

УДК 532.522

О ГРАНИЦАХ НАЧАЛЬНОГО УЧАСТКА ПЛЕНКИ РАСПЛАВА, ФОРМИРУЕМОЙ ПРИ БЕСТИГЕЛЬНОМ ЗОННОМ ПЕРЕПЛАВЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ

В. И. Яковлев

Институт теоретической и прикладной механики СО РАН, 630090 Новосибирск

Выполнен анализ стационарных гидродинамических и температурных полей вблизи верхней тройной точки процесса бестигельного зонного переплава. Установлены закономерности, определяющие угловое положение и форму начального участка пленки расплава в зависимости от тепловых условий на поверхностях твердой фазы и расплава в близкой окрестности тройной точки в виде четырех аналитических соотношений.

1. Процесс бестигельного зонного переплава полупроводниковых материалов с помощью токов высокой частоты тарельчатого индуктора описан, например, в работе [1], где приведены результаты численного моделирования. Теоретическое исследование этого процесса сопряжено с рядом трудностей, в частности с наличием в задаче взаимодействующих между собой неизвестных границ. Установление закономерностей, связывающих локальные (вблизи тройной точки) геометрические параметры неизвестных границ с тепловыми условиями на них является целью данной работы.

Задача рассматривается в стационарной плоской постановке и схематически представлена на рис. 1, *a*. Твердая фаза (поликристалл), показанная на схеме штриховкой, перемещается вертикально вниз со скоростью v_0 . При переходе границы γ_s твердая фаза переходит в расплав, который стекает вниз, формируя пленку со свободной границей γ_l ; границы γ_s , γ_l неизвестны (индекс s соответствует твердой фазе, индекс l — расплаву). Задача рассматривается в окрестности верхней тройной точки процесса бестигельного зонного переплава [1], где межфазная граница γ_s и свободная поверхность γ_l пересекаются с вертикальной плоской границей поликристалла γ . Отметим, что в [1] пленка расплава численно не моделировалась.

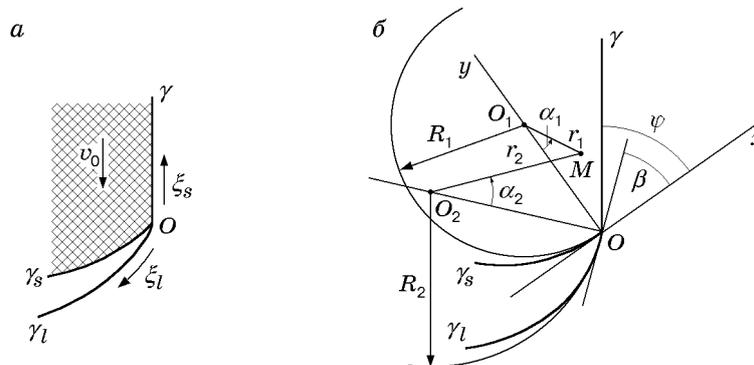


Рис. 1

В эксперименте плавление образца осуществляется за счет токов высокой частоты, индуцируемых тарельчатым индуктором. В данной теоретической постановке индуктор не рассматривается, его действие заменяется поверхностным тепловыделением и магнитным давлением, причем подводимая к единице поверхности поликристалла и расплава тепловая мощность задается в виде разложения

$$W_s = W_s^{(0)} + W_s^{(1)}\xi_s + W_s^{(2)}\xi_s^2 + \dots, \quad W_l = W_l^{(0)} + W_l^{(1)}\xi_l + W_l^{(2)}\xi_l^2 + \dots, \quad (1.1)$$

где ξ_s — расстояние от тройной точки O до точки твердой поверхности; ξ_l — расстояние вдоль свободной поверхности.

Задача заключается в определении гидродинамических и температурных полей в пленке расплава, распределения температуры поликристалла, а также положения и формы границ γ_s, γ_l в окрестности тройной точки O в зависимости от параметров $W^{(0)}, W^{(1)}, \dots$, характеризующих интенсивность теплоподвода к границам. Гидродинамика рассматривается без учета тепловой конвекции (т. е. без учета сил плавучести), в результате чего общая задача расщепляется на чисто гидродинамическую и тепловую задачи. Плотность ρ , удельная теплоемкость c и коэффициент теплопроводности λ в рассматриваемой малой окрестности O считаются постоянными; используется стоксово приближение.

Задачу удобно рассматривать, используя две полярные системы координат (r_1, α_1) , (r_2, α_2) с центрами в точках O_1, O_2 (рис. 1, б), положения которых относительно границы γ и тройной точки O задаются углами φ, β и радиусами R_1, R_2 . Из рис. 1, б следуют соотношения между координатами центра O_2 и произвольной точки M

$$\begin{aligned} x(O_2) &= -R_2 \sin \beta = -[r_2 \sin(\beta + \alpha_2) - r_1 \sin \alpha_1], \\ y(O_2) &= R_2 \cos \beta = R_1 - r_1 \cos \alpha_1 + r_2 \cos(\beta + \alpha_2). \end{aligned}$$

Отсюда

$$r_1 = \sqrt{R_1^2 + R_2^2 + r_2^2 - 2R_1R_2 \cos \beta + 2R_1r_2 \cos(\beta + \alpha_2) - 2R_2r_2 \cos \alpha_2}; \quad (1.2)$$

$$\operatorname{tg} \alpha_1 = \frac{-R_2 \sin \beta + r_2 \sin(\beta + \alpha_2)}{R_1 - R_2 \cos \beta + r_2 \cos(\beta + \alpha_2)}. \quad (1.3)$$

