

**Numerische Simulation der Phasengrenzen und  
Schmelzenströmung bei der Züchtung von  
Siliziumeinkristallen mit dem Floating-Zone Verfahren**

Lehrstuhl für Elektrodynamik und Kontinuumsmechanik  
Fakultät für Physik und Mathematik  
Universität Lettland

Dissertation

von

Jānis Virbulis

3848 - A



## Danksagung

Die vorliegende Arbeit ist am Institut für Elektrowärme der Universität Hannover entstanden.

Ich bedanke mich beim Leiter meiner Doktorarbeit Dr. Jakovics und beim Leiter des Instituts für Elektrowärme, Universität Hannover, Prof. Mühlbauer, die mir die Durchführung dieser interessanten Arbeit ermöglichten. Außerdem möchte ich Dr. Jakovics für die wertvollen Anregungen und Prof. Mühlbauer für die Unterstützung aufgrund seiner reichen Erfahrungen und Kenntnisse auf dem Gebiet der FZ-Kristallzüchtung danken.

Herrn Dr. Muiznieks danke ich für zahlreiche Diskussionen insbesondere über die Modellbildung und verwendete numerische Methoden.

Für die Bereitstellung experimenteller Daten danke ich Herrn Dr. Riemann und Frau Dr. Lüdge vom Institut für Kristallzüchtung, Berlin, und Herrn Hensel von der Wacker Siltronic AG, Burghausen.

Weiterhin bedanke ich mich bei den Kollegen in Hannover und Riga für die angenehme Zusammenarbeit.

Schließlich gilt mein Dank meiner Frau Ruta Virbule für das entgegengebrachte Verständnis und ihre Unterstützung während der letzten Jahre.

---

**Inhaltsverzeichnis**

1. Einleitung.....	1
2. Literaturübersicht.....	4
3. Mathematische Modelle und Berechnungsmethoden.....	7
3.1 Elektromagnetisches Feld.....	8
3.1.1 Axialsymmetrisches Modell und Methode der Boundary-Elemente.....	8
3.1.2 Radiale Schlitze.....	14
3.1.3 Testberechnungen.....	16
3.2 Modell des Temperaturfeldes in Kristallen.....	19
3.3 Form der Phasengrenzen.....	22
3.3.1 Thermisch bedingte Phasengrenzen.....	22
3.3.2 Freie Schmelzenoberfläche.....	25
3.4 Schmelzenströmung und Temperaturfeld in der Schmelze.....	27
3.4.1 Grundgleichungen.....	27
3.4.2 Randbedingungen.....	29
3.4.3 Methode der Finiten Elemente.....	33
3.4.4 Testberechnungen.....	41
3.5 Kopplung aller einzelnen Modelle.....	46
4. Ergebnisse und Diskussion.....	51
4.1 Vergleich mit dem Experiment.....	53
4.2 Analyse der Phasengrenzen und analytische Modelle.....	57
4.2.1 Abschmelzfront.....	57
4.2.2 Freie Schmelzenoberfläche.....	60
4.2.3 Temperaturfeld im Kristall.....	62
4.2.4 Kristallisationsfront.....	64
4.2.5 Globales analytisches Modell.....	68
4.3 Form der Phasengrenzen: Parameterstudien.....	72
4.4 Schmelzenströmung.....	83
4.4.1 Einfluß auf die Form der Phasengrenzen.....	87
4.4.2 Zusammenhang zwischen dem instationären Geschwindigkeitsfeld und der Widerstandsverteilung im gezüchteten Kristall.....	88

---

4.4.3 Parameterstudien.....	92
4.4.4 Stabilität der Strömung .....	99
4.4.5 Ungleichmäßige Rotation des Kristalls.....	105
5. Zusammenfassung und Ausblick .....	115
6. Literatur.....	118

## Formelzeichen

$A$  vektorielle Größe

$\hat{A}$  dimensionlose Größe

Größe	Einheit	Bezeichnung
$A$	Vs/m	Vektorpotential
$B$	Vs/m <sup>2</sup>	magnetische Induktion
$c$	J/(kgK)	Wärmekapazität
$D$	m <sup>2</sup> /s	Diffusionskoeffizient
$E$	V/m	elektrische Feldstärke
$E$	-	<i>Eckman-Zahl</i>
$f$	Hz	Frequenz
$f$	N/m <sup>3</sup>	Volumenkraftdichte
$g$	m/s <sup>2</sup>	Erdbeschleunigung
$i$	-	Imaginäreinheit
$I_0$	A	Induktorstrom
$j$	A/m	elektrischer Strombelag
$l$	m	Länge
$n$	-	Normaleneinheitsvektor
$n$	-	Normalenrichtung
$p$	W/m <sup>2</sup>	Flächenleistungsdichte
$Pe$	-	<i>Peclet-Zahl</i>
$q$	W/m <sup>2</sup>	Wärmestromdichte
$r$	m	Koordinate
$R_0$	m	Kristallradius - typische Abmessung der Anlage
$Re$	-	<i>Reynolds-Zahl</i>
$s$	A/m <sup>2</sup>	elektrische Stromdichte
Si		Silizium
$t$	s	Zeit
$T$	K	Temperatur
$U$	V	elektrische Spannung
$u$	m/s	Geschwindigkeit
$V$	V	Skalarpotential des elektrischen Feldes
$W$	1/s	Rotationsgeschwindigkeit
$x$	m	Koordinate
$z$	m	Koordinate
$\beta$	K <sup>-1</sup>	thermischer Ausdehnungskoeffizient
$\delta$	m	elektromagnetisches Eindringmaß
$\delta_D$	m	Dicke des Diffusionsgrenzschichtes
$\varepsilon$	-	Emissivität
$\gamma$	N/m	Oberflächenspannungskoeffizient
$\varphi$	-	Winkel, Winkelkoordinate

---

$\lambda$	W/(mK)	Wärmeleitfähigkeit
$\mu$	-	relative magnetische Permeabilität
$\mu_0$	Vs/(Am)	magnetische Feldkonstante
$\nu$	m <sup>2</sup> /s	kinematische Viskosität
$\rho$	kg/m <sup>3</sup>	Dichte
$\sigma$	1/( $\Omega$ m)	elektrische Leitfähigkeit
$\tau$	-	tangentiale Richtung
$\omega$	1/s	Kreisfrequenz
$\omega$	-	Relaxationsfaktor
$\zeta$	-	Rotor der Geschwindigkeit
$\psi$	-	Stromfunktion

## 1. Einleitung

Siliziumeinkristalle sind der "Rohstoff" für die Mikroelektronik. Es gibt zwei bedeutende Methoden, um sie aus der Schmelze zu züchten - die Czochralski-Methode oder Tiegelziehen (CZ) und die Floating-Zone-Methode oder Zonenziehen (FZ). Mit der CZ Methode wird Sauerstoff- und dotierstoffreiches Material mit kleinem elektrischen Widerstand erzeugt. Mit der FZ Methode kann man hochreines Silizium mit wenig Dotierstoffen und entsprechend hohem elektrischen Widerstand ( $>100000 \text{ Ohm-cm}$ ) herstellen. CZ-Silizium wird hauptsächlich für die Produktion von IC's (integrierten Schaltkreisen) verwendet, dagegen wird FZ-Material für Hochspannungs- und Hochleistungskomponenten wie Dioden, Thyristoren und Leistungstransistoren eingesetzt. Der Anteil des FZ-Siliziums liegt bei etwa 5-10%, der Rest wird mit der CZ-Methode erzeugt.

Die FZ-Methode ist relativ neu, deren Grundidee ist von *Theuerer* 1952 patentiert worden [1]. Am Anfang wurden Kristalle mit einem Durchmesser kleiner als 15 mm gezogen. Im Laufe der Jahre sind Durchmesser von 100 und 150 mm zum Standard geworden und sogar die FZ-Züchtung von 200 mm Kristallen ist technisch möglich. Die Kristalllänge ist von der Anlagengeometrie und der Länge des Polykristalls abhängig und kann mehr als 1 m betragen.

Die schematische Abbildung einer industriellen FZ-Anlage ist in Bild 1.1 dargestellt. Die große Höhe ist durch die Länge der Kristalle und Positionierung des Antriebs bedingt.

Der FZ-Prozess ist komplizierter und schwer realisierbar im Vergleich zum CZ-Prozess. Sehr viele Parameter wie Form, Position und Leistung des Induktors, Zieh- und Vorschubgeschwindigkeit, Rotation des Kristalls und Vorratsstabs haben starken Einfluß auf den Prozessverlauf und die Kristallqualität. Bei der Entwicklung müssen alle diese Parameter gleichzeitig optimiert werden, was die Entwicklung sehr zeitaufwendig macht.

Die numerische Simulation ist eine wichtige Hilfe für die Prozessuntersuchung. Die Messung der Strömungsgeschwindigkeit in der Si-Schmelze ist schwer realisierbar. Auch die Temperaturmessung ist wegen der spezifischen Form der Schmelzenzone und Position des Induktors kompliziert. Die Form der Kristallisationsfront, die ein wichtiger Parameter ist, kann man experimentell auch nur indirekt durch die Dotierstoffverteilung in gezogenen Kristallen bestimmen.

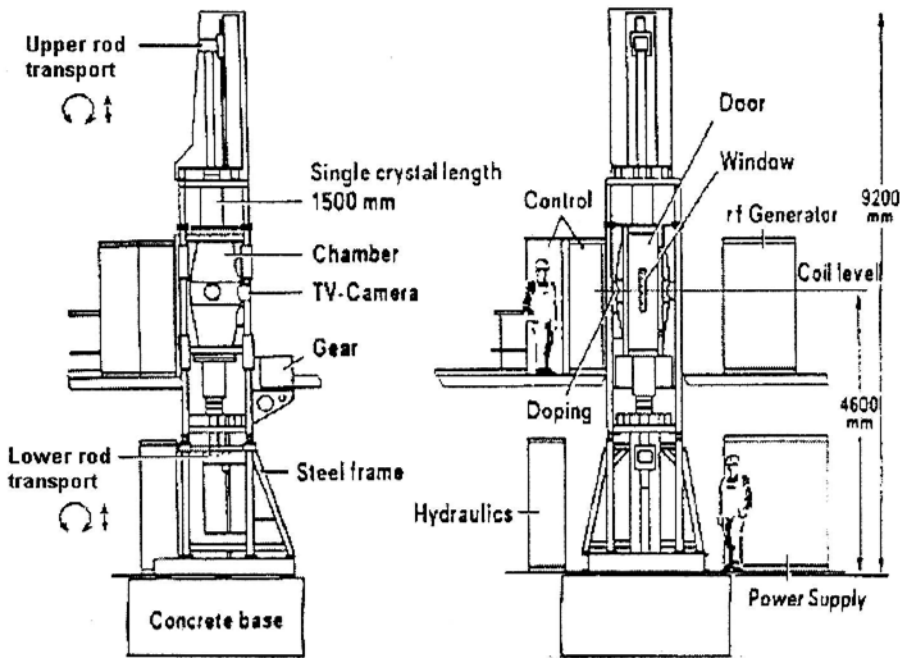


Bild 1.1: Typische FZ Produktionsanlage (nach [2])

Die empirische Entwicklung der Induktoren ist oft nur in sehr kleinen Schritten möglich, da kleine Formänderungen des Induktors eine wesentliche Änderung des Prozesses verursachen und gleich ein anderer Parameter zusätzlich geändert werden muß, um den Prozess zu realisieren.

Ziel dieser Arbeit ist, ein globales mathematisches Modell des FZ-Prozesses zu entwickeln. Das Modell muß mit Hilfe geeigneter numerischer Verfahren in ein Berechnungsprogramm umgesetzt werden. Die numerische Simulation soll danach den Einfluß der wichtigsten Parameter und deren Abhängigkeit voneinander zeigen

---

und dadurch den Prozess besser verständlich machen. Anschließend können mit Hilfe der Simulation die jeweiligen Prozesse optimiert und neue Prozesse entwickelt werden.

Die Arbeit ist folgendermaßen gegliedert:

Am Anfang wird eine Literaturübersicht der Arbeiten auf dem Gebiet der numerischen Simulation des FZ-Prozesses vorgestellt.

Im Kapitel 3 sind die mathematischen Modelle, die verwendeten Vereinfachungen, die Grundgleichungen und die Randbedingungen für das elektromagnetische Feld, für die Wärmeübertragung und für die Schmelzenströmung beschrieben. Es werden auch die numerischen Berechnungsmethoden sowie Testberechnungen für einzelne Modelle gezeigt. Anschließend wird die Kopplung der einzelnen Modelle dargestellt.

Im Kapitel 4 werden die Ergebnisse vorgestellt und diskutiert. Außer der numerischen Berechnungen der Form der Phasengrenzen und der Schmelzenströmung werden auch einzelne Phasengrenzen analytisch oder mit vereinfachten numerischen Modellen beschrieben und analysiert.

Die Arbeit endet mit einer Zusammenfassung und einem Ausblick.

## 2. Literaturübersicht

Die Grundlagen des FZ-Verfahrens für die Züchtung von Siliziumeinkristalle und der Stand der Technik bis 1980 sind ausführlich von *Keller* und *Mühlbauer* in [2] beschrieben. Die Grundlagen und Literaturüberblick über FZ bis 1992 sind in [3] zusammengefaßt.

