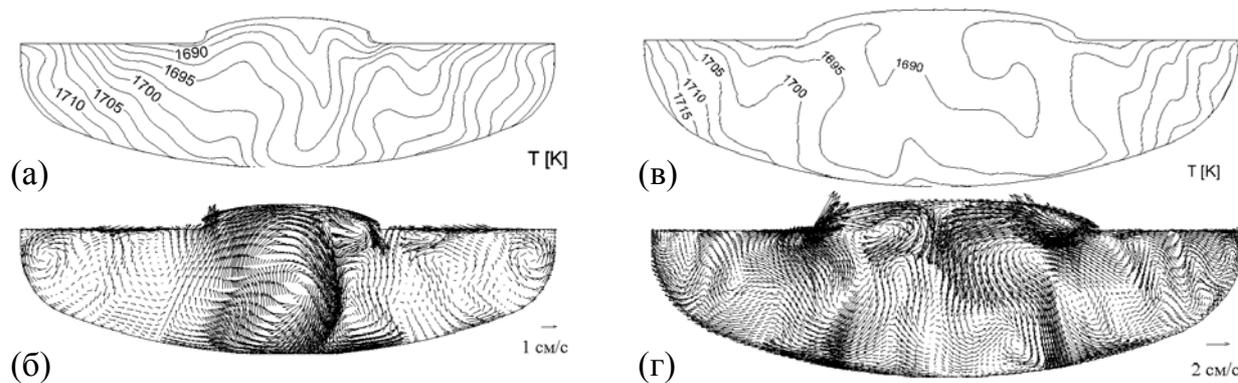


Рис.6. Мгновенные распределения температуры и скорости в вертикальном сечении расплава при выращивании кристалла диаметром 100 мм (а, б) и при выращивании кристалла диаметром 300 мм (в, г).

Особенно интенсивное турбулентное перемешивание наблюдается в подкристалльной области. Течение на периферии расплава носит более упорядоченный характер. При росте кристаллов диаметром 300 мм (Рис.6.в-г) наблюдается интенсивное турбулентное перемешивание во всем объеме расплава. Безразмерные параметры, оцененные для данного течения расплава, составляют: $Ra=2.9\cdot 10^8$, $Re_{\text{крист}}=9.1\cdot 10^4$, $Re_{\text{тигл}}=2.8\cdot 10^5$.

Проверка результатов трехмерных расчетов возможна путем сравнения с экспериментальными наблюдениями. В силу непрозрачности расплава затруднительно получить данные по реальной скорости и структуре течения расплава. Возможно лишь измерение температуры в расплаве и исследование выращенного кристалла. Сравнение результатов измерения температуры в расплаве [Vizman D. et al., J of Crystal Growth – 2001. – Vol.233 – P.687–698; Gräbner O. et al., Microelectronic Eng. – 2001. – Vol.56 – P.83–88] с данными LES приведено на Рис.7. Предсказание спектральных свойств и амплитуды тепловых флуктуаций на базе LES выглядит вполне убедительно. Можно отметить, что LES и RANS подходы верно предсказали средний перепад температуры в расплаве, но трехмерный расчет позволил описать детали температурного распределения. Хотя трехмерные расчеты дают слегка

завышенную температуру, отличие ее от экспериментальных значений лежит в пределах пульсаций температуры.