Координаты точки на границе γ определяются следующими выражениями:

$$r_{1*}(\alpha_1) = R_1 \frac{\cos \varphi}{\cos(\varphi - \alpha_1)} = R_1 - R_1 \alpha_1 \operatorname{tg} \varphi + R_1(1 + 2 \operatorname{tg}^2 \varphi) \frac{1}{2} \alpha_1^2 + \dots; \quad (1.4)$$

$$\xi_s = R_1 \frac{\sin \alpha_1}{\cos(\varphi - \alpha_1)} = R_1 \left(\frac{1}{\cos \varphi} \alpha_1 - \frac{\sin \varphi}{\cos^2 \varphi} \alpha_1^2 + \dots \right). \quad (1.5)$$

Неизвестные границы в окрестности O задаются выражениями

$$\gamma_s: \quad r_{1s} = R_1 + R_1 K_s \alpha_1^3 + O(\alpha_1^4); \quad (1.6)$$

$$\gamma_l: \quad r_{2l} = R_2 + R_2 K_l \alpha_2^3 + O(\alpha_2^4). \quad (1.7)$$

Следовательно, φ — угол между касательной к межфазной границе в точке O и твердой границей, β — угол клина в начальной точке пленки расплава, а R_1, R_2 — радиусы кривизны границ γ_s, γ_l соответственно. Отличие этих границ от точных окружностей учитывается вторыми слагаемыми в правых частях (1.6), (1.7), где K_s, K_l — неопределенные константы.

2. Гидродинамическая задача для функции тока $\psi(r_1, \alpha_1)$ и давления $p(r_1, \alpha_1)$ задается уравнениями

$$\Delta \Delta \psi(r_1, \alpha_1) = 0; \quad (2.1)$$

$$\text{grad } p(r_1, \alpha_1) = \mu \left[\frac{1}{r_1} \frac{\partial \Delta \psi}{\partial \alpha_1} \mathbf{e}_{r_1} - \frac{\partial \Delta \psi}{\partial r_1} \mathbf{e}_{\alpha_1} \right] + \rho_l \mathbf{g}, \quad \mathbf{v} = \frac{1}{r_1} \frac{\partial \psi}{\partial \alpha_1} \mathbf{e}_{r_1} - \frac{\partial \psi}{\partial r_1} \mathbf{e}_{\alpha_1} \quad (2.2)$$

(μ — динамическая вязкость, \mathbf{g} — ускорение свободного падения, $\mathbf{e}_{r_1}, \mathbf{e}_{\alpha_1}$ — соответствующие единичные векторы) и граничными условиями.

На границе γ_s имеют место сохранение потока массы и непрерывность тангенциальной компоненты скорости. Отсюда скорость расплава на границе γ_s

$$\mathbf{v}|_{\gamma_s} = \mathbf{v}_0 - (1 - \tilde{\rho})(\mathbf{v}_0 \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}, \quad (2.3)$$

где \mathbf{n} — единичный вектор нормали, направленный из твердой фазы в расплав; $\tilde{\rho} = \rho_s / \rho_l$ — отношение плотностей соответствующих фаз. Отличие значений скорости жидкости на границе γ_s от \mathbf{v}_0 обусловлено изменением плотности среды в процессе фазового перехода. Так как для границы (1.6)

$$\mathbf{n}|_{\gamma_s} = [1 - (9/2)K_s^2\alpha_1^4 + O(\alpha_1^5)] \mathbf{e}_{r_1} + [-3K_s\alpha_1^2 + O(\alpha_1^3)] \mathbf{e}_{\alpha_1}, \quad (2.4)$$

условие (2.3) можно отнести к границе $r_1 = R_1$ и представить в виде разложения по степеням α_1

$$\begin{aligned} v_{r_1}|_{r_1=R_1} &= \tilde{\rho}v_0 \sin \varphi - \tilde{\rho}v_0\alpha_1 \cos \varphi - v_0[(1/2)\tilde{\rho} \sin \varphi + (1 - \tilde{\rho})3K_s \cos \varphi]\alpha_1^2 + O(\alpha_1^3), \\ v_{\alpha_1}|_{r_1=R_1} &= -v_0 \cos \varphi - v_0\alpha_1 \sin \varphi + v_0[(1/2) \cos \varphi + (1 - \tilde{\rho})3K_s \sin \varphi]\alpha_1^2 + O(\alpha_1^3). \end{aligned} \quad (2.5)$$

На свободной границе γ_l , представляющей собой линию тока, проходящую через тройную точку, выполняется кинематическое условие

$$\psi|_{\gamma_l} = \psi[r_{2l}(\alpha_2), \alpha_2] = \psi_*(\alpha_2) = \text{const},$$

которое для локального решения эквивалентно условиям

$$\left. \frac{d\psi_*(\alpha_2)}{d\alpha_2} \right|_{\alpha_2=0} = 0, \quad \left. \frac{d^2\psi_*(\alpha_2)}{d\alpha_2^2} \right|_{\alpha_2=0} = 0, \dots \quad (2.6)$$

(последующие приближения не используются), а также динамические условия непрерывности компонент тензора напряжений

$$\sigma_{nn}|_{\gamma_l} = -(p_0 + p_m), \quad \sigma_{n\tau}|_{\gamma_l} = 0.$$