Die Arbeiten auf dem Gebiet der numerischen Simulation des FZ-Prozesses kann man in zwei größere Richtungen unterteilen. Die erste Richtung umfaßt die Modellierung der klassischen FZ-Konfiguration, die nur für die Züchtung von Kristallen mit kleinem Durchmesser (bis etwa 50 mm) geeignet ist (Bild 2.1-a). Diese Konfiguration wird auch noch heute verwendet, allerdings für andere (nicht Si) Kristalle. Auf diesem Gebiet sind sehr viele Arbeiten gemacht worden, auch globale Modelle sind beschrieben. Der zweite Teil ist die Modellierung der FZ-Züchtung von Si-Kristallen mit großem Durchmesser. (Bild 2.1-b). Auf diesem Gebiet sind bisher meistens nur einzelne Aspekte betrachtet und berechnet worden.

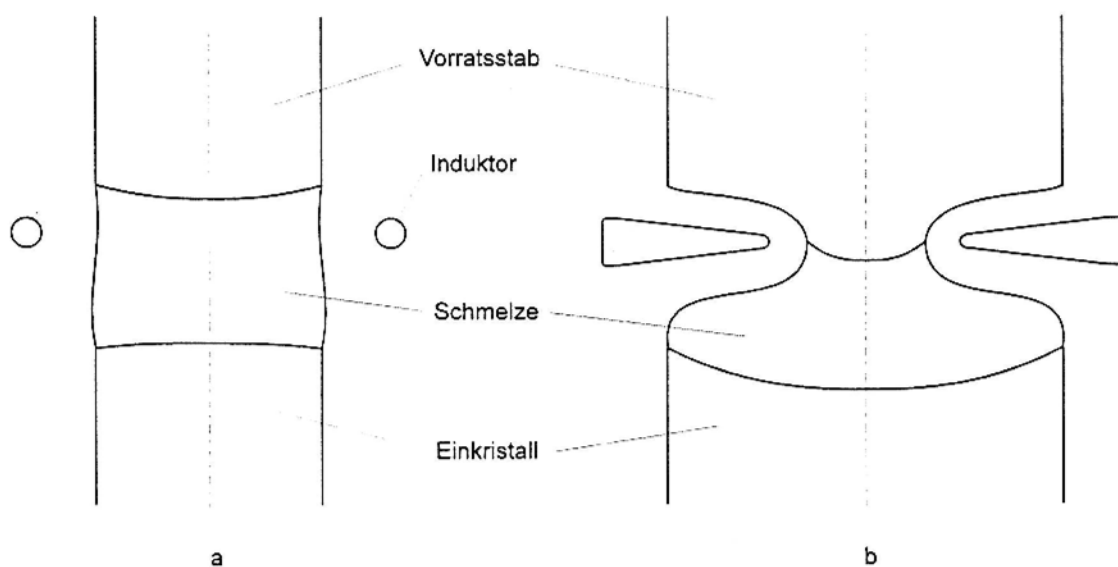


Bild 2.1: Schematische Darstellung des FZ-Prozesses für kleine Kristalldurchmesser - klassisches FZ-Verfahren - (a) und für größere Kristalldurchmesser - needle-eye Verfahren - (b).

### Klassisches FZ-Verfahren

*Coriell* und *Cordes* [4] haben die Stabilität und Form der freien Oberfläche untersucht. Die maximale Höhe der freien Oberfläche wird bei Ziehrichtung nach unten erreicht und beträgt etwa 15 mm. *Riahi* und *Walker* [5] haben gezeigt, daß unter Einfluß des elektromagnetischen (EM) Feldes die maximale Höhe der flüssigen Zone größer werden kann.

*Kobayashi* hat mit Hilfe eines vereinfachten Modells die notwendige Leistung für die Erzeugung der flüssigen Zone berechnet und die Form der Zone abhängig von Leistung und Materialeigenschaften studiert [6]. *Gupta* et al. haben die Induktorspannung analytisch berechnet und auf die Begrenzung der Frequenzauswahl bei der FZ-Züchtung hingewiesen [7].

*Lan* und *Kou* haben die Phasengrenzen und Schmelzenströmung in [8] berechnet. Der Einfluß der Kristallrotation auf das Temperaturfeld, auf die Form der Phasengrenzen und auf die Schmelzenströmung ist in [9],[10] untersucht worden. Die Dotierstoffverteilung in FZ-Konfigurationen ohne Schwerkraft wurde von *Lan* und *Kou* in [11] berechnet. Der Einfluß der Schwerkraft auf die FZ-Kristallzüchtung wurde von *Lan* et al. in [12] und von *Xiong* und *Hu* in [13] untersucht.

Die Schmelzenströmung und Form der freien Oberfläche bei starkem axialen Magnetfeld wurde von *Lie* et al. berechnet [14].

### Needle-eye Verfahren

Für die Berechnung des klassischen FZ-Verfahrens konnte man die Form der Schmelzzone annähernd als zylindrisch annehmen und die Wärmequellen oder den Wärmefluß vom der Heizer an der Oberfläche als Funktion angeben. Beim *needle-eye* Verfahren ist die Form der Schmelzzone komplizierter und die Wärmequellen sind stark von der Induktorform und der Form der Phasengrenzen abhängig.

Der Einfluß des Spaltes des einwindigen Induktors auf die Verteilung des EM Feldes wurde von *Mühlbauer* et al. in [15] und [16] durch dreidimensionale (3D) Berechnungen untersucht. In allen anderen Berechnungen für das klassische und *needle-eye* Verfahren wird diese Unsymmetrie nicht berücksichtigt.

*Lie* et al. haben die Schmelzenströmung bei starkem axialen Magnetfeld berechnet [17]. Die Stromverteilung an der freien Oberfläche und die elektromagnetisch angetriebene Konvektion bei vorgegebener Form der Phasengrenzen wurde von *Mühlbauer* et al. in [18] berechnet. Die Form der fest/flüssig Grenzen, die freie Schmelzenoberfläche, das Temperaturfeld und die thermischen Spannungen haben *Riemann* et al. in [19] berechnet.

In allen oben genannten Veröffentlichungen wurden nur die stationäre Schmelzenströmung berücksichtigt.

### 3. Mathematische Modelle und Berechnungsmethoden

Bei der Modellierung werden das elektromagnetische Feld, das Temperaturfeld und die Schmelzenströmung berücksichtigt. Die Form der Phasengrenzen (freie Schmelzenoberfläche, Abschmelz- und Erstarrungsfront) wird unter Wechselwirkung der genannten Felder bestimmt. Die Anlage ist schematisch im Bild 3.1 dargestellt.

Es wird vorausgesetzt, daß das EM Feld axialsymmetrisch ist, obwohl der Induktor einen schmalen Schlitz zwischen den Zuleitungen hat. Der Einfluß des Schlitzes wurde in [20], [15] untersucht. Es wurde gezeigt, daß der Einfluß nicht besonders groß ist und wie man eine symmetrischere Feldverteilung erreichen kann.

Das Temperaturfeld wird als axialsymmetrisch und stationär (zeitunabhängig) angenommen. Es werden sowohl die Wärmeleitung in den Kristallen und die Abstrahlung an der äußeren Oberflächen der Kristalle als auch der vertikale, mit dem Vorschub verbundene, Wärmetransport berücksichtigt. Als Sonderfall wird das Modell für den Reflektor beschrieben.

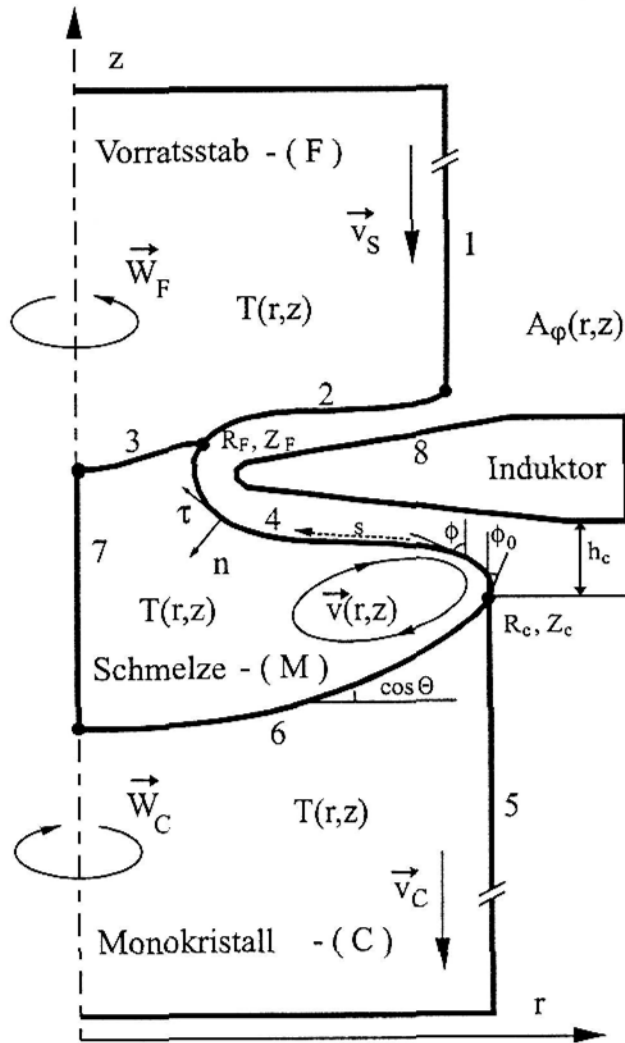


Bild 3.1: Schematische Darstellung des FZ-Prozesses

Die Schmelzenströmung wird als axialsymmetrisch, laminar und zeitabhängig angenommen. Das instationäre Temperaturfeld in der Schmelze wird durch die Strömung beeinflusst.

Die Phasengrenzen werden als Ergebnis der Wechselwirkung der berechneten Felder bestimmt. Die freie Schmelzenoberfläche wird unter Berücksichtigung der EM-, Oberflächenspannungs- und Schwerkraft berechnet. Die Abschmelz- und Erstarrungsfront wird ausgehend vom thermischen Gleichgewicht bestimmt.

Die Kopplung einzelner Modelle wird iterativ durchgeführt.

Die Boundary-Elemente-Methode, die nur für die Berechnung des EM-Feldes verwendet wird, wird gleich im Unterkapitel 3.1 beschrieben. Die Finite-Elemente-Methode wird separat im Unterkapitel 3.4.3 beschrieben.

## 3.1 Elektromagnetisches Feld

### 3.1.1 Axialsymmetrisches Modell und Methode der Boundary-Elemente

Bei der Entwicklung des Modells wird von den *Maxwellschen* Gleichungen ausgegangen [21], [22], [23].

Folgende Annahmen werden getroffen:

1) Da die Abmessungen der Anlage viel kleiner als die Wellenlänge des elektromagnetischen Feldes  $c/\omega$  (100 m bei  $f = 3$  MHz) sind, können die Verschiebungsströme vernachlässigt werden - es wird die quasistationäre Näherung angewandt.

2) Alle Bestandteile der Anlage sind paramagnetisch, d.h.  $\mu=1$ .

3) Da sich die elektrischen Leiter in Bewegung befinden (Schmelzenströmung, Kristallrotation), muß man vom verallgemeinerten *Ohm'schen* Gesetz  $\mathbf{s} = \sigma(\mathbf{E} + \mathbf{u} \times \mathbf{B})$  ausgehen. Bei so hohen Frequenzen kann aber die Rückwirkung der

Schmelzenströmung auf das EM Feld ebenfalls vernachlässigt werden ( $\mathbf{v} \times \mathbf{B} \ll \mathbf{E}$ ) und das *Ohm'sche* Gesetz lautet

$$\mathbf{s} = \sigma \mathbf{E}. \quad (3.1)$$

4) Alle in der Anlage fließenden Ströme sind sinusförmig und können deswegen in komplexer Schreibweise ausgedrückt werden

$$s(t) = s_A e^{i\omega t}, \quad (3.2)$$

wobei  $s_A$  der Betrag des Stromes ist.

Da die FZ-Anlage mit einer Stromfrequenz von einigen Megahertz betrieben wird und der Kupferinduktor und das Silizium gute elektrische Leitfähigkeit aufweisen, ist die Eindringtiefe des EM Feldes

$$\delta = \sqrt{\frac{1}{\pi \mu_0 \sigma f}} \quad (3.3)$$

relativ klein im Vergleich sowohl zu den Abmessungen des Systems als auch zu den Krümmungsradien der Oberflächen. Bei einer typischen Frequenz  $f = 3$  MHz ist die Eindringtiefe im Induktor  $\delta_{\text{Cu}} = 0.041$  mm, im flüssigen Silizium  $\delta_{\text{Si,flüssig}} = 0.26$  mm und im kristallinen Silizium  $\delta_{\text{Si,fest}} = 1.30$  mm. Der Kristallradius  $R_0$ , der auch als charakteristische Abmessung der FZ-Anlage benutzt wird, beträgt etwa 50 mm und ist viel größer. Bei der Berechnung der elektromagnetischen Felder wird oft die dimensionslose Feldfrequenz  $\hat{\omega} = \mu_0 \mu \sigma \omega R_0^2$ , die auch das Verhältnis der Eindringtiefe zu Abmessung charakterisiert, benutzt. In der Tab. 1 sind die Werte der erwähnten Größen zusammengefaßt.

Tab. 1: Elektrische Leitfähigkeit  $\sigma$ , Eindringtiefe  $\delta$ , Eindringtiefe zu Abmessung  $\delta/R_0$  und dimensionslose Feldfrequenz  $\hat{\omega}$  für leitende Elemente der FZ-Anlage bei  $R_0 = 50$  mm und  $f = 3$  MHz.