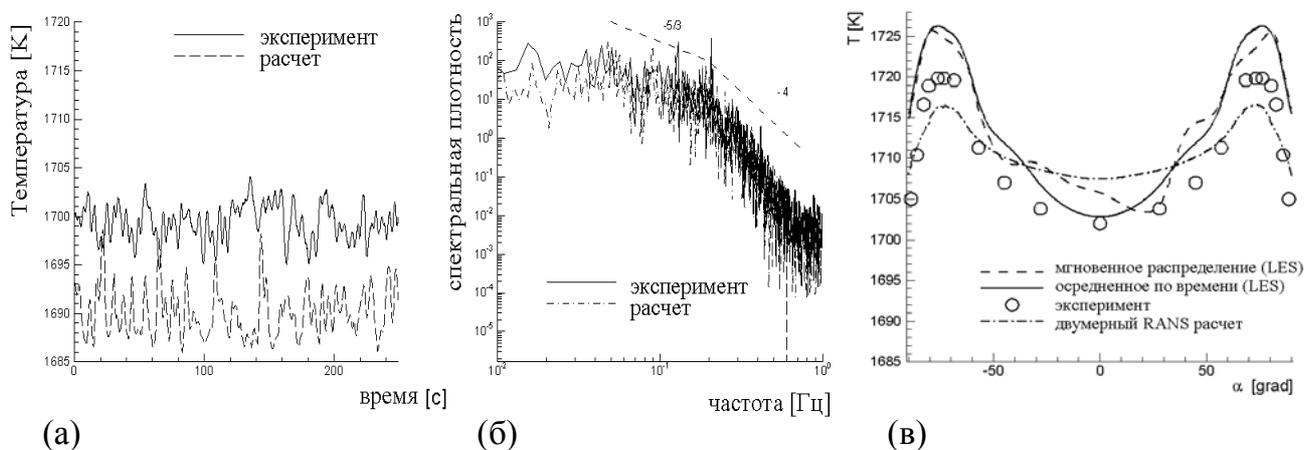


Рис.7. Эволюция температуры во времени (а) и ее спектральное разложение (б) в трех точках расплава под кристаллом (на расстоянии 3 см от оси симметрии, на высоте свободной поверхности расплава). Распределения температуры вдоль границы раздела тигель/расплава (в): мгновенное распределение из LES (пунктирная), осредненное по времени из LES (сплошная), эксперимент (символы) и RANS расчет (точка-штрих).

Особую важность при формировании ансамбля дефектов кристаллической решетки имеет геометрия фронта кристаллизации, влияющая на градиент температуры в кристалле. Измерения фронта кристаллизации, проведенные в фирме Wacker Siltronic (ФРГ) для случая выращивания кристалла диаметром 100 и 300 мм и опубликованные в работах [9] и [10], были использованы для дополнительной проверки расчетов (Рис.8). Было обнаружено, что трехмерные расчеты на основе LES позволяют предсказать геометрию фронта кристаллизации существенно лучше, чем традиционное RANS моделирование.

Разработанная и успешно верифицированная трехмерная нестационарная модель течения расплава и сопряженного теплообмена в зоне кристаллизации была применена для получения детальной информации о структуре осредненного течения расплава, кинетической энергии крупных и энергонесущих турбулентных вихрей, моментов температурных пульсаций. Данные, полученные с помощью трехмерных нестационарных расчетов, позволили выявить основные причины недостаточной предсказательности расчетов турбулентной конвекции расплава в рамках осреднения по Рейнольдсу. При помощи метода моделирования крупных вихрей исследован эффект скорости вращения тигля на характеристики турбулентного теплопереноса в

приложении к росту кристаллов кремния диаметром 100 мм. При этом выявлены основные закономерности перестройки течения расплава и механизмы генерации/подавления турбулентности.