Здесь p_0 — постоянное вдоль поверхности внешнее давление, учитывающее также поверхностное натяжение; p_m — магнитное давление (необязательно постоянное). Принято, что электромагнитные силы не имеют касательных компонент, зависимость коэффициента поверхностного натяжения от температуры не учитывается. Так как

$$\sigma_{nn} = \sigma_{rr}n_r^2 + \sigma_{\alpha\alpha}n_\alpha^2 + 2\sigma_{r\alpha}n_r n_\alpha, \quad \sigma_{n\tau} = (\sigma_{\alpha\alpha} - \sigma_{rr})n_r n_\alpha + \sigma_{\alpha r}(n_r^2 - n_\alpha^2),$$

а n_r, n_α выражаются формулой, получающейся из (2.4) заменой α_1, K_s соответственно на α_2, K_l , то рассматриваемые динамические граничные условия можно снести на окружность $r_2 = R_2$ и представить в виде

$$\sigma_{\alpha r} - (\sigma_{\alpha\alpha} - \sigma_{rr})3K_l\alpha_2^2|_{r_2=R_2} = O(\alpha_2^3); \quad (2.7)$$

$$\sigma_{rr} - 6\sigma_{r\alpha}K_l\alpha_2^2|_{r_2=R_2} = -(p_0 + p_m)|_{r_2=R_2}. \quad (2.8)$$

Входящие в соотношения (2.7), (2.8) компоненты тензора напряжений выражаются через функцию тока и давление в расплаве:

$$\sigma_{rr} = -p + 2\mu \frac{\partial}{\partial r_2} \left(\frac{1}{r_2} \frac{\partial \psi}{\partial \alpha_2} \right), \quad \sigma_{r\alpha} = \mu \left(\frac{1}{r_2^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \alpha_2^2} - \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_2^2} + \frac{1}{r_2} \frac{\partial \psi}{\partial r_2} \right), \quad (2.9)$$

$$\sigma_{\alpha\alpha} = -p + 2\mu \left(-\frac{1}{r_2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_2 \partial \alpha_2} + \frac{1}{r_2^2} \frac{\partial \psi}{\partial \alpha_2} \right).$$

Локальное решение гидродинамической задачи берется в виде разложения по степеням α_1

$$\begin{aligned} \psi(r_1, \alpha_1) &= \psi_0(r_1) + \psi_1(r_1)\alpha_1 + \psi_2(r_1)\alpha_1^2 + \dots, \\ p(r_1, \alpha_1) &= p_0(r_1) + p_1(r_1)\alpha_1 + p_2(r_1)\alpha_1^2 + \dots \end{aligned} \quad (2.10)$$

Отметим, что система дифференциальных уравнений четвертого порядка для функций $\psi_i(r_1)$, получающаяся после подстановки (2.10) в уравнение (2.1), здесь не приводится, так как для определения локального поведения решения достаточно иметь первые члены разложения вблизи тройной точки

$$\begin{aligned} \psi_0(r_1) &= c_0 + \psi'_0(R_1)(r_1 - R_1) + (1/2)\psi''_0(R_1)(r_1 - R_1)^2 + \dots, \\ \psi_1(r_1) &= \psi_1(R_1) + \psi'_1(R_1)(r_1 - R_1) + (1/2)\psi''_1(R_1)(r_1 - R_1)^2 + \dots, \\ &\dots \end{aligned}$$

(c_0 — постоянная), которые находятся из граничных условий. Из условия (2.5) получаем

$$\begin{aligned} \psi_1(R_1) &= R_1 \tilde{\rho} v_0 \sin \varphi, & 2\psi_2(R_1) &= -R_1 \tilde{\rho} v_0 \cos \varphi, \\ 3\psi_3(R_1) &= -R_1 v_0 [(1/2)\tilde{\rho} \sin \varphi + (1 - \tilde{\rho})3K_s \cos \varphi], \\ \psi'_0(R_1) &= v_0 \cos \varphi, & \psi'_1(R_1) &= v_0 \sin \varphi, & \psi'_2(R_1) &= -v_0 [(1/2) \cos \varphi + (1 - \tilde{\rho})3K_s \sin \varphi]. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Первое из кинематических условий (2.6) на свободной границе дает соотношение

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial r_2} \right|_0 \frac{dr_{2l}}{d\alpha_2}(0) + \left. \frac{\partial \psi}{\partial \alpha_2} \right|_0 = 0.$$

Здесь нижний индекс 0 обозначает, что производные вычисляются в точке $r_2 = R_2$, $\alpha_2 = 0$. Так как $(dr_{2l}/d\alpha_2)|_0 = 0$, возникает требование

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial \alpha_2} \right|_0 = 0. \quad (2.12)$$

Аналогично из второго условия (2.6) с учетом $(d^2 r_{2l}/d\alpha_2^2)|_0 = 0$ получим

$$\left. \frac{\partial^2 \psi}{\partial \alpha_2^2} \right|_0 = 0. \quad (2.13)$$

Функция тока (2.10) задана в переменных (r_1, α_1) (см. (1.2)–(1.5)). Воспользуемся соответствующими формулами (1.2), (1.3) и выведем следствия из требований (2.12), (2.13). Из (2.12) следует

$$-\psi'_0(R_1)R_2 \sin \beta + \psi_1(R_1)\tilde{R} \cos \beta = 0,$$

где $\tilde{R} = R_2/R_1$, что с учетом (2.11) приводит к первому из условий

$$\operatorname{tg} \beta = \tilde{\rho} \operatorname{tg} \varphi, \quad (2.14)$$

определяющих геометрию жидкой пленки. Полученная связь между углом клина β и углом отклонения касательной к межфазной границе от вертикали представляет собой закон преломления линий тока на межфазной границе для линии тока, проходящей через тройную точку.