Material	$\sigma$ , [1/ $\Omega \cdot \text{m}$ ]	$\delta$ , [mm]	$\delta/R_0$	$\hat{\omega}$
Kupfer	$5 \cdot 10^7$	0.041	$8 \cdot 10^{-4}$	$3 \cdot 10^6$
flüssiges Silizium	$1.2 \cdot 10^6$	0.26	$5 \cdot 10^{-3}$	$7 \cdot 10^4$
festes Silizium	$5 \cdot 10^4$	1.3	$3 \cdot 10^{-2}$	$3 \cdot 10^3$

Die ausgeprägte Stromverdrängung bewirkt, daß die Wirbelströme an der Oberfläche des Induktors und des Siliziums konzentriert sind und im Inneren der Leiter die Stromdichte  $\mathbf{s}$  und die magnetische Induktion  $\mathbf{B}$  verschwinden. Es erlaubt näherungsweise anzunehmen, daß die Ströme innerhalb einer dünnen Schicht tangential zur Oberfläche fließen und deren Intensität durch die Oberflächenstromdichte (Strombelag)  $j$  charakterisiert werden kann. Aus den Bedingungen für die Induktion  $\mathbf{B}$  auf der Gebietsgrenze [21] folgt, daß an der Oberflächen des Leiters

$$B_n = 0,$$

$$B_r = \mu_0 j. \quad (3.4)$$

Die Stromverteilung ist von der Frequenz praktisch unabhängig. Die eingebrachte Oberflächenleistung ist von der Frequenz jedoch wesentlich abhängig und wird folgendermaßen berechnet

$$p = j^2 \frac{1}{\sigma \delta}. \quad (3.5)$$

Aus den Gleichungen für das Vektorpotential  $\mathbf{A}$  und das skalare Potential  $V$

$$\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A},$$

$$\mathbf{E} = -\text{grad } V - i\omega \mathbf{A} \quad (3.6)$$

folgt die Hauptgleichung des verwendeten Modells

$$\Delta \mathbf{A} - i\mu_0 \sigma \omega \mathbf{A} = 0 \quad (3.7)$$

mit der Zusatzbedingung

$$\text{div } \mathbf{A} + \mu_0 \sigma V = 0.$$

Da die Leiter feldfrei sind, muß die Gleichung (3.7) nur im Raum außerhalb der leitenden Gebiete gelöst werden und nimmt damit folgende endgültige Form an:

$$\Delta \mathbf{A} = 0. \quad (3.8)$$

## Randbedingungen

Das Vektorpotential  $\mathbf{A}$  muß in feldfreien Raumgebieten konstant sein und kann durch die Normierung im Silizium gleich 0 gewählt werden. Da die Induktion außerhalb des Siliziums größer als im Skinlayer ist, ist auch die Änderung des Vektorpotentials außerhalb des Siliziums größer als im Leiter. Mit Berücksichtigung  $\delta \ll R_0$  kann man

$$\mathbf{A} = 0 \quad (3.9)$$

an der Siliziumoberfläche setzen.

Im Induktor mit angelegter Spannung  $U$  entsteht der Gradient des skalaren Potentials  $gradV$ . Durch Einsetzen von (3.1) und des *Biot-Savart*-Gesetzes

$$\mathbf{A} = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\mathbf{s}}{r} dv$$

in (3.6) wird sichtbar, daß bei hohen Frequenzen ( $\omega \rightarrow \infty$ ) der Term  $i\omega\mathbf{A}$  in Gleichung (3.6) viel größer ist als der Term  $\mathbf{E}$ . Daraus folgt die Randbedingung für das Vektorpotential  $\mathbf{A}$  an der Induktoroberfläche

$$\mathbf{A} = \frac{i gradV}{\omega}. \quad (3.10)$$

Man sieht, daß die Phasenverschiebung zwischen dem Strom und der Spannung im Induktor  $90^\circ$  ist. Außerdem ist eine weitere Vereinfachung bei sehr kleiner Eindringtiefe dadurch gegeben, daß die im Einsatz fließenden Ströme eine Phasenverschiebung von  $180^\circ$  zum Induktorstrom aufweisen [24]. Weist der Induktorstrom in der komplexen Darstellungsweise des Wechselstromes nur einen realen Anteil auf, dann hat auch der im Silizium induzierte Oberflächenstrom nur einen realen Anteil, der zu jedem Zeitpunkt dem Induktorstrom entgegengerichtet ist. Jedenfalls streben die auftretenden Abweichungen von den Phasenlagen  $0^\circ$  oder  $180^\circ$  bei  $\omega \rightarrow \infty$  zu Null. Selbstverständlich, ist die Frequenz in FZ-System nicht unendlich hoch. In [25] wird jedoch gezeigt, daß bei dimensionsloser Frequenz  $\hat{\omega} > 10^4$  der Unterschied der Stromverteilung im Vergleich zum Grenzfall  $\omega = \infty$  kleiner als 4% ist. Das haben auch die numerischen Experimente unter Berücksichtigung des imaginären Teiles der Feldgrößen bestätigt (siehe Abschnitt 3.1.3).

Im axialsymmetrischen Fall hat das Vektorpotential  $A$  und der Strombelag  $j$  nur eine azimutale Raumkomponente  $A_\varphi$  und  $j_\varphi$ . Es wird angenommen, daß der Schlitz im Induktor zwischen den Zuleitungen sehr schmal ist und dort kein Potentialabfall stattfindet. Dann hat der Gradient des skalaren Potentials auch nur eine  $\varphi$ -Komponente und kann durch die Induktorspannung

$$U = 2\pi r \text{ grad} V \quad (3.11)$$

abhängig vom Radius ausgedrückt werden.

Als Bezugsgröße für die EM Größen wird der Gesamtstrom im Induktor  $I_0$  verwendet. Dementsprechend werden der Strombelag  $j$  auf  $I_0/R_0$  und das Vektorpotential  $A$  auf  $\mu_0 I_0/\pi$  bezogen. Damit wird das Feldproblem auf die Lösung der nichtkomplexen dimensionslosen *Laplace*-Gleichung

$$\Delta A_\varphi = 0 \quad (3.12)$$

mit der *Dirichlet*-Randbedingung

$$A_\varphi = 0 \quad (3.13)$$

an der Siliziumoberfläche und

$$A_\varphi = \frac{C}{r} \quad (3.14)$$

an der Induktoroberfläche reduziert. Die Konstante  $C$  wird aus der Bedingung, daß der dimensionslose Gesamtstrom im Induktor gleich 1 ist, bestimmt. Die Induktorspannung  $U$  kann danach gemäß  $U = -i2\mu_0\omega I_0 R_0 C$  berechnet werden.

### Methode der Boundary-Elemente.

Für die Lösung der Gleichung (3.12) mit der *Dirichlet*-Randbedingung (3.13) und (3.14) an der Grenze des zu untersuchenden Gebietes wird die Boundary-Elemente-Methode [26] angewendet. Die indirekte Formulierung lautet

$$A(x) = \int_G j(\xi) \phi(\xi, x) dG(\xi), \quad x \in G, \quad (3.15)$$

wobei  $A(x)$  das bekannte Vektorpotential an einem Punkt  $x$ ,  $j(\xi)$  der unbekannte Strombelag,  $\phi(\xi, x)$  die bekannte fundamentale Lösung der Laplace-Gleichung und  $G$  die Grenze des Gebietes ist. Die Lösung des Problems erfolgt mit der Berechnung des Strombelags. Anschließend kann das Vektorpotential  $A$  im beliebigen Punkt  $x$  innerhalb des Gebietes gemäß der Gleichung (3.15) berechnet werden.

Die Grenzflächen werden in  $N$  Linienelemente unterteilt (Bild 3.2). Das Vektorpotential und der Strombelag werden als konstant in jedem Element angenommen. Das diskrete Gegenstück der Gleichung (3.15) lautet

$$A_i = \sum_{k=1}^N j_k \phi_{i,k} l_k, \quad i = 1, \dots, N,$$

wobei  $l_k$  die Elementlänge ist.

Die fundamentale Lösung  $\phi_{i,k}$  wird durch elliptische Integrale der ersten und zweiten Art ausgedrückt [27]:

$$\phi_{i,k} = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{r_k}{mr_i}} \left( \left( 1 - \frac{m}{2} \right) K(m) - E(m) \right),$$

wobei

$$m = \frac{4r_i r_k}{(r_i + r_k)^2 + (z_i - z_k)^2} \text{ ist.}$$

Bei  $i = k$ , wenn der Einfluß des Elements auf sich selbst berechnet werden muß, wird das Element in zwei Teilstrecken geteilt (Bild 3.2).

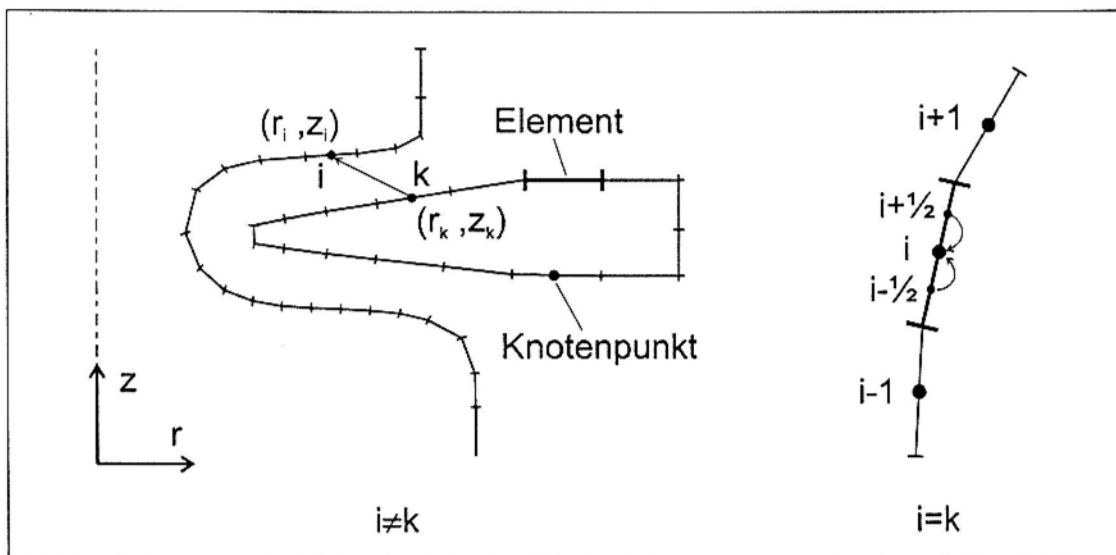


Bild 3.2: Zur Methode der Boundary-Elemente

Es kommt noch eine Gleichung für alle Induktorelemente dazu

$$\sum_{k \in \text{Induktor}} j_k l_k = 1,$$

die den Gesamtstrom im Induktor zu 1 normiert.

Das zu lösende lineare Gleichungssystem sieht dann folgendermaßen aus:

$$\begin{matrix} \text{Silizium-} \\ \text{elemente} \\ \\ \text{Induktor-} \\ \text{elemente} \end{matrix} \begin{bmatrix} \phi_{1,1} & \dots & \phi_{1,k} & \phi_{1,k+1} & \dots & \phi_{1,N} & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \phi_{i,1} & \dots & \phi_{i,k} & \phi_{i,k+1} & \dots & \phi_{i,N} & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \phi_{i+1,1} & \dots & \dots & \phi_{i+1,k+1} & \dots & \phi_{i+1,N} & 1/r_i \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \phi_{N,1} & \dots & \phi_{N,k} & \phi_{N,k+1} & \dots & \phi_{N,N} & 1/r_N \\ 0 & \dots & 0 & l_{k+1} & \dots & l_N & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} j_1 \\ \dots \\ j_i \\ j_{i+1} \\ \dots \\ j_N \\ C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \dots \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (3.16)$$

Die Lösung dieses Systems erfolgt mit der Methode der Gausschen Elimination. Eine Berechnung mit 300 Elementen dauert auf einem Pentium PC mit 90 MHz etwa 10 Sekunden.

### 3.1.2 Radiale Schlitze

Es wurde angenommen, daß der Schlitz zwischen den Stromzuleitungen des Induktors sehr schmal ist und die sonst axialsymmetrische Feldverteilung unwesentlich beeinflußt. Es kann aber vorkommen, daß der Schlitz breiter ist oder sogar zusätzliche radiale Schlitze vorhanden sind [64]. Trotzdem ist es möglich, die Situation mit einem zweidimensionalen Modell näherungsweise zu beschreiben.

Für die Modellierung werden folgende Annahmen gemacht (Bild 3.3):

- 1) Der Strom im Schlitz fließt nur in radialer Richtung;
- 2) Außerhalb der Schlitze fließt der Strom nur in azimuthaler Richtung;
- 3) Das Feld im Schlitz ist konstant sowohl über die Schlitzbreite  $b$  als auch über die Schlitzhöhe  $h$ .