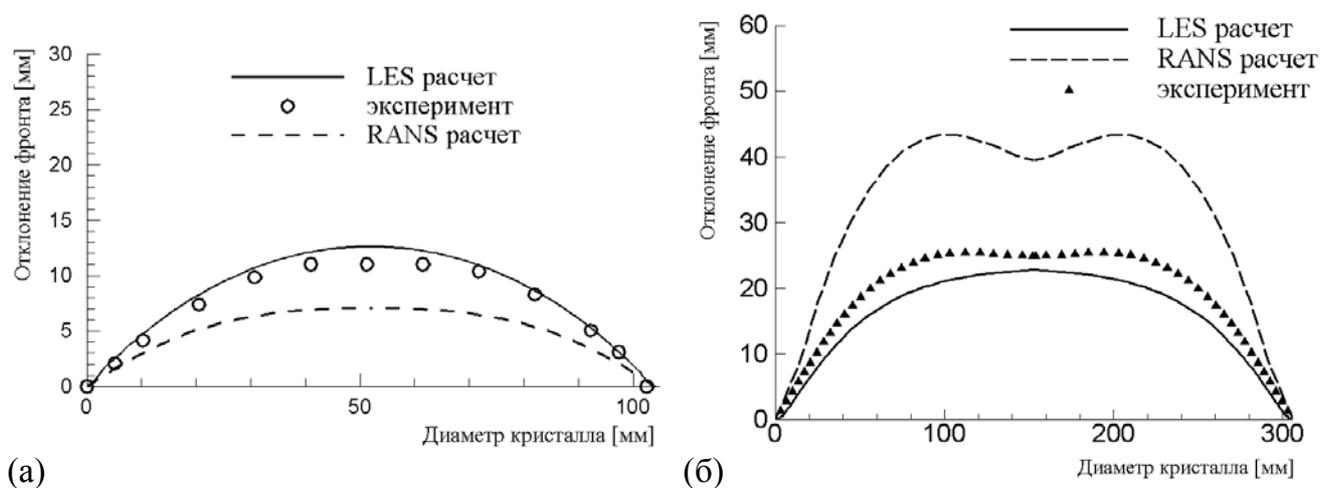


Рис.8. Сравнение экспериментальной геометрии фронта кристаллизации с расчетами. Диаметр кристалла – 100 мм (а) и 300 мм (б).

В заключении сформулированы основные результаты работы:

- 1) На основе метода конечных объемов разработан и реализован программный пакет для решения уравнений Навье-Стокса для гипозвуковых течений, дополненных уравнением теплопереноса и уравнениями транспорта скалярных величин. Данные уравнения используются без изменений для решения задач течения и теплообмена в несжимаемых жидкостях. В рамках единого программного кода уравнения рассматриваются в стационарной и нестационарной формулировках, в двумерной и трехмерной системах декартовых координат и в цилиндрической системе координат для решения осесимметричных задач. Аппроксимации диффузионных и нестационарных слагаемых были выполнены со вторым порядком точности, при аппроксимации конвективных слагаемых использовано несколько способов: противопоточные методы 1-го и 3-го порядка, центральные разности 2-го и 4-го порядков точности, а также учет нелинейности распределений гидродинамических величин вдоль элемента поверхности.
- 2) Программный комплекс был адаптирован к задачам сопряженного теплообмена и течения при росте кристаллов по методу Чохральского, реализованы следующие возможности: постановка граничных условий на криволинейной границе раздела двух несмешивающихся жидкостей, постановка граничного условия с учетом

лучистого теплообмена, алгоритмы перестройки расчетной сетки для нахождения геометрии фронта кристаллизации.

- 3) Программный код был успешно протестирован на задачах течения в плоском канале и трубе, в кубической и цилиндрической полостях, на модельной задаче течения расплава по методу Чохральского. Для задачи течения в канале было показано, что применение высоких порядков аппроксимации конвективных слагаемых с учетом нелинейности распределений гидродинамических величин вдоль элемента поверхности позволяет получать численно на неортогональных сетках данные, совпадающие с аналитическим решением.
- 4) Для задачи течения в цилиндрической полости при подогреве снизу были получены и проанализированы данные по эволюции нестационарной трехмерной конвекции к развитому турбулентному течению. Для различных чисел Рэлея ($Ra=10^4-10^8$) были оценены диапазоны применимости прямого численного моделирования (DNS) и метода моделирования крупных вихрей (LES) с использованием расчетных сеток с количеством ячеек порядка 100000.
- 5) В рамках осесимметричной квазистационарной постановки была разработана сопряженная модель течений расплава, газа и глобального теплообмена в ростовом узле для выращивания кристаллов кремния методом Чохральского. Впервые исследовано воздействие ламинарного течения газа на турбулентное течение расплава. Течение расплава рассматривалось в рамках осреднения по Рейнольдсу (RANS) с использованием $k-\epsilon$ модели турбулентности Чена. Исследовано влияние расхода газа на структуру и турбулентные характеристики течения расплава при различных скоростях вращения тигля.
- 6) С использованием метода LES разработана 3D нестационарная модель турбулентного течения расплава и сопряженного теплообмена в зоне кристаллизации, включающей расплав, тигель и кристалл. Данная модель была успешно верифицирована путем сравнения данных расчетов с экспериментальными данными по тепловым пульсациям в расплаве, температуре тигля и расплава, геометрии фронта кристаллизации.
- 7) Изучены характеристики трехмерного течения расплава при росте кристаллов кремния диаметрами 100 и 300 мм. Показано, что для большинства ростовых режимов, несмотря на вращение тигля и кристалла, турбулентная конвекция имеет

преимущественно естественно-конвективную природу, при этом в подкристалльной области ее свойства сходны с конвекцией Рэлея-Бенара.