Аналогично из (2.13) получается соотношение

$$\begin{aligned} \psi_0''(R_1)R_2 \sin^2 \beta + (1 - \tilde{\rho})v_0(\cos \varphi \cos^2 \beta - \sin \varphi \sin 2\beta) - \\ - v_0(\cos \varphi \cos \beta + \tilde{\rho} \sin \varphi \sin \beta) = 0, \end{aligned} \quad (2.15)$$

содержащее значение второй производной $\psi_0''(R_1)$.

Рассмотрим динамические граничные условия. Из нулевого приближения условия (2.7) $\sigma_{\alpha r}|_0 = 0$ с учетом (2.13) получаем

$$\left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial r_2^2} - \frac{1}{R_2} \frac{\partial \psi}{\partial r_2} \right) \Big|_0 = 0.$$

Это условие с учетом (1.2), (1.3) и (2.11) приводится к виду

$$\begin{aligned} \psi_0''(R_1)R_2 \cos^2 \beta + \tilde{R}(1 - \tilde{\rho})v_0(\cos \varphi \sin^2 \beta + \sin \varphi \sin 2\beta) - \\ - v_0(\cos \varphi \cos \beta + \tilde{\rho} \sin \varphi \sin \beta) = 0. \end{aligned}$$

Сложив полученное равенство с (2.15) и учтя, что согласно (2.14) $\cos \varphi \cos \beta + \tilde{\rho} \sin \varphi \sin \beta = \cos \varphi / \cos \beta$, получим значение второй производной $\psi_0''(R_1)$, дополняющее условия (2.11):

$$\psi_0''(R_1)R_2 = [-\tilde{R}(1 - \tilde{\rho}) \cos \varphi + 2 \cos \varphi / \cos \beta]v_0.$$

Подставив это выражение в (2.15), получим второе важное соотношение (наряду с (2.14))

$$\tilde{R}(1 - \tilde{\rho}) = \frac{\cos 2\beta}{\cos(\varphi + 2\beta)} \frac{\cos \varphi}{\cos \beta}, \quad (2.16)$$

определяющее отношение радиусов кривизны рассматриваемых неизвестных границ. Здесь уместно обратить внимание, что полученное соотношение достаточно универсально. Величина \tilde{R} не зависит от констант K_s , K_l , входящих в (1.6), (1.7), а также от условий на свободной границе, кроме условия отсутствия внешних касательных напряжений на свободной границе расплава. Отметим также, что для получения (2.16) необходимо учитывать изменения плотности в процессе фазового перехода.

Нулевое приближение граничного условия (2.8)

$$\sigma_{rr}|_0 = -p|_0 + 2\mu \left(-\frac{1}{R_2^2} \frac{\partial \psi}{\partial \alpha_2} \Big|_0 + \frac{1}{R_2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_2 \partial \alpha_2} \Big|_0 \right) = -p_0 - p_m|_0,$$

упрощенное с учетом (2.12), после вычисления смешанной второй производной приводит к выражению

$$p|_0 = p_0 + p_m|_0 + \frac{\mu v_0}{R_2} \frac{\sin 2\varphi}{\cos(\varphi + 2\beta) \cos \beta}$$

для давления жидкости в тройной точке. Распределение давления в окрестности этой точки определяется уравнением (2.2).

Рассмотрение первых приближений динамических граничных условий (2.7), (2.8) совместно с кинематическим условием

$$\frac{d^3 \psi_*}{d\alpha_2^3} \Big|_{\alpha_2=0} = 0$$

позволяет определить значения производных $\psi_0'''(R_1)$, $\psi_1''(R_1)$ и установить связь между параметрами K_s , K_l , характеризующими отклонения рассматриваемых границ от точных окружностей с соответствующими радиусами R_1 , R_2 . В то время как для \tilde{R} здесь получено простое “универсальное” соотношение (2.16), связь между K_s , K_l весьма громоздка, содержит параметр $(dp_m/d\alpha_2)|_0$, характеризующий влияние внешних условий, и по этой причине здесь не приводится.

3. Тепловая часть задачи определяется уравнениями теплопроводности, которые в координатах (r_1, α_1) имеют вид

$$\Delta\theta_s = P^{(s)} \left[\frac{\partial\theta_s}{\partial r_1} \sin(\varphi - \alpha_1) - \frac{1}{r_1} \frac{\partial\theta_s}{\partial\alpha_1} \cos(\varphi - \alpha_1) \right]; \quad (3.1)$$

$$\Delta\theta_l = \frac{P^{(l)}}{v_0} \left(\frac{1}{r_1} \frac{\partial\psi}{\partial\alpha_1} \frac{\partial\theta_l}{\partial r_1} - \frac{1}{r_1} \frac{\partial\psi}{\partial r_1} \frac{\partial\theta_l}{\partial\alpha_1} \right); \quad (3.2)$$

$$\Delta = \frac{1}{r_1} \frac{\partial}{\partial r_1} \left(r_1 \frac{\partial}{\partial r_1} \right) + \frac{1}{r_1^2} \frac{\partial^2}{\partial\alpha_1^2}, \quad P^{(s)} = \frac{\rho_s c_s v_0}{\lambda_s}, \quad P^{(l)} = \frac{\rho_l c_l v_0}{\lambda_l}.$$

Здесь θ_s, θ_l — превышение соответственно температуры твердой и жидкой фазы над температурой плавления T_0 .