Die Gleichung (3.11) wird als Grundlage benutzt. Der Spannungsabfall im Induktor teilt sich in zwei Teile auf - an der Induktoroberfläche und im Schlitz:

$$U = 2\pi R \text{ grad}V + 2L \text{ grad}V'$$

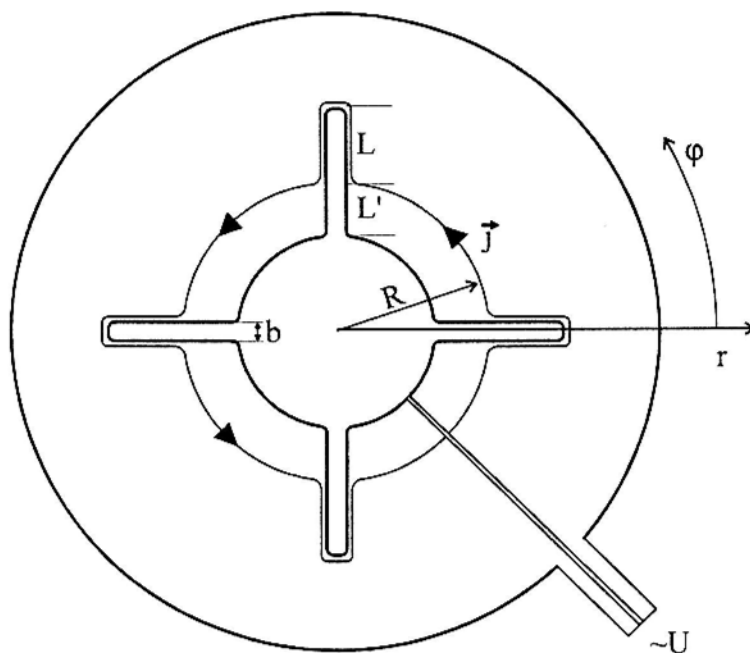


Bild 3.3: Schematische Darstellung des Induktors mit radialen Schlitzen

oder

$$\frac{iU}{\omega} = 2\pi R A_\varphi + 2 \int_L A_r(r) dr, \quad (3.17)$$

wobei  $A_r(r)$  das Vektorpotential und  $V'$  das skalare Potential im Schlitz sind. Die magnetische Induktion im Schlitz wird durch das Vektorpotential ausgedrückt mit

$$B_z(r) = \frac{2A_r(r)}{b}, \quad (3.18)$$

wobei  $b$  die Schlitzbreite ist. Andererseits gilt für die magnetische Induktion an der Oberfläche gemäß (3.4):

$$B_z(r) = \mu_0 j_r(r). \quad (3.19)$$

Dabei ist  $j_r$  der Strombelag, der durch die Summe des azimuthalen Stromes ausgedrückt werden kann:

$$j_r(R) = \frac{1}{h(R)} \int_{L'} j_\varphi(r) dr \quad (3.20)$$

wobei  $h(R)$  die Höhe des Schlitzes ist.

Aus den Gleichungen (3.17)-(3.20) resultiert

$$\frac{iU}{\omega} = 2\pi R A_\varphi + \mu_0 \int_L \frac{b}{h(r)} \left( \int_L j_\varphi(r') dr' \right) dr.$$

Die dimensionslose Randbedingung für den Induktor mit  $n$  Schlitzen sieht folgendermaßen aus:

$$A_\varphi = \frac{C}{R} - \frac{1}{2} \int_L \frac{bn}{h(r)} \left( \int_L j_\varphi(r') dr' \right) dr. \quad (3.21)$$

Im Vergleich mit der Randbedingung (3.14) enthält die neue Bedingung einen zusätzlichen Term. Das in Gleichung (3.21) auftretende Doppelintegral wird numerisch berechnet. Wie man aus der Gleichung sieht, werden Parameter wie Breite  $b$ , Länge  $L$ , Höhe  $h$  und Anzahl der Schlitze  $n$  berücksichtigt.

### 3.1.3 Testberechnungen

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse einiger Testberechnungen dargestellt, um die Genauigkeit der numerischen Methode und die Zulässigkeit der verwendeten Vereinfachungen zu charakterisieren.

Um die notwendige Genauigkeit der Diskretisierung und der Integration zu finden, wurde eine Geometrie, bestehend aus einem kugelförmigen Einsatz mit Radius 1 und einem ringförmigen (torusförmigen) Induktor mit Radius 0.5, verwendet (Bild 3.4). Die Elementlänge ist mit  $l$  bezeichnet, der Abstand zwischen Einsatz und Induktor - mit  $d$ . Bei der Beschreibung der numerischen Methode wurde eine grobe Integration entlang des Elements durchgeführt: zwei Punkte bei der Berechnung des Einflusses auf sich selbst und ein Punkt bei den übrigen Elementen. Im Bild 3.5 ist der Vergleich zwischen Berechnungen mit einer

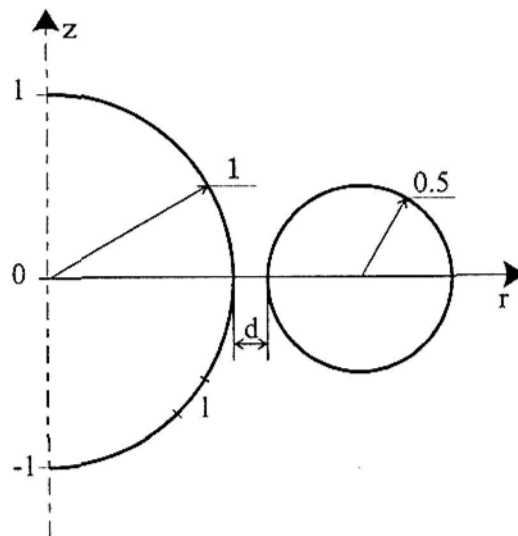


Bild 3.4: Zur Testberechnungen

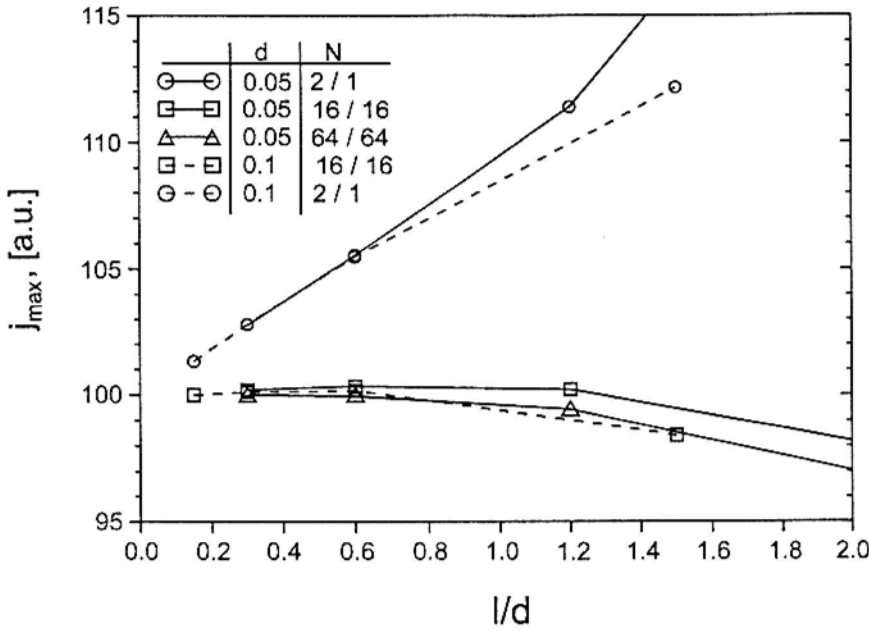


Bild 3.5: Maximalwert des Strombelages  $j$  in Abhängigkeit von Verhältnis  $l/d$

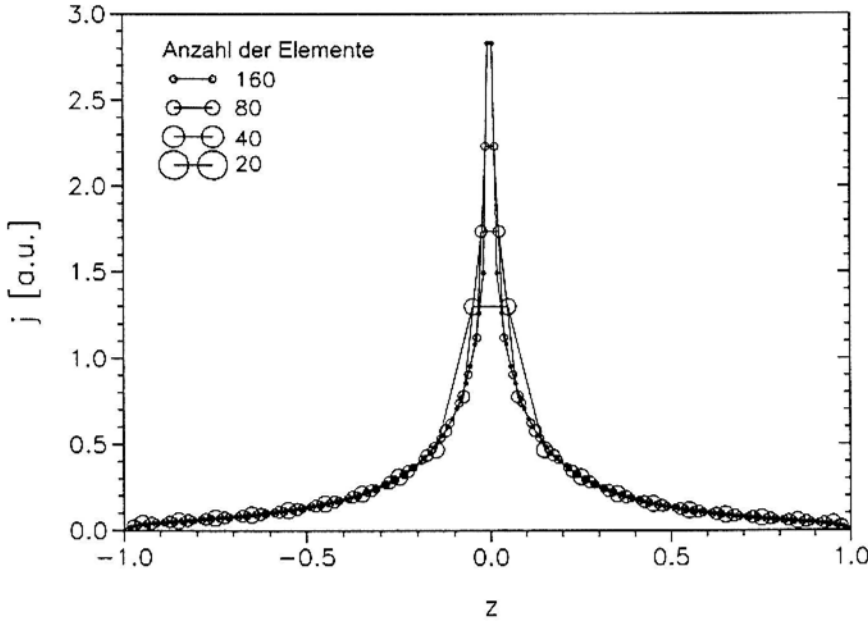
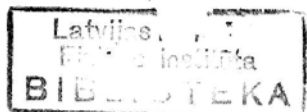


Bild 3.6: Stromverteilung im Einsatz bei unterschiedlicher Diskretisierung

groben Integration (2/1 Punkte) und Berechnungen mit höherer Genauigkeit mit 16/16 und 64/64 Punkten bei unterschiedlichen Elementenlängen  $l$  und Abständen  $d$  dargestellt. Auf der x-Achse ist das Verhältnis  $l/d$  aufgetragen, die y-Achse zeigt den Maximalwert des Strombelages im Induktor, wobei der genaueste Wert (bei  $l = 0.02$  und 64/64 Punkte) auf 100 normiert ist. Es zeigt sich, daß bei genauer Integration der Fehler nur ein paar Prozente beträgt, auch wenn der Abstand viel kleiner ist als die Elementlänge. Bei grober Integration (2/1) liegt der Fehler dann unter 5%, wenn  $d/l > 2$  ist.

3848-D



Im oben behandelten System waren die Krümmungsradien der Oberflächen viel größer als die Elementlänge. Im realen FZ-System können jedoch scharfe Kanten vorkommen, bei denen die Krümmungsradien kleiner sind als die Elementlänge. Um die Kanteneffekte zu untersuchen, wurde die Kugel durch einen rotationssymmetrischen Körper ersetzt (gestrichelte Linie im Bild 3.4). Die Stromverteilung im Einsatz ist im Bild 3.6 dargestellt. Man sieht, daß das Maximum des Strombelages mit steigender Elementzahl unbegrenzt wächst. Es ist jedoch auch

Tab. 2: Der maximale Betrag und Phasenverschiebung des Strombelags im Einsatz bei unterschiedlichen dimensionslosen Frequenzen

Dimensionslose Frequenz $\hat{\omega}$	Betrag [a.u.]	Phase [°]
100	2.927	14.4
1000	3.034	1.49
10000	3.035	0.14

sichtbar, daß der berechnete Strombelag im Mittelpunkt des Elementes ziemlich genau dem "genauen" Wert entspricht, der mit größerer Elementzahl berechnet wird. Auf jedem Fall ist der Unterschied nur im benachbarten Element zu beobachten und die Stromverteilung in den übrigen Elementen wird nicht beeinflusst.

Bisher wurde angenommen, daß die Ströme eine exakte Phasenverschiebung von  $90^\circ$  zu der Induktorspannung und  $180^\circ$  zueinander aufweisen. Um die Zulässigkeit dieser Annahme zu überprüfen, wurden die Berechnungen mit Berücksichtigung der realen und imaginären Anteile des Stromes durchgeführt. Die in [27] beschriebene Methodik ist als Berechnungsprogramm vorhanden, man bekommt auch mit minimalen Änderungen des Gleichungssystems (3.16) das entsprechende Berechnungsprogramm ( $i\pi/\hat{\omega}$  zu diagonalen Elementen addieren,  $1/r$  mit  $i$  multiplizieren und Induktorspannung statt integralem Stromwert angeben). Für die Berechnungen wurde dieselbe Geometrie wie vorher gewählt (Bild 3.4). Die maximale Phasenverschiebung

entspricht dem maximalen Strombelag bei  $z = 0$ . In der Tab. 2 ist der maximale Betrag des Strombelages im Einsatz und die entsprechende Phase abhängig von der dimensionslosen Frequenz angegeben. Bei dimensionslosen Frequenzen über 1000, was der FZ-Anlage entspricht, wird der Betrag praktisch von der Frequenz unabhängig und die Phasenverschiebung kleiner als  $1.5^\circ$ .

Die Testberechnungen haben gezeigt, daß

- die nichtkomplexe Beschreibung des EM-Feldes bei den verwendeten Frequenzen zulässig ist;
- eine grobe Integration durch die Elemente ausreichend ist, wenn die Elementenlängen kleiner als der Abstand zwischen den Elementen sind;
- der berechnete Stromwert im Mittelpunkt des Elementes auch bei grober Diskretisierung dem exakten Wert in diesem Punkt entspricht.

### 3.2 Modell des Temperaturfeldes in Kristallen

Das Temperaturfeld wird als axialsymmetrisch und stationär (zeitunabhängig) angenommen. Wenn die Wärme nicht nur durch Wärmeleitung, sondern auch durch den Vorschub der Kristalle übertragen wird, nimmt die Gleichung für die Temperaturverteilung im Vorratsstab und Monokristall folgende Form an:

$$\rho c \mathbf{u} \text{ grad } T = \text{div}(\lambda(T) \text{ grad } T).$$

Nach dem Übergang zum zylindrischen Koordinatensystem und Entdimensionalisierung gilt

$$\text{Pe}_{C,F} \frac{\partial \hat{T}}{\partial \hat{z}} = \frac{1}{\hat{r}} \frac{\partial}{\partial \hat{r}} \left( \hat{\lambda}(\hat{T}) \hat{r} \frac{\partial \hat{T}}{\partial \hat{r}} \right) + \frac{\partial}{\partial \hat{z}} \left( \hat{\lambda}(\hat{T}) \frac{\partial \hat{T}}{\partial \hat{z}} \right), \quad (3.22)$$

wobei die Wärmeleitfähigkeit  $\hat{\lambda}$  auf  $\lambda^0$ , die Temperatur auf Schmelztemperatur  $T_0$  und die Koordinaten auf den Kristallradius  $R_0$  bezogen sind. Der Parameter  $\text{Pe}_{C,F}$  stellt die dimensionslose *Peclet-Zahl* für Kristall (C) und Vorratsstab (F) dar

$$\text{Pe}_{C,F} = \frac{u_{C,F} c_{C,F} \rho_{C,F} R_0}{\lambda^0_{C,F}},$$

welche das Verhältnis von konvektivem zu diffusivem Wärmetransport beschreibt.

