УДК 548.55

Математическое моделирование газодинамики и переноса примесей при выращивании монокристаллов кремния на установке Редмет-90М

*Верезуб Наталия Анатольевна, к.ф.-м.н., старший научный сотрудник1,*

*verezub[@ipmnet.ru](mailto:morozov@infway.ru)*

*Простомолотов Анатолий Иванович, д.т.н., доцент, ведущий научный сотрудник1, aprosto@inbox.ru*

*1ИПМех РАН, г.Москва*

Аннотация: Представлены результаты математического моделирования газодинамики аргона в разреженной атмосфере ростовой камеры установки РЕДМЕТ-90М для выращивания монокристаллов кремния методом Чохральского. Анализируется влияние расположения тепловых экранов на структуру течения газа при его впуске через верхнее центральное отверстие камеры и выпуске через центральное отверстие на дне. С учетом течения газа рассчитывается перенос моноокиси кремния, испаряющейся с поверхности расплава, и моноокиси углерода, образующейся в результате окисления нагревателя.

Ключевые слова: рост кристалла, кремний, газодинамика, примесь, моделирование.

Введение

Монокристаллы кремния выращивают методом Чохральского при пониженном давлении в атмосфере инертного газа (аргона), чтобы избежать или снизить до минимума влияние сопутствующих химических реакций на технологический процесс. Важная реакция протекает в расплаве кремния при растворении кварцевого тигля с образованием моноокиси кремния. Концентрация моноокиси кремния над поверхностью расплава влияет на её испарение из расплава, тем самым определяя содержание кислорода в выращиваемом монокристалле. Кроме этого, при высоких температурах происходит нежелательное выгорание нагревателя с образованием моноокиси углерода. Поэтому исследование газодинамики в ростовой камере является актуальным. В данной работе оно выполнено для отечественной большегрузной установки РЕДМЕТ-90М, предназначенной для выращивания монокристаллов кремния диаметром 200 мм методом Чохральского.

Математическая модель и результаты расчетов

Математическое моделирование процессов тепломассопереноса для процесса Чохральского осуществлялось на основе программного комплекса *Crystmo/Marc* [1] и состояло из 2-х этапов. На первом этапе рассчитывался сопряженный теплообмен в системе кристалл-расплав и в твердых частях ростовой камеры. На втором этапе программный комплекс *Crystmo/Marc* был дополнен модулями для решения системы нестационарных уравнений, описывающих течение и тепломассообмен на основе модели идеального газа. Ввиду того, что учет течения газа изменял тепловой баланс в ростовой камере, рассчитанный на первом этапе, то для достижения теплового баланса осуществлялся корректировочный пересчет радиационно-кондуктивного теплообмена в ростовой камере. Расчетная модель для установки РЕДМЕТ-90М приведена на Рис. 1*а*.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |
| *а* | *б* | *в* |

Рис. 1. Установка РЕДМЕТ-90М: (*а*) схема установки: 1 – корпус, 2 – кристалл, 3 – боковой экран, 4 – нижний экран, 5 – околокристальный экран, 6 – расплав, 7 – нагреватель, 8 – тигель, 9 – графитовая подставка, 10 – нижний графитовый экран, 11 – отверстие для впуска и 12 – отверстие для выпуска газа; (*б*) течение аргона (стрелки – направление); (*в*) незакрашенные области соответствуют изменению концентрации моноокиси углерода CO (слева от оси) и моноокиси кремния SiO (справа от оси), числа показывают концентрации, нормированные на их максимальные значения.

В ростовой камере основное втекание газа через небольшое центральное отверстие радиусом 2 см (Рис. 1*б*) происходит в виде приосевой струи со большой скоростью *Vin* = 100 см/с. Струя газа на конусной части растущего кристалла разделяется: часть потока меняет направление от вертикального (сверху вниз) на наклонное, определяемое углом конуса кристалла, а другая часть продолжает движение вниз вдоль боковой поверхности кристалла и обтекает околокристальный экран. Оба потока сливаются в нижней части камеры и улетучиваются через донной отверстие. Такое течение оказывает определяющее влияние на перенос образующихся в процессе примесей (Рис. 1*в*). Благодаря обтеканию частью потока газа поверхности расплава происходит его насыщение испаряющейся моноокисью кремния SiO до значения 1.0 и её перенос вниз в соответствии с направлением течения газа. Однако в нижней части камеры этот поток сливается с другим потоком, ненасыщенным примесью SiO, поэтому её концентрация снижается до величины 0.5. Аналогичное изменение происходит с концентрацией моноокиси углерода, источником которого является процесс окисления нагревателя, на котором концентрация достигает максимального значения 1.0 и соответственно падает до величины 0.5 при сливании течения газа с другим потоком, ненасыщенным примесью СO.

Работа выполнена по теме государственного задания (№ госрегистрации 124013000674-0).

Список использованных источников

1. Простомолотов А.И., Верезуб Н.А. Механика процессов получения кристаллических материалов. 2023. Издательский Дом НИТУ «МИСиС» Москва, 568 с.

MATHEMATICAL MODELING OF GAS DYNAMICS AND IMPURITY TRANSPORT DURING SILICON SINGLE CRYSTAL GROWTH BY REDMET-90M

N.A. Verezub, A.I. Prostomolotov

Abstract: This article presents mathematical modeling of argon gas dynamics in rarefied atmosphere of REDMET-90M hot zone for Czochralski silicon single crystal growth. The influence of heat shield locations on gas flow structure is analyzed at its inlet through upper central hole and outlet through central bottom hole. Taking into account of this gas flow, the transfer of silicon monoxide evaporating from a melt and carbon monoxide formed by heater oxidation are calculated.

Key words: crystal growth, silicon, gas dynamics, impurity, modeling.