Граничные условия записываются в предположении, что теплоотдача с поверхности происходит за счет излучения, а подвод тепла задается соотношениями (1.1). Выражение для теплового потока излучения $\varepsilon\sigma_0[(T_0 + \theta)^4 - T_*^4]$ (σ_0 — постоянная Стефана — Больцмана) после линеаризации имеет вид $\Lambda_s(\theta_s + \theta_{s*}), \Lambda_l(\theta_l + \theta_{l*})$ (соответственно для поликристалла и расплава), где $\Lambda_s = \varepsilon_s\sigma_0(T_0 + T_{s*})(T_0^2 + T_{s*}^2)$, $\Lambda_l = \varepsilon_l\sigma_0(T_0 + T_{l*})(T_0^2 + T_{l*}^2)$; $\theta_{s*} = T_0 - T_{s*}$, $\theta_{l*} = T_0 - T_{l*}$ — константы; T_* — температура окружения, ε — степень черноты, различные, вообще говоря, для поликристалла и расплава. Таким образом, температурные граничные условия имеют следующий вид:

- на границе γ_s $\theta_s = 0, \theta_l = 0, \lambda_l(\partial\theta_l/\partial n) - \lambda_s(\partial\theta_s/\partial n) = \rho_s v_{0n}[Q_0 + (c_l - c_s)T_0]$, где Q_0 — удельная теплота плавления;
- на границе γ_l $\lambda_l(\partial\theta_l/\partial n) + \Lambda_l\theta_l = W_l(\xi_l) - \Lambda_l\theta_{l*}$;
- на границе γ $\lambda_s(\partial\theta_s/\partial n) + \Lambda_s\theta_s = W_s(\xi_s) - \Lambda_s\theta_{s*}$.

(Заметим, что в приведенном виде граничные условия допускают и другие механизмы теплоподвода и теплоотдачи, помимо рассмотренных здесь джоулева нагрева и теплоотдачи излучением.) Границы γ_s, γ_l заданы соотношениями (1.6), (1.7). Соответствующие граничные условия снесем на окружности и перепишем с указанием достоверного члена разложения по степеням малого угла α_1 :

$$\left(\theta_s + \frac{\partial\theta_s}{\partial r_1} R_1 K_s \alpha_1^3 \right) \Big|_{r_1=R_1} = O(\alpha_1^4); \quad (3.3)$$

$$\left(\theta_l + \frac{\partial\theta_l}{\partial r_1} R_1 K_s \alpha_1^3 \right) \Big|_{r_1=R_1} = O(\alpha_1^4); \quad (3.4)$$

$$\left[\lambda_l \frac{\partial\theta_l}{\partial r_1} - \lambda_s \frac{\partial\theta_s}{\partial r_1} - \left(\lambda_l \frac{\partial\theta_l}{\partial\alpha_1} - \lambda_s \frac{\partial\theta_s}{\partial\alpha_1} \right) \frac{3K_s}{R_1} \alpha_1^2 \right] \Big|_{r_1=R_1} = \rho_s v_0 \tilde{Q} \left[\sin\varphi - \alpha_1 \cos\varphi + \left(3K_s \cos\varphi - \frac{1}{2} \sin\varphi \right) \alpha_1^2 \right] + O(\alpha_1^3); \quad (3.5)$$

$$\left[\lambda_l \left(\frac{\partial\theta_l}{\partial r_2} - \frac{1}{R_2} \frac{\partial\theta_l}{\partial\alpha_2} 3K_l \alpha_2^2 \right) + \Lambda_l \theta_l \right] \Big|_{r_2=R_2} = W_l^{(0)} - \Lambda_l \theta_{l*} - W_l^{(1)} R_2 \alpha_2 + W_l^{(2)} R_2^2 \alpha_2^2 + O(\alpha_2^3). \quad (3.6)$$

В соотношении (3.5) $\tilde{Q} = Q_0 + (c_l - c_s)T_0$. Для границы γ единичный вектор нормали

$$\mathbf{n} = \cos(\varphi - \alpha_1) \mathbf{e}_{r_1} + \sin(\varphi - \alpha_1) \mathbf{e}_{\alpha_1},$$

и соответствующее граничное условие принимает вид

$$\left\{ \lambda_s \left[\frac{\partial\theta_s}{\partial r_1} \cos(\varphi - \alpha_1) + \frac{1}{r_1} \frac{\partial\theta_s}{\partial\alpha_1} \sin(\varphi - \alpha_1) \right] + \Lambda_s \theta_s \right\} \Big|_{r_1=r_{1*}(\alpha_1)} = W_s(\xi_s) - \Lambda_s \theta_{s*} \quad (3.7)$$

(см. также (1.4), (1.5)).

Локальные решения ищутся в виде

$$\theta_s(r_1, \alpha_1) = t_0(r_1) + t_1(r_1)\alpha_1 + \dots, \quad \theta_l(r_1, \alpha_1) = s_0(r_1) + s_1(r_1)\alpha_1 + s_2(r_1)\alpha_1^2 + \dots \quad (3.8)$$

Для нахождения двух дополнительных условий (помимо (2.14), (2.16)), необходимых для определения параметров φ , β , R_1 , R_2 , задающих неизвестные границы γ_s , γ_l , достаточно определить нулевые члены разложения уравнений (3.1), (3.2)

$$t_0''(r_1) + \frac{1}{r_1} t_0'(r_1) + \frac{2}{r_1^2} t_2(r_1) = P^{(s)} \left[t_0'(r_1) \sin \varphi - \frac{1}{r_1} t_1(r_1) \cos \varphi \right]; \quad (3.9)$$

$$s_0''(r_1) + \frac{1}{r_1} s_0'(r_1) + \frac{2}{r_1^2} s_2(r_1) = \frac{P^{(l)}}{v_0} \left[\frac{1}{r_1} \psi_1(r_1) s_0'(r_1) - \frac{1}{r_1} \psi_0'(r_1) s_1(r_1) \right]. \quad (3.10)$$