### Randbedingungen

An der Symmetrieachse ( $r=0$ , Linie 7 in Bild 3.1) ist wegen der Symmetrie kein Wärmestrom vorhanden:

$$\frac{\partial \hat{T}}{\partial r} = 0 \text{ an } 7. \quad (3.23)$$

An der Abschmelzfront 2, 3 und Erstarrungsfront 6 entspricht die Temperatur offensichtlich der Schmelztemperatur  $T_0$ , und daraus folgt die dimensionslose Randbedingung

$$\hat{T} = 1 \text{ an } 2, 3, 6. \quad (3.24)$$

An den Randflächen des Vorratsstabs 1 und des Kristalls 5 wird eine Randbedingung, die die Bilanz der Wärme Flüsse berücksichtigt, aufgestellt. Die vom Kristall zu deren Oberfläche geleitete Wärme wird gemäß dem *Stefan-Boltzmann'schen* Gesetz abgestrahlt. Die Rückstrahlung vom Gehäuse und dem Induktor, die aus reflektiertem und ausgestrahltem Anteil besteht, wird mit einer effektiven Temperatur des Gehäuses  $T_{eff,U}$  und des Induktors  $T_{eff,I}$  beschrieben. Die effektiven Temperature werden gemäß der Formel

$$\hat{T}_{eff,U,I} = \sqrt[4]{1 - \varepsilon_{U,I} (1 - \hat{T}_{U,I}^4)}$$

berechnet. Diese Vereinfachung, die bei der Simulation des Czochralski-Verfahrens unzulässig ist, kann wegen des einfacheren Strahlungsaustausches beim FZ-Prozess verwendet werden. Zusätzlich müssen noch die vom elektrischen Strom in einer schmalen Randschicht induzierten Wärmequellen berücksichtigt werden. Die Randbedingung lautet:

$$\mathbf{qn} = \varepsilon \sigma_{SB} (T^4 - T_{eff}^4) - p, \quad (3.25)$$

wobei  $\varepsilon$  die Emissivität und  $\mathbf{n}$  der Normaleneinheitsvektor, der in den Kristall hinein zeigt, ist. Aus den Gleichungen (3.25) und (3.5) folgt die Randbedingung in dimensionsloser Form

$$\frac{\partial \hat{T}}{\partial \hat{n}} = \text{Bi}_{F,C} \frac{\varepsilon_{F,C}^{\wedge}}{\lambda_{F,C}^{\wedge}} \left( \hat{T}^4 - T_{\text{eff},U}^{\wedge 4} \right) - \frac{\text{Qe}_{F,C}}{\lambda_{F,C}^{\wedge}} j^2 \quad \text{an 1,5} \quad (3.26)$$

mit den dimensionslosen Konstanten

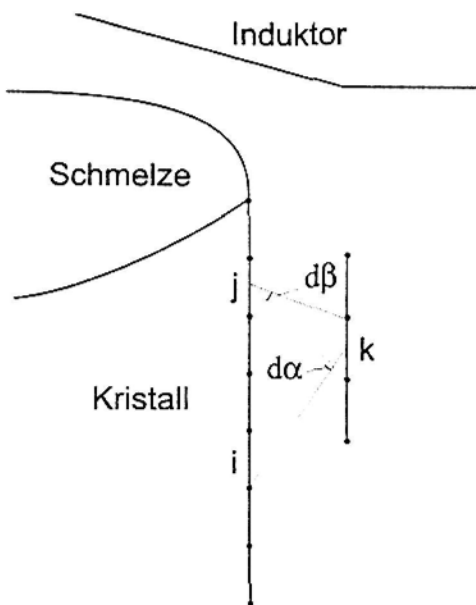
$$\text{Bi}_{F,C} = \frac{\varepsilon_{F,C}^0 \sigma_{SB} T_0^3 R_0}{\lambda_{F,C}^0},$$

$$\text{Qe}_{F,C} = \frac{I_0^2 R_0}{\lambda_{F,C}^0 T_0} \sqrt{\frac{\pi \mu_0 f}{\sigma_{F,C}}}$$

Die dimensionslose temperaturabhängige Wärmeleitfähigkeit und der Emissionsgrad sowie die charakteristischen Werte dieser Größen sind in Tab. 3 (Seite 51) dargestellt. Die Gleichung (3.22) zusammen mit Randbedingungen (3.23), (3.24), (3.26) erlaubt die Berechnung des Temperaturfeldes im Vorratsstab und Kristall für die angegebenen Phasengrenzen. Die Berechnung erfolgt mit der Finite-Elemente-Methode, die im Abschnitt 3.4.3 eingehend beschrieben wird.

### Reflektor

Um die thermischen Verhältnisse in der Nähe der Erstarrungsfront zu verbessern, werden in einigen Züchtungsanlagen spezielle Reflektoren angebracht. Eine mögliche Position des Reflektors ist im Bild 3.7 gezeigt.



Da der Abstand zwischen dem Kristall und Reflektor viel kleiner ist als der Kristallradius, nimmt man an, daß alle in azimuthaler Richtung reflektierte Wärme auf die Siliziumoberfläche zurückfällt. Das erlaubt den Strahlungsaustausch einfacher zu berechnen. Außerdem wird angenommen, daß der Reflektor die einfallende Wärmestrahlung diffus (gleichmäßig in alle Richtungen) reflektiert. Die Temperatur des Reflektors wird dank der Kühlung vergleichsweise niedrig gehalten und die eigene Wärmestrahlung, die viel kleiner als

Bild 3.7: Zur Berücksichtigung des Reflektors

die reflektierte Strahlung ist, wird vernachlässigt. Die Umgebungstemperatur  $T_{eff,U}$  in Randbedingung (3.26) wird für jedes Element  $i$  des Monokristalls mit einer Doppelsumme durch alle Kristallelemente (Si) und alle Reflektorelemente (Refl) ausgedrückt

$$T_{eff,U,i} = \sqrt[4]{\sum_k^{Refl} (1 - \hat{\epsilon}_R) \frac{d\alpha}{\pi} \frac{l_k}{l_j} \sum_j^{Si} \hat{\epsilon}_j T_j^4 \frac{d\beta}{\pi} \frac{l_j}{l_k}},$$

wobei  $\epsilon_R$  die Emissivität des Reflektors ist ( $1 - \epsilon_R$  ist die Reflexivität).

### 3.3 Form der Phasengrenzen

Eines der wichtigsten Ziele der Modellierung ist die Berechnung der Form der Phasengrenzen für verschiedene Züchtungsparametern. In diesem Abschnitt werden die Bedingungen formuliert, die die Berechnung der unbekanntenen Phasengrenzen erlauben.

#### 3.3.1 Thermisch bedingte Phasengrenzen

Phasengrenzen zwischen Kristallen und der Schmelze haben Schmelztemperatur  $T_0$ . Diese Temperatur wird als Randbedingung für die Berechnung des Temperaturfeldes bei vorgegebener Form der Phasengrenzen benutzt. Um diese Form zu bestimmen, muß noch eine zusätzliche Bedingung an den Phasengrenzen verwendet werden. In diesem Fall ist das die Erhaltung der durch die Grenze fließenden Wärme flüsse unter Berücksichtigung der latenten Wärme, die bei Abschmelzen und Kristallisation benötigt bzw. frei wird. Dieses Gesetz der Erhaltung der Wärme flüsse, auch die *Stefan*-Bedingung genannt, lautet in dimensionsloser Form

$$\left. \frac{\partial \hat{T}}{\partial \hat{n}} \right|_F + \hat{q}_M - Cr_F \cos\Theta = 0 \text{ an } 3, \tag{3.27}$$

$$\left. \frac{\partial \hat{T}}{\partial \hat{n}} \right|_C + \hat{q}_M + Cr_C \cos\Theta = 0 \text{ an } 6, \tag{3.28}$$

wobei  $q_M$  die Wärmeflußdichte in der Normalenrichtung aus der Schmelze heraus und  $\theta$  der Winkel zwischen der Phasengrenze und der Horizontale (Bild 3.1) ist. Der Wärmefluß  $q_M$  wird bei der Berechnung der Schmelzenströmung bestimmt (siehe Abschnitt 3.4).

Das Abschmelzen des Vorratsstabes an der Abschmelzfront 2 ist ein komplizierter Prozeß und läßt sich nicht mit einfachen Modellen beschreiben. Geschmolzenes Silizium zieht sich in kleinen Tröpfchen zusammen und fließt unter Wirkung der Schwerkraft entlang der Oberfläche in die Schmelze hinein. Die Oberfläche ist nicht glatt sondern mehr oder weniger von Rillen und anderen Unebenheiten durchquert. Da sich die elektrische Leitfähigkeit des Siliziums in festem und flüssigem Zustand um den Faktor 25 unterscheidet, ist die Eindringtiefe und entsprechend auch die induzierte Wärmemenge sehr von der Verteilung des flüssigen Siliziums an der Oberfläche abhängig. Die Vorgänge an der Abschmelzfront werden im Abschnitt 4.2.1 detaillierter analysiert. Weiter wird das unbekannte Verhältnis vom festen und flüssigen Silizium mit einer Zahl  $\xi$  beschrieben, die aufgrund der experimentellen Daten festgelegt wird.

Die elektromagnetisch induzierte Wärme wird sowohl für das Abschmelzen des zugeführten Vorratsstabes verwendet, als auch abgestrahlt und im Inneren des Vorratsstabes abgeleitet. Es wird vorausgesetzt, daß die Temperatur des geschmolzenen Siliziums fast gleich der Schmelztemperatur bleibt und dadurch keine Wärme für weitere Erhitzung verwendet wird. Dann entfällt auch der konvektive Wärmetransport, weil kein Temperaturgradient entlang der Phasengrenze besteht. Aus diesen Überlegungen folgt die Bedingung für die Abschmelzfront 2, die in dimensionsloser Form lautet:

$$\frac{\partial \hat{T}}{\partial \hat{n}} - \text{Bi}_F (1 - \hat{T}_i)^4 - \text{Cr}_F \cos \theta + \xi \text{Qe}_M \hat{j}^2 = 0 \quad \text{an } 2, \quad (3.29)$$

wobei  $T_i$  die effektive Temperatur des Induktors ist.

Die in den Gleichungen (3.27)-(3.29) verwendeten dimensionslosen Parameter sind:

$$\text{Bi}_{F,C} = \frac{\varepsilon_{F,C}^0 \sigma_{SB} T_0^3 R_0}{\lambda_{F,C}^0},$$

$$\text{Cr}_{F,C} = \frac{u_{F,C} \rho_{F,C} Q R_0}{\lambda_{F,C}^0 T_0},$$

$$\text{Qe}_{F,C,M} = \frac{I_0^2 R_0 (\omega \mu_0)^{1/2}}{\lambda_{F,C,M}^0 T_0 (2\sigma_{F,C,M})^{1/2}}$$

Der neu eingeführter dimensionslose Parameter Cr charakterisiert die für das Abschmelzen benötigte Wärmemenge. Der Parameter Bi beschreibt die Abstrahlungseigenschaften und der Parameter Qe die Intensität der Wärmequellen.

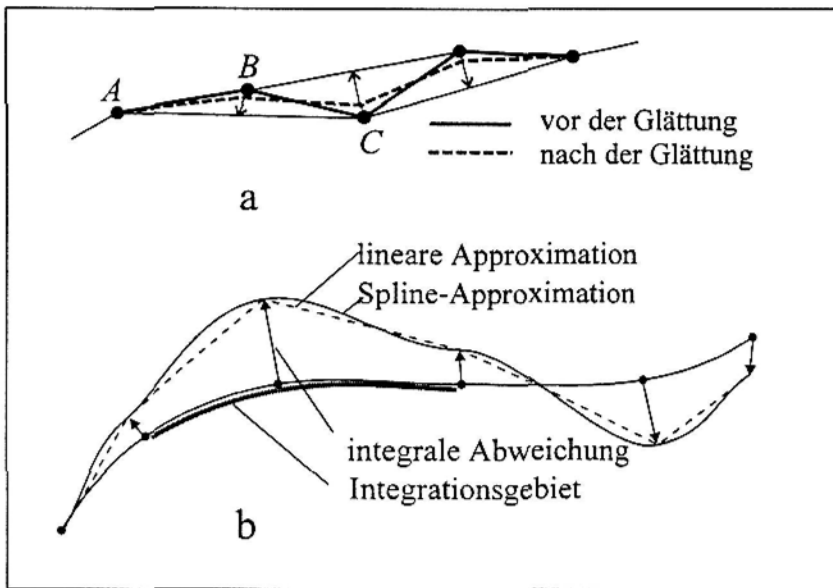


Bild 3.8: Glättung der Phasengrenze (a) und integrale Verschiebung der Elemente bei numerischen Berechnungen

Die thermisch bedingten Phasengrenzen werden iterativ berechnet. Die fest/flüssig Grenzen (3 und 6) lassen sich relativ einfach berechnen, z. B. mit der *Newton*-Methode [28]. Wenn die Endpunkte ( $R_F, Z_F$ ) und ( $R_C, Z_C$ ) (siehe Bild 3.1) nicht bewegt werden müssen, kann man mit wenigen Iterationen diese Grenzen berechnen. Die Änderung der Endpunktlage beeinflusst die Form der freien Schmelzenoberfläche und dadurch die Wärmequellenverteilung sehr stark. Deswegen sind nur kleine Verschiebungen der Endpunkte in jedem Iterationsschritt zulässig. Auch die offene Abschmelzfront 2 ist gegenüber großen Verschiebungen empfindlich. Dabei können starke "zickzack"-Formen entstehen, die geglättet werden müssen. Die Glättung

erfolgt durch die Verschiebung des jeweiligen mittleren Punktes  $B$  in Richtung des Mittelpunktes der Strecke  $(A,B)$  (siehe Bild 3.8 a):

$$r_B = r_B + \chi \left( \frac{r_A + r_C}{2} - r_B \right); z_B = z_B + \chi \left( \frac{z_A + z_C}{2} - z_B \right),$$

wobei der Parameter  $\chi$  abhängig von der Schrittgröße und Krümmung der Phasengrenze etwa zwischen  $1/4$  und  $1/32$  liegt.