- 8) С помощью 3D нестационарной модели было исследовано влияние изменения скорости вращения тигля на структуру и характеристики турбулентного течения расплава. Было обнаружено, что без вращения тигля в расплаве наблюдается единое пульсирующее макродвижение, имеющее аналогию с течением в цилиндрической полости. При малых и умеренных скоростях вращения естественная конвекция носит зонный характер, т.е. особенности течения в подкристалльной области сильно отличаются от особенностей течения на периферии расплава. При наибольших скоростях вращения тигля интенсивное естественно-конвективное движение локализуется под кристаллом, а вдоль тигля заметно формирование экмановского пограничного слоя, при этом на периферии расплава активизируется новый источник гидродинамических пульсаций – бароклинная неустойчивость, что приводит к слабому росту кинетической энергии турбулентности.
- 9) С использованием данных LES был произведен анализ турбулентного теплопереноса в расплаве путем вычисления кинетической энергии турбулентности разрешаемых вихревых структур и моментов пульсаций температуры. При этом было выявлено, что распределение кинетической энергии турбулентности в расплаве, рассчитанное в рамках RANS подхода, не воспроизводит реальной интенсивности турбулентного перемешивания в различных частях расплава, а лишь приблизительно предсказывает средний уровень кинетической энергии турбулентности в расплаве в целом. Вычисление моментов температурных пульсаций для различных скоростей вращения тигля показало, что турбулентный теплоперенос в расплаве носит сложный зонный характер и может быть значителен в направлениях, ортогональных к градиенту осредненной температуры, что объясняет причины недостаточной точности классического изотропного RANS подхода к расчетам турбулентного течения расплава.

Основные результаты диссертации опубликованы в работах:

1. Калаев В.В., Жмакин А.И. Моделирование глобального теплообмена в установке выращивания кристаллов по методу Чохральского, включая расчет формы

интерфейса расплав-твердое тело // XXVII Неделя Науки СПбГТУ, Мат. межвуз. научн. конф. – СПб, 1998. – ч.3. – С.32

2. Калаев В.В., Евстратов И.Ю., Жмакин А.И., Моделирование глобального тепло и массообмена в устройстве по выращиванию монокристаллов кремния методом Чохральского, IX Национальная Конференция по Росту Кристаллов, ИК РАН, Тезисы докладов. – Москва, 2000. – С.130

3. О.Н. Буденкова, Васильев М.Г., Руколайне С.А., Юферев В.С, Калаев В.В, Численное изучение сложного теплообмена при вытягивании кристаллов германата висмута из расплава методом Чохральского // Третья российская национальная конференция по теплообмену. Сборник трудов. – Москва, 2002 – Т.6 – С.234-237

4. Kalaev V.V., Zhmakin A.I., Smirnov E.M. Modeling of turbulent melt convection during Czochralski bulk crystal growth // Journal of Turbulence – 2002 – Vol.3 №13 – P.1-12

5. Kalaev V.V., Zabelin V.A., Makarov Yu.N. Modeling of impurity transport and point defect formation during Cz Si crystal growth” // Solid State Phenomena – 2002– Vol.82-84 – P.41-46

6. Kalaev V.V., Zhmakin A.I. Large Eddy Simulation of Melt Convection during Czochralski Crystal Growth // Advances in Turbulence IX, Proceedings of the Ninth European Turbulence Conference, Southampton, U.K. – 2002 – P.207-210

7. Kalaev V.V., Zhmakin A.I. Hybrid LES/RANS simulation of melt convection during crystal growth // Engineering Turbulence Modelling and Experiments 5, Elsevier, The 5th International Symposium on Engineering Turbulence Modelling and Measurements, Mallorca, Spain, Proceedings. – 2002 – P.337-346

8. Kalaev V.V., Evstratov I.Yu., Makarov Yu.N. Gas flow effect on global heat transport and melt convection in Czochralski silicon growth // J. Crystal Growth – 2003 – Vol.249/1-2 – P.87-99

9. Kalaev V.V., Lukanin D.P., Zabelin V.A., Makarov Yu.N., Virbulis J., Dornberger E., Ammon W., Prediction of bulk defects in CZ Si crystals using 3D unsteady calculations of melt convection // Materials Science in Semiconductor Processing – 2003 – Vol.5/4-5 – P.369-373

10. Kalaev V.V., Lukanin D.P., Zabelin V.A., Makarov Yu.N., Virbulis J., Dornberger E., Ammon W., Calculation of bulk defects in CZ Si growth: Impact of melt turbulent fluctuations // J. Crystal Growth – 2003 – Vol.250/1-2 – P.203-208