Граничные условия (3.3), (3.4) дают соотношения

$$t_0(R_1) = t_1(R_1) = t_2(R_1) = 0, \quad s_0(R_1) = s_1(R_1) = s_2(R_1) = 0. \quad (3.11)$$

Из выражений для нулевого и первого членов разложения граничного условия (3.5) получаем

$$\lambda_l s_0'(R_1) - \lambda_s t_0'(R_1) = \rho_s v_0 \tilde{Q} \sin \varphi; \quad (3.12)$$

$$\lambda_l s_1'(R_1) - \lambda_s t_1'(R_1) = -\rho_s v_0 \tilde{Q} \cos \varphi. \quad (3.13)$$

Для получения нулевого и первого членов разложения (3.6) по степеням переменной α_2 необходимо использовать геометрические соотношения $r_1(r_2, \alpha_2)$, $\alpha_1(r_2, \alpha_2)$ (см. (1.2)–(1.5)). Эти члены разложения с учетом (2.10), (2.11) приводят к равенствам

$$\lambda_l s_0'(R_1) \cos \beta = W_l^{(0)} - \Lambda_l \theta_{l*}; \quad (3.14)$$

$$\lambda_l s_0'(R_1) \sin \beta [(2\tilde{R} - P^{(l)} R_2 \tilde{\rho} \sin \varphi) \cos \beta - 1 - (\Lambda_l / \lambda_l) R_2] + \lambda_l s_1'(R_1) \tilde{R} \cos 2\beta = -R_2 W_l^{(1)}. \quad (3.15)$$

Из граничного условия (3.7) с учетом геометрических соотношений (1.4), (1.5) следуют равенства

$$\begin{aligned} & \lambda_s \left(\cos \varphi \frac{\partial \theta_s}{\partial r_1} + \sin \varphi \frac{1}{R_1} \frac{\partial \theta_s}{\partial \alpha_1} + \frac{\Lambda_s}{\lambda_s} \theta_s \right) \Big|_0 = W_s^{(0)} - \Lambda_s \theta_{s*}, \\ & \lambda_s \left[\cos \varphi \left(\frac{\partial^2 \theta_s}{\partial r_1^2} A_1 + \frac{\partial^2 \theta_s}{\partial r_1 \partial \alpha_1} - \frac{1}{R_1} \frac{\partial \theta_s}{\partial \alpha_1} \right) + \sin \varphi \left(-\frac{1}{R_1^2} \frac{\partial \theta_s}{\partial \alpha_1} A_1 + \frac{1}{R_1} \frac{\partial^2 \theta_s}{\partial r_1 \partial \alpha_1} A_1 + \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{1}{R_1} \frac{\partial^2 \theta_s}{\partial \alpha_1^2} + \frac{\partial \theta_s}{\partial r_1} \right) + \frac{\Lambda_s}{\lambda_s} \left(\frac{\partial \theta_s}{\partial r_1} A_1 + \frac{\partial \theta_s}{\partial \alpha_1} \right) \right] \Big|_0 = \frac{R_1}{\cos \varphi} W_s^{(1)}, \quad A_1 = -R_1 \operatorname{tg} \varphi, \end{aligned}$$

откуда, используя (3.8), (3.9), (3.11), имеем

$$\lambda_s t_0'(R_1) \cos \varphi = W_s^{(0)} - \Lambda_s \theta_{s*}; \quad (3.16)$$

$$\lambda_s \left\{ \left[\sin \varphi (2 - P^{(s)} R_1 \sin \varphi) - \frac{\Lambda_s}{\lambda_s} R_1 \operatorname{tg} \varphi \right] t_0'(R_1) + \frac{\cos 2\varphi}{\cos \varphi} t_1'(R_1) \right\} = \frac{R_1}{\cos \varphi} W_s^{(1)}. \quad (3.17)$$

Подставив в (3.12) выражения $t_0'(R_1)$, $s_0'(R_1)$ из (3.14), (3.16), получим первое из недостающих условий, необходимых для определения неизвестных границ:

$$\frac{W_l^{(0)} - \Lambda_l \theta_{l*}}{\cos \beta} - \frac{W_s^{(0)} - \Lambda_s \theta_{s*}}{\cos \varphi} = \rho_s v_0 \tilde{Q} \sin \varphi.$$

Второе условие получается после подстановки значений $\lambda_l s'_1(R_1)$, найденного из (3.14), (3.15) при $\cos 2\beta \neq 0$, и $\lambda_s t'_1(R_1)$, найденного из (3.16), (3.17) при $\cos 2\varphi \neq 0$, в выражение (3.13). Отсюда

$$R_2 = \frac{1}{P^{(l)}} \frac{N}{D}, \quad (3.18)$$

где $N = \tilde{R} \cos 2\beta [\rho_s v_0 \tilde{Q} \cos \varphi + (2 \sin \varphi / \cos 2\varphi)(W_s^{(0)} - \Lambda_s \theta_{s*})] + (W_l^{(0)} - \Lambda_l \theta_{l*})(\operatorname{tg} \beta - 2\tilde{R} \sin \beta)$;

$$D = \frac{W_l^{(1)}}{P^{(l)}} + \frac{\cos 2\beta}{\cos 2\varphi} \frac{W_s^{(1)}}{P^{(l)}} - (W_l^{(0)} - \Lambda_l \theta_{l*}) \operatorname{tg} \beta \left(\sin \beta \cos \varphi + \frac{\Lambda_l}{\lambda_l P^{(l)}} \right) + \\ + (W_s^{(0)} - \Lambda_s \theta_{s*}) \frac{\cos 2\beta}{\cos 2\varphi} \left(\sin^2 \varphi \frac{P^{(s)}}{P^{(l)}} + \frac{\Lambda_s}{\lambda_s P^{(l)}} \operatorname{tg} \varphi \right);$$