Als zweckmäßig haben sich folgende Verschiebungsalgorithmen erwiesen:

- a) Verschiebung jedes Punktes mit einem konstanten Schritt  $h$ ; besonders effektiv am Ende der Berechnungen in der Nähe des Gleichgewichts.
- b) Verschiebung jedes Punktes proportional zu der Abweichung; effektiv im Anfangsstadium bei größeren Abweichungen.
- c) Berechnung der mittleren Abweichung über Teilgebiete und proportionale Verschiebung, wobei die Verschiebungen zwischen den berechneten Punkten linear oder mit einer Spline-Funktion interpoliert wird (siehe Bild 3.8 b).

### 3.3.2 Freie Schmelzenoberfläche

Die Form der freien Schmelzenoberfläche (Bild 3.1, 4) wird in hydrostatischer Näherung aus dem Gleichgewicht der normalen Spannungen an der Oberfläche berechnet. Es werden der hydrostatische und der elektromagnetische Druck sowie die Oberflächenspannung berücksichtigt. Der dynamische Effekt ist klein und wird vernachlässigt [29]. In diesem Abschnitt werden nur dimensionslose Größen verwendet und die  $\wedge$ -Zeichen der Einfachheit halber weggelassen. Die dimensionslose *Laplace-Young* Gleichung lautet

$$Fej^2 - Z' + z_s + \text{Sg} \left( \frac{1}{r_s} \cos \phi + \frac{1}{R'} \right) = 0, \quad (3.30)$$

wobei  $r_s, z_s$  die Koordinaten der Oberfläche,  $R'$  der Krümmungsradius der Oberfläche in  $(r,z)$  Ebene,  $\phi$  der lokale Winkel zwischen der vertikalen Linie und Tangente der Oberfläche und  $Z'$  der unbekannte Referenzdruck ist. Der Druck  $Z'$  wird auf  $\rho_M g R_0$  bezogen und die dimensionslosen Parameter sind

$$Fe = \frac{\mu_0 I_0^2}{4 \rho_M g R_0^3}, \quad Sg = \frac{\gamma_M}{\rho_M g R_0^2}.$$

Der Parameter  $Fe$  charakterisiert das Verhältnis zwischen der EM-Kraft und Schwerkraft. Der Parameter  $Sg$  beschreibt das Verhältnis zwischen Oberflächenspannung und Schwerkraft.

Für die Gleichung (3.30) wird die parametrische Repräsentation entlang der Oberfläche [5] verwendet:

$$\begin{aligned} \frac{dr_s}{ds} &= \sin \phi, & \frac{dz_s}{ds} &= \cos \phi, \\ \frac{d\phi}{ds} &= -\frac{\cos \phi}{r_s} - \frac{z_s - Z' + Fe j^2}{Sg} \end{aligned} \quad (3.31)$$

Für die Berechnung der Form der freien Oberfläche wird (3.31) mit folgenden Randbedingungen integriert:  $r_s = R_C$  bei  $z_s = Z_C$  (unterer Tripelpunkt) und  $r_s = R_F$  bei  $z_s = Z_F$  (oberer Tripelpunkt) (Bild 3.1). Die Integration wird vom unteren Tripelpunkt (Kristall/Schmelze/Gas) ( $R_C, Z_C$ ), mit dem Referenzdruck  $Z'$  gestartet. Um  $Z'$  zu bestimmen, wird noch die zusätzliche Angabe des Winkels  $\phi_0$  der Oberfläche im Anfangspunkt ( $R_C, Z_C$ ), benötigt:

$$\frac{\partial r_s}{\partial z_s} = \tan \phi_0.$$

Der Kontaktwinkel zwischen festem und flüssigem Silizium im Tripelpunkt ist eine Materialkonstante und beträgt  $13^\circ$  [30]. Um Kristallwachstum mit konstantem Durchmesser zu gewährleisten, muß der Winkel  $\phi_0$  mit der Vertikalen gleich  $13^\circ$  sein.

Bei der Integration wird das *Runge-Kutta* Schema IV-Ordnung verwendet. Unterschiedliche Referenzdrücke  $Z'$  entsprechen unterschiedliche Formen der freien Oberfläche. Der richtige Wert von  $Z'$ , bei dem die Oberfläche durch den Punkt ( $R_F, Z_F$ ) verläuft, wird iterativ bestimmt.

Die Berechnung der freien Oberfläche wurde mit der Berechnung von *Coriell* [4] bei ( $R_C = R_F, Z_F - Z_C = 2, Sg = 0.667$ ) verglichen. Dieser Test zeigte eine sehr gute

Übereinstimmung bezüglich der Form der freien Oberfläche sowie des Volumens der flüssigen Zone.

## 3.4 Schmelzenströmung und Temperaturfeld in der Schmelze

### 3.4.1 Grundgleichungen

Für die Beschreibung der Schmelzenströmung werden die Kontinuitätsgleichung

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = 0 \quad (3.32)$$

und die *Navier-Stokes* Gleichung mit der *Boussinesq*-Approximation verwendet [31]

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \nabla) \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \operatorname{grad} p + \nu \Delta \mathbf{u} + \frac{\mathbf{f}}{\rho}. \quad (3.33)$$

Der Kraftterm  $\mathbf{f}$  hat zwei Anteile - die elektromagnetische und die thermische Kraftdichte:

$$\mathbf{f} = \mathbf{f}_{EM} + \mathbf{f}_T.$$

Die elektromagnetische Kraft resultiert aus der Wechselwirkung des elektrischen Stromes  $\mathbf{s}$  mit der magnetischen Induktion  $\mathbf{B}$

$$\mathbf{f}_{EM} = \mathbf{s} \times \mathbf{B}.$$

Die thermische Kraft oder der thermischer Auftrieb entsteht aufgrund der temperaturabhängigen Dichte der Schmelze und wird folgendermaßen ausgedrückt

$$\mathbf{f}_T = \rho \mathbf{g} \beta (T - T_0).$$

Die Temperaturverteilung in der Schmelze beschreibt die Wärmeleitungsgleichung [31]

$$\rho c \left( \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \operatorname{grad} T \right) = \operatorname{div}(\lambda \operatorname{grad} T) .$$

Statt der Gleichungen (3.32) und (3.33) ist es im 2D-Fall oft vorteilhaft, die alternative “ $\zeta$ - $\psi$ ” (*Vorticity-Streamfunction*) Formulierung zu verwenden. Statt drei Gleichungen für die Primitivvariablen  $u_r$ ,  $u_z$  und  $p$  bilden die Wirbeltransportgleichung für  $\zeta$  und die *Poisson*-Gleichung für die Stromfunktion  $\psi$  ein gekoppeltes System von nur zwei Differentialgleichungen. In diesen Gleichungen ist der Druck eliminiert und die Kontinuitätsgleichung ist automatisch erfüllt [32]. Die Gleichung für die azimutale Geschwindigkeitskomponente  $u_\varphi$  kommt in beiden Formulierungen noch dazu.

Um die Gleichungen in dimensionsloser Form zu schreiben, werden die charakteristische Werte der Zeit  $t_0 = R_0^2 / \nu$  und Geschwindigkeit  $u_0 = \nu / R_0$  eingeführt, wobei  $t = t_0 \hat{t}$  und  $u = u_0 \hat{u}$  ist. In folgenden Gleichungen (3.34)-(3.38) werden der Einfachheit halber die  $\hat{\cdot}$ -Zeichen für alle dimensionslosen Variablen ( $r$ ,  $z$ ,  $u$ ,  $t$ ,  $\zeta$ ,  $\psi$ ,  $T$ ) weggelassen. Die dimensionslosen Gleichungen für  $\zeta$ ,  $\psi$ ,  $u_\varphi$  und  $T$  im zylindrischen Koordinatensystem  $(r, z, \varphi)$  lauten dann:

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + u_r \frac{\partial \zeta}{\partial r} + u_z \frac{\partial \zeta}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{u_\varphi^2}{r} \right) = \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \zeta) \right) + \frac{\partial^2 \zeta}{\partial z^2} - \operatorname{Gr} \frac{\partial T}{\partial r} \quad (3.34)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) = -\zeta \quad (3.35)$$

$$\frac{\partial u_\varphi}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_\varphi}{\partial r} + u_z \frac{\partial u_\varphi}{\partial z} + \frac{u_r u_\varphi}{r} = \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r u_\varphi) \right) + \frac{\partial^2 u_\varphi}{\partial z^2} \quad (3.36)$$

$$\operatorname{Pr} \left( \frac{\partial T}{\partial t} + u_r \frac{\partial T}{\partial r} + u_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad (3.37)$$

Die Stromfunktion  $\psi$  und der Rotor der Geschwindigkeit  $\zeta$  werden durch die radiale und axiale Geschwindigkeitskomponente definiert:

$$u_r = -\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z}, \quad u_z = \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r}, \quad \zeta = \frac{\partial u_r}{\partial z} - \frac{\partial u_z}{\partial r} . \quad (3.38)$$

Die EM-Kraft, die im sehr schmalen Randbereich an der feien Oberfläche wirkt, ist in dieser Gleichungen direkt nicht erhalten, da sie in den Randbedingungen berücksichtigt wird.

### 3.4.2 Randbedingungen

Das Schmelzgebiet hat 3 unterschiedliche Grenzen - die Grenze mit festem Silizium (3, 6 in Bild 3.1), die freie Oberfläche (4) und die Symmetrieachse (7). An diesen Grenzen müssen spezifische Randbedingungen für alle unbekannte Größen festgelegt werden.

#### Stromfunktion $\psi$ :

Es wird angenommen, daß sich die Strömung im Schmelzgebiet schließt, d.h. die langsame (etwa 3 mm/min) mit dem Kristallwachstum und Abschmelzen des Vorratsstabs verbundene Strömung wird vernachlässigt. Aus der Definition der Stromfunktion (3.38) folgt, daß auf der Grenze, die von der Strömung nicht durchgeflossen wird, die Stromfunktion konstant ist. Dementsprechend wird an diesen Grenzen

$$\hat{\psi} = 0 \quad \text{an } 3, 4, 6, 7$$

gesetzt.

#### Azimutale Geschwindigkeitskomponente $u_\varphi$ :

Die azimutale Geschwindigkeitskomponente verschwindet an der Symmetrieachse

$$\hat{u}_\varphi = 0 \quad \text{an } 7.$$

An den festen Grenzen ist wegen der Haftbedingung die Geschwindigkeit der Flüssigkeit gleich der Rotationsgeschwindigkeit des Vorratsstabs bzw. des Kristalls.

In dimensionsloser Form lauten diese Bedingungen

$$\hat{u}_\varphi = \text{Re}_C \hat{r} \quad \text{an } 6, \quad \hat{u}_\varphi = \text{Re}_F \hat{r} \quad \text{an } 3.$$

Da in azimutaler Richtung keine Kräfte wirken, sind an der freien Oberfläche die Querspannungskomponenten gleich null [31]. Daraus folgt die *Cauchy*-Randbedingung

$$\frac{\hat{\partial} u_{\varphi}}{\hat{\partial} n} = \frac{\hat{\partial} r}{\hat{\partial} n} \cdot \frac{\hat{u}_{\varphi}}{r} \quad \text{an 4 .}$$

Rotor der Geschwindigkeit  $\zeta$  (^-Zeichen weggelassen):

An der Symmetrieachse ist die radiale Geschwindigkeit  $u_r$  und radiale Ableitung der axialen Geschwindigkeit  $\partial u_z / \partial r$  gleich null. Aus der Definition (3.38) folgt die Randbedingung für den Rotor der Geschwindigkeit

$$\zeta = 0 \quad \text{an 7 .}$$

Für die Berechnung des Rotors der Geschwindigkeit an den festen Grenzen werden die für die Normalenrichtung umgeschriebene Definition (3.38)

$$\zeta = -\frac{1}{r} \frac{\partial^2 \psi}{\partial n^2}$$

und die Haftbedingung

$$\frac{\partial \psi}{\partial n} = 0 \quad (3.39)$$

verwendet. Da aus diesen Bedingungen  $\zeta$  nicht direkt berechenbar ist, wird die Stromfunktion in der Nähe der Grenze in der Form einer *Taylor*-Reihe dargestellt:

$$\psi(n) = \psi(0) + \frac{\partial \psi(0)}{\partial n} n + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi(0)}{\partial n^2} n^2 + \dots,$$

wobei  $n$  der Abstand in Normalenrichtung von der Grenze ist (Bild 3.1). Die einfachste und öfter benutzte Randbedingung, die meistens auch die besten Ergebnisse liefert, verwendet die *Taylor*-Reihe bis zum Glied der zweiten Ordnung und heißt *Thom*-Bedingung. Für die Bestimmung des Rotors der Geschwindigkeit  $\zeta$  werden die Werte der Stromfunktion  $\psi$  in zwei Punkten benötigt - direkt auf der Grenze ( $n=0$ ) und in der Nähe der Grenze innerhalb des Schmelzgebietes ( $n=n$ ):

$$\zeta(0) = -\frac{2}{r n^2} (\psi(0) - \psi(n)) \quad \text{an 3, 6 .} \quad (3.40)$$

Genauer ist diese Randbedingung bei der Beschreibung der FE-Methode in Abschnitt 3.4.3 beschrieben.