$1/P^{(l)} = \lambda_l / (\rho_l c_l v_0)$ — размерная величина, определяющая линейный масштаб. Например, для кремния $\rho_l \simeq 2,5 \text{ г/см}^3$, $c_l \simeq 0,91 \text{ Дж/(г} \cdot \text{К)}$, $\lambda_l \simeq 0,67 \text{ Дж/(см} \cdot \text{с} \cdot \text{К)}$, и при $v_0 = (2/3) \cdot 10^{-2} \text{ см/с}$ $1/P^{(l)} \simeq 50 \text{ см}$.

При $\cos 2\beta = 0$ значение R_2 получается из (3.14), (3.15), а при $\cos 2\varphi = 0$ радиус кривизны R_1 определяется из (3.16), (3.17). Заметим, что эти значения получаются и из общей формулы (3.18).

Выпишем главные члены разложения для температуры поликристалла на границе γ и температуры поверхности расплава (при $\varphi > 0$), следующие из (3.8), (3.14) и (3.16):

$$\theta_s|_{\gamma} = \theta_s|_{r_1^*(\alpha_1)} = -\frac{W_s^{(0)} - \Lambda_s \theta_{s*}}{\lambda_s} \xi_s \operatorname{tg} \varphi + O(\xi_s^2), \\ \theta_l|_{\gamma_l} = \theta_l|_{r_2=R_2} = \frac{W_l^{(0)} - \Lambda_l \theta_{l*}}{\lambda_l} \xi_l \operatorname{tg} \beta + O(\xi_l^2).$$

Заметим, что требуемые отрицательные значения θ_s на границе γ получаются лишь при условии

$$W_s^{(0)} - \Lambda_s \theta_{s*} > 0, \quad (3.19)$$

когда интенсивность тепловыделения на поверхности поликристалла превышает теплоотдачу с поверхности (в главном члене разложения).

4. Полученные результаты перепишем, вводя для энергетических величин безразмерные параметры

$$q_s^{(0)} = \frac{W_s^{(0)} - \Lambda_s \theta_{s*}}{\rho_s v_0 \tilde{Q}}, \quad q_l^{(0)} = \frac{W_l^{(0)} - \Lambda_l \theta_{l*}}{\rho_s v_0 \tilde{Q}}, \quad q_l^{(1)} = \frac{W_l^{(1)}}{P^{(l)} \rho_s v_0 \tilde{Q}}, \quad q_s^{(1)} = \frac{W_s^{(1)}}{P^{(l)} \rho_s v_0 \tilde{Q}}.$$

Безразмерные величины $q_l^{(0)}$, $q_s^{(0)}$ характеризуют интенсивность тепловыделения за вычетом теплоотдачи соответственно на поверхности расплава и твердой поверхности вблизи точки O . Параметры $q_l^{(1)}$, $q_s^{(1)}$ определяют скорость изменения тепловыделения по мере удаления от тройной точки в сторону расплава или поликристалла.

Итак, имеем следующие результаты:

$$\operatorname{tg} \beta = \tilde{\rho} \operatorname{tg} \varphi; \quad (4.1)$$

$$\frac{q_l^{(0)}}{\cos \beta} - \frac{q_s^{(0)}}{\cos \varphi} = \sin \varphi, \quad (4.2)$$

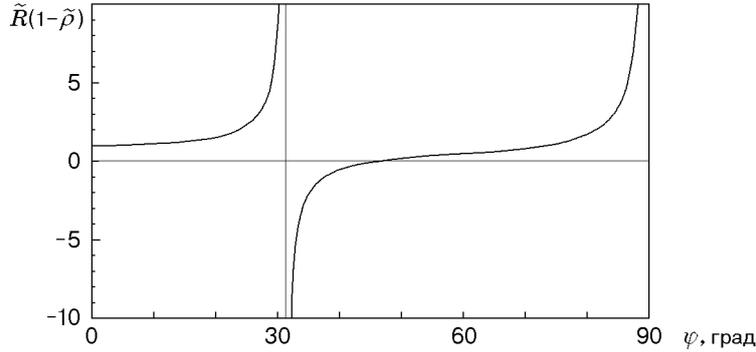


Рис. 2

связывающие углы φ , β с энергетическими параметрами $q_l^{(0)}$, $q_s^{(0)}$. Из (3.19) и (4.2) следует, что для существования стационарного процесса при $\varphi > 0$ необходимо выполнение условий

$$0 < q_s^{(0)} < q_l^{(0)}.$$

Используя (4.1), выражение (4.2) можно представить в виде соотношения, определяющего необходимое значение $q_l^{(0)}$ при заданных $q_s^{(0)}$ и φ :

$$q_l^{(0)} = (1 + \tilde{\rho}^2 \operatorname{tg}^2 \varphi)^{-1/2} [q_s^{(0)} / \cos \varphi + \sin \varphi].$$

Следующие соотношения определяют радиусы кривизны межфазной границы R_1 и свободной границы расплава R_2 , т. е. форму начального участка пленки расплава:

$$\tilde{R} = \frac{R_2}{R_1} = \frac{1}{1 - \tilde{\rho}} \frac{\cos 2\beta}{\cos(\varphi + 2\beta)} \frac{\cos \varphi}{\cos \beta}; \quad (4.3)$$

$$R_2 = \frac{1}{P^{(l)}} \frac{\tilde{R} \cos 2\beta (\cos \varphi + q_s^{(0)} 2 \sin \varphi / \cos 2\varphi) + q_l^{(0)} (\operatorname{tg} \beta - 2\tilde{R} \sin \beta)}{q_{ls}^{(1)} - q_l^{(0)} \operatorname{tg} \beta (\sin \beta \cos \varphi + \chi_l) + q_s^{(0)} \tilde{P} (\sin^2 \varphi + \chi_s \operatorname{tg} \varphi) \cos 2\beta / \cos 2\varphi}, \quad (4.4)$$

где $\chi_l = \Lambda_l / (\lambda_l P^{(l)})$, $\chi_s = \Lambda_s / (\lambda_s P^{(s)})$, $\tilde{P} = P^{(s)} / P^{(l)}$ — безразмерные параметры; $q_{ls}^{(1)} = q_l^{(1)} + q_s^{(1)} \cos 2\beta / \cos 2\varphi$.

Зависимость $\tilde{R}(\varphi)$, задаваемая соотношениями (4.3), (4.1) для фиксированного значения $\tilde{\rho} = 0,91$, соответствующего кремнию, изображена на рис. 2. Видно, что в интервале $0 < \varphi < \pi/2$ существует отрезок $\varphi_1 < \varphi < \varphi_2$, где \tilde{R} принимает отрицательные значения. (Концы отрезка определяются условиями $\cos(\varphi + 2\beta) = 0$ (откуда $\operatorname{tg} \varphi_1 = (2\tilde{\rho} + \tilde{\rho}^2)^{-1/2}$) и $\cos 2\beta = 0$ ($\operatorname{tg} \varphi_2 = 1/\tilde{\rho}$).) Отрицательным значениям \tilde{R} соответствует конфигурация, отличная от изображенной на рис. 1, б, так как центры кривизн O_1 и O_2 оказываются по разные стороны от границы γ_s . (Данное утверждение основано на независимом решении, построенном на измененной конфигурации. Процесс решения аналогичен приведенному.) Для процесса бестигельного зонного переплава представляет интерес случай, когда свободная поверхность расплава имеет границу, аналогичную представленной на рис. 1, б, т. е. когда $R_2 > 0$. (Как следует из (4.4), при любых φ , β , $q_s^{(0)}$, $q_l^{(0)}$, удовлетворяющих условиям (4.1), (4.2), с помощью свободных параметров $q_l^{(1)}$, $q_s^{(1)}$ можно регулировать величину R_2 и обеспечивать ее положительность.) В этом случае отрицательным \tilde{R} соответствует геометрия, когда именно центр O_1 находится по другую сторону от границы γ_s , т. е. вне поликристалла. Таким образом, как следует из зависимости $\tilde{R}(\varphi)$, начальный участок

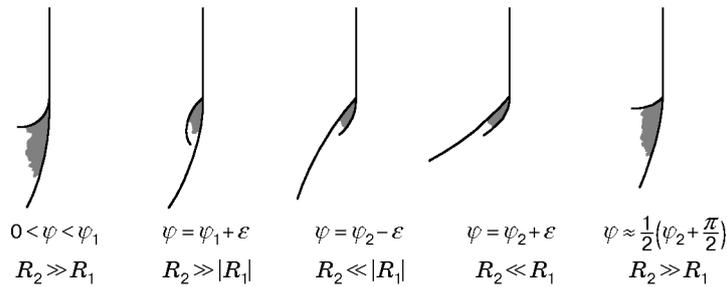


Рис. 3

пленки может принимать формы, изображенные на рис. 3. (Здесь положительная величина $\varepsilon \ll 1$.) Переход от одной формы к другой происходит при критических значениях угла φ , т. е. при значениях φ_1 и φ_2 , определенных выше.

Следует отметить, что только в малой окрестности значения $\varphi = \varphi_2$ радиус $R_2 \ll |R_1|$. Для процесса бестигельного зонного переплава это условие, очевидно, необходимо для устойчивости начального участка пленки, которая может быть обеспечена за счет сил поверхностного натяжения. При $\varphi = \varphi_2$ ($\cos 2\beta = 0$) из (4.4) и (4.3) имеем

$$R_{2*} = \frac{1}{P^{(l)}} \frac{q_l^{(0)}}{q_l^{(1)} - q_l^{(0)} \left((\sqrt{2}/2) \tilde{\rho} / (1 + \tilde{\rho}^2)^{-1/2} + \chi l \right)}.$$

Следовательно, для получения $R_{2*} \ll 1/P^{(l)}$ необходимо, чтобы $q_l^{(1)} \gg q_l^{(0)}$, т. е. чтобы плотность теплового потока на поверхности расплава достаточно быстро росла по мере удаления от тройной точки.

-
1. **Muhlbauer A., Muiznieks A., Virbulis J., et al.** Interface shape, heat transfer and fluid flow in the floating zone growth of large silicon crystals with the needle-eye technique // J. Crystal Growth. 1995. V. 151. P. 66–79.

*Поступила в редакцию 30/VI 1999 г.,
в окончательном варианте — 4/VIII 1999 г.*