An der freien Oberfläche müssen die EM-Kräfte und Marangoni-Kräfte berücksichtigt werden. Die Marangoni-Kraft wirkt an der Oberfläche nur einige Molekülschichten tief und ist dadurch als reine Oberflächenkraft zu betrachten. Die EM-Kraft ist eine Volumenkraft, wirkt aber im Vergleich mit der Abmessungen des Systems in einer sehr dünnen Schicht an der Schmelzenoberfläche und dessen Intensität klingt mit der Entfernung von der Oberfläche exponentiell ab. Um die benötigte Auflösung des Finite-Elemente Netzes in der Nähe der Schmelzenoberfläche zu verringern, wird die EM-Kraft in die Randbedingungen eingeschlossen. Die Gleichung (3.34) für  $\zeta$  wird in einer Oberflächenschicht mit der Tiefe  $2\delta$ , in der 98% der Kraft wirkt, analytisch integriert. Der Wert, der in der Tiefe  $2\delta$  berechnet wird, wird als Randbedingung für die numerische Simulation benutzt. Dadurch ist die EM-Kraft aus dem Schmelzgebiet ausgeschlossen und nur in der Randbedingungen enthalten. Bei sehr kleiner Eindringtiefe, d.h.  $\delta \ll R_0$  und  $\delta \ll R'$ , können die *Curvature*-Glieder in der Gleichung für den Rotor der Geschwindigkeit vernachlässigt werden. Es wird außerdem angenommen, daß  $\zeta$  sich in tangentialer Richtung viel weniger ändert als in Normalenrichtung. Dann folgt eine einfache Gleichung für  $\zeta$  an der Oberfläche

$$\frac{\partial^2 \zeta}{\partial n^2} - \frac{\text{Em}}{\delta} \frac{\partial j^2}{\partial \tau} \exp\left(-\frac{2n}{\delta}\right) = 0. \quad (3.41)$$

An der Oberfläche ( $n=0$ ) wird der Rotor der Geschwindigkeit von der Marangoni-Kraft bestimmt

$$\zeta|_{n=0} = \text{Ma} \frac{\partial T}{\partial \tau} - \frac{u_\tau}{R'}. \quad (3.42)$$

Nach der Integration der Gleichung (3.41) von  $n=0$  bis  $n=2\delta$  unter Benutzung der Gleichung (3.42) ohne den kleinen Term  $u_\tau/R'$  als Randbedingung bei  $n=0$ , bekommt man die Randbedingung bei  $n=2\delta$ , die in der numerischen Berechnung verwendet wird:

$$\frac{\partial \zeta}{\partial n} = \frac{\zeta}{2\delta} + 0.1136 \text{Em} \frac{\partial j^2}{\partial \tau} - \frac{\text{Ma}}{2\delta} \frac{\partial T}{\partial \tau}. \quad (3.43)$$

Diese Randbedingung ist nur eine Näherung, die bei größeren Eindringtiefen wesentliche Unterschiede zur genauen Lösung aufweisen kann und deren Benutzung für jede neue Situation neu überprüft werden muß. In einer typischen FZ-Anordnung

für die Züchtung von 100-150 mm Kristallen ist der thermischer Auftrieb von größerer Bedeutung als EM- und Marangoni-Kräfte (siehe Abschnitt 4), deshalb beeinflusst die vereinfachte Randbedingung die Gesamtströmung nicht so stark. Die kleine Eindringtiefe  $\hat{\delta} < 10^{-3}$  spricht auch für die sichere Verwendung dieser Bedingung.

In den obigen Gleichungen und Randbedingungen werden folgende dimensionslose Parameter verwendet:

$$\begin{aligned} \text{Gr} &= \frac{\beta g T_0 R_0^3}{\nu^2}, & \text{Pr} &= \frac{\rho_M c_M \nu}{\lambda_M}, & \text{Em} &= \frac{\mu_0 I_0^2}{2 \rho_M \nu^2} \\ \text{Ma} &= \frac{\partial \gamma}{\partial T} \frac{R_0 T_0}{\rho_M \nu^2}, & \text{Re}_{F,C} &= \frac{2 \pi W_{F,C} R_0^2}{\nu} \end{aligned} \quad (3.44)$$

Dabei charakterisiert die Grashof-Zahl Gr die Intensität des thermischen Auftriebs, die Marangoni-Zahl die Stärke der Marangonikonvektion. Die Kristall- und Vorratstabrotation wird durch die Rotations-Reynolds-Zahl Re beschrieben. Das Verhältnis von viskoser Kraft zur Temperaturleitfähigkeit drückt sich in der Prandtl-Zahl aus, die eine Materialkonstante ist. Der Parameter Em charakterisiert die Intensität der EM-Konvektion.

#### Temperaturfeld T:

An der Symmetrieachse gilt:

$$\frac{\partial \hat{T}}{\partial r} = 0 \quad \text{an } 7.$$

An der Abschmelzfront und Erstarrungsfront ist die Temperatur gleich der Schmelztemperatur  $T_0$ :

$$\hat{T} = 1 \quad \text{an } 3, 6.$$

An der freien Oberfläche wird eine Wärmebilanzgleichung aufgestellt. Ein Teil der in der dünnen Grenzschicht induzierten Wärme wird gegen den Induktor abgestrahlt, der andere Teil wird in die Schmelze abgeleitet:

$$\frac{\partial \hat{T}}{\partial \hat{n}} = \text{Bi}_M (\hat{T}^4 - T_{\text{eff},J}^4) - \text{Qe}_M j^2 \quad \text{an } 4 .$$

Nach der Berechnung des Temperaturfeldes in der Schmelze kann man die Wärmeflüsse an den Grenzen des Vorratsstabs 3 und des Monokristalls 6 berechnen

$$q_M = \frac{\lambda_M}{\lambda_{F,C}} \frac{\partial \hat{T}}{\partial \hat{n}} .$$

Diese Wärmeflüsse werden bei der Berechnung der Form der Phasengrenzen in den Bedingungen (3.27) und (3.28) verwendet.

### 3.4.3 Methode der Finiten Elemente

Für die Berechnung der Strömung in der Schmelze und des Temperaturfeldes in der Schmelze und in den Kristallen wird die Methode der Finiten Elemente (FEM) verwendet [34], [33], [32]. Da es sich in dieser Arbeit um keine Neuentwicklung sondern nur um eine Anwendung der FEM handelt, werden die Grundprinzipien der Methode nur kurz beschrieben. Wie man das FE-Gleichungssystem erhält, wird aufgrund einer allgemeinen Transportgleichung gezeigt. Die FE-Analoge der Gleichungen (3.22),(3.34)-(3.38), die in ähnlicher Weise zu erhalten sind, werden gleich in Matrix-Schreibweise angegeben.

Allgemein ausgedrückt, besteht das Problem darin, eine unbekannte Funktion  $\phi(r,z,t)$  zu bestimmen, die in einem Gebiet  $\Omega$  eine Differentialgleichung

$$F(\phi, \phi', \dots, \phi^{(n)}) = 0 \quad (3.45)$$

erfüllt und Anfangs- und Randbedingungen genügt. Die gesuchte Funktion wird in Form einer Summe gesucht

$$\phi(r,z,t) \approx \tilde{\phi}(r,z,t) = \sum_{i=1}^M c_i(t) N_i(r,z), \quad (3.46)$$

wobei  $M$  die Anzahl der Reihenglieder bezeichnet,  $c_i$  die zu bestimmenden konstanten Koeffizienten und  $N_i$  die Ansatzfunktionen sind. Das Ersetzen der Funktion  $\phi$  durch ihre Näherung  $\tilde{\phi}$  führt zum Auftreten eines Fehlers bzw. Residuums  $R$ :

$$F(\tilde{\phi}, \tilde{\phi}', \dots, \tilde{\phi}^{(n)}) = R \neq 0. \quad (3.47)$$

Die Koeffizienten  $c_i$  müssen so bestimmt werden, daß das Residuum möglichst klein wird. Die Methode der gewichteten Residuen besagt, daß das Residuum mit einer endlichen Zahl unabhängiger Gewichtsfunktionen  $W_j$  multipliziert und im Gebiet  $\Omega$  integriert wird. Die Forderung dabei ist, daß die über das Integrationsgebiet gemittelten gewichteten Residuen verschwinden:

$$\int_{\Omega} F(\tilde{\phi}, \tilde{\phi}', \dots, \tilde{\phi}^{(n)}) W_j d\Omega = \int_{\Omega} R W_j d\Omega = 0, j=1 \dots M \quad (3.48)$$

Diese Forderung führt zu einem System von  $M$  algebraischen Gleichungen zur Bestimmung der  $M$  unbekanntenen  $c_i$ , die in Gleichung (3.46) eingesetzt eine Näherungslösung für  $\phi$  ergeben.

Fast jedes System unabhängiger Funktionen  $W_j$  läßt sich als Gewichtsfunktionen verwenden. Nach dem Verfahren von Galerkin werden einfach die Ansatzfunktionen als Gewichtsfunktionen benutzt:  $W_j = N_j$ . In einigen Fällen ist es sinnvoll, unterschiedliche Funktionen als Gewichts- und Ansatzfunktionen zu verwenden, z.B. bei der Einführung von "upwind"-Schemem für die konvektiven Glieder in der *Navier-Stokes* Gleichung (Verfahren von *Bubnov-Galerkin*).

Die Auswahl der Funktionen  $N_j$  ist jedoch eingeschränkt. Es sind solche Funktionen zu vermeiden, die zu singulären Gliedern im Integral (3.48) führen. Wenn eine stetige Funktion eine unstetige erste Ableitung aufweist, geht die zweite Ableitung in diesem Ort gegen unendlich. Solche Funktionen werden als  $C_0$ -stetig bezeichnet und erlauben nur erste Ableitungen in den verwendeten Differentialgleichungen. In der FEM werden wegen einfacher Integration und Handhabbarkeit meistens  $C_0$ -stetige Ansatzfunktionen verwendet. Da die *Navier-Stokes* Gleichung eine Differentialgleichung zweiter Ordnung ist, wird deren Ordnung durch partielle

Integration mit Hilfe des Green'schen Satzes reduziert. Für beliebige Skalarfunktionen  $u, v$  innerhalb eines zweidimensionalen Gebietes  $\Omega$  mit der Berandung  $\Gamma$  gilt

$$\int_{\Omega} u \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} dx dy = - \int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} dx dy + \int_{\Gamma} u \frac{\partial v}{\partial x} n_x d\Gamma, \quad (3.49)$$

wenn  $n_x$  der Richtungskosinus zwischen Normalen und der  $x$ -Richtung ist. Die Anwendung des Green'schen Satzes resultiert in der sogenannten schwachen-Form der Integralgleichungen, die die Grundlage für die approximierte Lösung mit Hilfe finiter Elemente bildet.

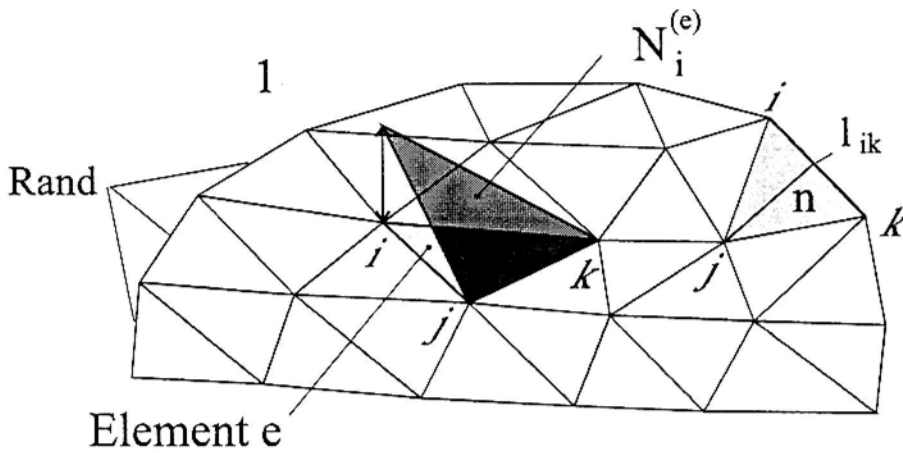


Bild 3.9: Dreieckselemente, Ansatzfunktion und Randelement

Das Lösungsgebiet wird in Dreieckselemente unterteilt (Bild 3.9). Jede Ansatzfunktionen ist nur in einem Element gültig (von null unterschiedlich) und hat in den anderen Elementen den Wert null. Die Knotenpunkte, in denen die Lösung gesucht wird, liegen in den Eckpunkten des Dreiecks. In anderen Punkten wird der Wert mit Hilfe der Ansatzfunktionen linear interpoliert:

$$\phi^{(e)}(r, z) = \mathbf{N} \cdot \phi = \sum_{i=1}^3 N_i^{(e)}(r, z) \phi_i^{(e)}. \quad (3.50)$$

Der Ansatz gilt für ein bestimmtes Element, was durch den oberen Index ( $e$ ) angedeutet ist. Jedes Element hat drei Knotenpunkte und drei Ansatzfunktionen  $N_i, N_j, N_k$ . Die Ansatzfunktionen werden durch geometrische Daten entsprechendem Dreieck folgendermaßen ausgedrückt [33]:

$$N_i = \frac{a_i + b_i r + c_i z}{2\Delta}, \quad (3.51)$$

wobei  $\Delta$  die Fläche des Dreiecks ist und

$$\begin{aligned} a_i &= r_j z_k - r_k z_j \\ b_i &= z_j - z_k \\ c_i &= r_k - r_j \end{aligned} \tag{3.52}$$

Die anderen Koeffizienten werden durch zyklisches Vertauschen der Indizes in der Reihenfolge  $i, j, k$  gewonnen. Die Funktion  $N_i$  hat den Wert 1 im Eckpunkt  $i$  und den Wert 0 in den beiden anderen Ecken (siehe Bild 3.9).

Für lineare Dreieckselemente lassen sich die Integrale der Ansatzfunktionen besonders einfach berechnen:

$$\int_{\Omega} N_1^a N_2^b N_3^c d\Omega = \frac{a!b!c!}{(a+b+c+2)} \cdot 2\Delta, \tag{3.53}$$

wobei  $a, b, c$  beliebige ganzzahlige Exponenten sind. Im Fall der Rotationssymmetrie werden Zylinderkoordinaten verwendet und es gilt:

$$dV = 2\pi r d\Omega.$$

Der prinzipielle Aufbau des FEM-Gleichungssystems sei an dem Beispiel einer Transportgleichung (Diffusionsgleichung) für die Größe  $\phi$  mit dem Quellterm  $Q$  in Zylinderkoordinaten erläutert:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + Q. \tag{3.54}$$

Die dazugehörigen Randbedingungen lauten:

$$\begin{aligned} \phi &= \phi_p \text{ an } \Gamma_A && \text{- Dirichlet - RB (RB der 1. Art)} \\ \frac{\partial \phi}{\partial r} n_r + \frac{\partial \phi}{\partial z} n_z + q + \alpha(\phi - \phi_a) &= 0 \text{ an } \Gamma_B && \text{- Robin'sche RB (RB der 3. Art)} \end{aligned}$$

$q, \alpha, \phi_{a,p}$  sind Konstanten. Aus der *Robin'schen* Randbedingung bekommt man die *Cauchy*-Randbedingung mit  $\alpha=0$ . Mit  $M$  als der Anzahl der Elemente ergibt sich folgende *Galerkin*-FEM-Formulierung

$$\sum_{e=1}^M \left[ \int_{\Omega^{(e)}} \left( \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial t} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial r} \right) - \frac{\partial^2 \tilde{\phi}}{\partial z^2} - Q \right) \cdot N_j r d\Omega^{(e)} \right] = 0. \tag{3.55}$$

Nach dem Einsetzen der Approximationsgleichung (3.50) und Anwendung des Green'schen Integralsatzes (3.49) folgt

$$\sum_{e=1}^M \left[ \left( \int_{\Omega^{(e)}} N_i N_j r d\Omega^{(e)} \right) \frac{\partial \phi_i^{(e)}}{\partial t} + \left( \int_{\Omega^{(e)}} \left( \frac{\partial N_i}{\partial r} \frac{\partial N_j}{\partial r} + \frac{\partial N_i}{\partial z} \frac{\partial N_j}{\partial z} \right) r d\Omega^{(e)} + \alpha \int_{\Gamma_B^{(e)}} N_i N_j r d\Gamma_B^{(e)} \right) \phi_i^{(e)} \right] = \sum_{e=1}^M \left[ \int_{\Omega^{(e)}} Q N_j r d\Omega^{(e)} + \int_{\Gamma_B^{(e)}} (q - \alpha \phi_a) N_j r d\Gamma_B^{(e)} + X_i \right] \quad (3.56)$$

$X_i$  enthält das Randintegral über die *Dirichlet*-Randbedingungen, die später gesondert betrachtet werden. Der Term  $(\partial\phi/\partial t)$  wird mit dem Zweipunkt-Differenzen-Schema (*Euler*-Verfahren) approximiert und ergibt sich zu

$$\frac{\partial \phi(t)}{\partial t} = \frac{\phi(t) - \phi(t - \Delta t)}{\Delta t} \quad \text{oder} \quad \left[ \frac{\partial \phi}{\partial t} \right]^{(n+1)} = \frac{\phi^{(n+1)} - \phi^{(n)}}{\Delta t}, \quad (3.57)$$

wobei  $\Delta t$  der Zeitschritt ist und  $(n)$  und  $(n+1)$  nacheinander folgende Zeitmomente sind. Es wird das *Implicite*-Scheme verwendet, d.h. alle Größen in anderen Gliedern sind vom Zeitmoment  $(n+1)$ . Das erlaubt größere Zeitinkremente zu verwenden. Die Gleichung (3.56) kann man in Matrix-Schreibweise kompakter darstellen:

$$\left( \mathbf{K}_{rr} + \mathbf{K}_{zz} + \alpha \mathbf{C} + \frac{\bar{\mathbf{K}}}{\Delta t} \right) \cdot \{\phi(t)\} = \frac{\bar{\mathbf{K}}}{\Delta t} \{\phi(t - \Delta t)\} + Q \bar{\mathbf{K}} - (q - \alpha \phi_a) \bar{\mathbf{C}} \quad (3.58)$$

oder noch kürzer

$$\mathbf{A} \cdot \phi = \mathbf{f}. \quad (3.59)$$

Die Systemmatrix  $\mathbf{A}$  stellt die Überlagerung sämtlicher  $(3 \times 3)$ -Elementenmatrizen dar, z. B:

$$\mathbf{K}_{rr} = \sum_{e=1}^M \mathbf{K}_{rr}^{(e)}.$$

$\phi$  ist der Lösungsvektor und  $\mathbf{f}$  ist der bekannte Vektor der "rechten Seite". Die Matrizen, die in der Gleichung (3.58) und allen HD-Gleichungen verwendet werden, sind folgende:

$$\mathbf{K}^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} N_i N_j \bar{r} d\Omega^{(e)} = \frac{\bar{r} \Delta}{12} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \quad (3.60)$$

$$\mathbf{K}_z^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} N_i \frac{\partial N_j}{\partial z} \bar{r} d\Omega^{(e)} = \frac{\bar{r}}{6} \begin{bmatrix} c_1 & c_1 & c_1 \\ c_2 & c_2 & c_2 \\ c_3 & c_3 & c_3 \end{bmatrix} \quad (3.61)$$

$$\mathbf{K}_r^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} N_i \frac{\partial N_j}{\partial r} \bar{r} d\Omega^{(e)} = \frac{\bar{r}}{6} \begin{bmatrix} b_1 & b_1 & b_1 \\ b_2 & b_2 & b_2 \\ b_3 & b_3 & b_3 \end{bmatrix} \quad (3.62)$$

$$\bar{\mathbf{K}}^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} N_i \bar{r} d\Omega^{(e)} = \frac{\bar{r} \Delta}{3} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (3.63)$$

$$\mathbf{K}_{rr}^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} \frac{\partial N_i}{\partial r} \frac{\partial N_j}{\partial r} \bar{r} d\Omega^{(e)} = \frac{\bar{r}}{4\Delta} \begin{bmatrix} b_1 b_1 & b_1 b_2 & b_1 b_3 \\ b_2 b_1 & b_2 b_2 & b_2 b_3 \\ b_3 b_1 & b_3 b_2 & b_3 b_3 \end{bmatrix} \quad (3.64)$$

$$\mathbf{K}_{zz}^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} \frac{\partial N_i}{\partial z} \frac{\partial N_j}{\partial z} \bar{r} d\Omega^{(e)} = \frac{\bar{r}}{4\Delta} \begin{bmatrix} c_1 c_1 & c_1 c_2 & c_1 c_3 \\ c_2 c_1 & c_2 c_2 & c_2 c_3 \\ c_3 c_1 & c_3 c_2 & c_3 c_3 \end{bmatrix} \quad (3.65)$$

$$\mathbf{C}^{(e)} = \int_{\Gamma^{(e)}} N_i N_j \bar{r} d\Gamma^{(e)} = \begin{cases} \frac{\bar{r}}{6} l_{12} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ \frac{\bar{r}}{6} l_{13} \begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \end{bmatrix} \\ \frac{\bar{r}}{6} l_{23} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix} \end{cases} \quad (3.66)$$

$$\bar{\mathbf{C}}^{(e)} = \int_{\Gamma^{(e)}} N_i \bar{r} d\Gamma^{(e)} = \begin{cases} \frac{\bar{r}}{2} l_{12} [1 & 1 & 0]^T \\ \frac{\bar{r}}{2} l_{13} [1 & 0 & 1]^T \\ \frac{\bar{r}}{2} l_{23} [0 & 1 & 1]^T \end{cases} \quad (3.67)$$

Dabei ist  $l_{12}$  die Länge der Randseite des Dreiecks (Bild 3.9).

### HD-Gleichungen in Matrix-Form

Unter Verwendung der oben definierten Matrizen kann man auch die FE-Analoga der HD-Gleichungen kompakt darstellen.

Wirbeltransportgleichung:

$$\left\{ \frac{\mathbf{K}}{\Delta t} + \mathbf{K}_{rr} + \mathbf{K}_{zz} + \frac{\mathbf{K}}{r^2} + u_r \mathbf{K}_r + u_z \mathbf{K}_z + \frac{\mathbf{C}}{2\delta} \right\} \cdot \{\zeta(t)\} = \frac{\mathbf{K} \zeta(t - \Delta t)}{\Delta t} - Gr \mathbf{K}_r T - \bar{\mathbf{C}} \left( 0.1136 Em \frac{\partial j^2}{\partial \tau} - \frac{Ma}{2\delta} \frac{\partial T}{\partial \tau} \right) \quad (3.68)$$

Gleichung für die Stromfunktion:

$$\left\{ \frac{\mathbf{K}_{rr}}{r^2} + \frac{\mathbf{K}_{zz}}{r^2} \right\} \cdot \{\psi(t)\} = \left\{ \frac{\mathbf{K}}{r} \psi(t - \Delta t) \right\} \quad (3.69)$$

Gleichung für die azimutale Geschwindigkeit:

$$\left\{ \frac{\mathbf{K}}{\Delta t} + \mathbf{K}_{rr} + \mathbf{K}_{zz} + \mathbf{K} + u_r \mathbf{K}_r + u_z \mathbf{K}_z + \frac{u_r}{r} \mathbf{K} \right\} \cdot \{u_\varphi(t)\} = \left\{ \frac{\mathbf{K} u_\varphi(t - \Delta t)}{\Delta t} \right\} \quad (3.70)$$

Gleichung für die Temperatur:

$$\left\{ \text{Pr} \left( \frac{\mathbf{K}}{\Delta t} + u_r \mathbf{K}_r + u_z \mathbf{K}_z \right) + \mathbf{K}_{rr} + \mathbf{K}_{zz} \right\} \cdot \{T(t)\} = \left\{ \frac{\text{Pr} \mathbf{K} T(t - \Delta t)}{\Delta t} + \bar{\mathbf{C}} \left( Em_{Liq} j^2 - Rd_{Liq} T^4 \right) \Big|_{\Gamma_4} \right\} \quad (3.71)$$

### Randbedingungen

Die *Dirichlet*-Randbedingungen (RB 1. Art) werden nach der Erstellung der Matrix implementiert. In  $\mathbf{f}$  wird ein entsprechender Randwert eingetragen, in der Matrix  $\mathbf{A}$  werden alle Elemente der entsprechenden Reihe gleich null und Hauptdiagonalelement gleich eins gesetzt. Für die Temperatur und die azimutale Geschwindigkeit werden fest vorgegebene Werte eingesetzt.

Für den Rotor der Geschwindigkeit wird das numerischer Analogon der Gleichung (3.40) als Haftbedingung an den Grenzen 3 und 6 implementiert. Dies geschieht ähnlich wie in [35] beschrieben. Der Abstand  $n$  ist gleich der Höhe des entsprechenden Randdreieckes (Bild 3.9).

Die *Robin*-Randbedingungen (RB 3. Art) an der freien Oberfläche für den Rotor der Geschwindigkeit sind schon in der Gleichung (3.68) integriert.

### Aufbau des Gleichungssystems

Bei der FEM ist die Systemmatrix nicht voll besetzt - die Koeffizienten sind nur für wenige Nachbarelemente von null verschieden. Da für die Lösung des Systems nur die von null unterschiedlichen Koeffizienten benötigt werden, ist eine erhebliche Reduzierung des Speicherplatzbedarfs möglich. Hier werden für jeden Knotenpunkt 9 von null unterschiedliche Koeffizienten vorgesehen. Es wird schon bei der Netzgenerierung gewährleistet, daß jeder Punkt 8 oder weniger Nachbarpunkte hat. Die Matrix des Systems  $[A]$  wird in zwei Zeilen aufgeteilt - in Diagonalelemente  $Diag[1..Nv]$  und Nebenelemente  $Mas[1..Nv,1..8]$ . Für die Zuordnung der Nebenelemente ist eine Verbindungsmatrix  $sait[1..Nv,1..8]$  notwendig. Jetzt kann man das Gleichungssystem folgendermaßen darstellen:

$$Diag[i] \cdot Atb[i] + \sum_{l=1}^8 Mas[i, sait[i, l]] \cdot Atb[sait[i, l]] = f[i], \quad i = 1..Nv.$$

Dabei ist  $Nv$  die Gesamtanzahl der Knoten und  $Atb$  der Lösungsvektor.

### Numerische Lösung

Am Anfang des Berechnungsvorgangs werden die zeitlich konstanten Teile der Matrizen, z.B. die linke Seite der Gleichung (3.69), berechnet und gespeichert. In jedem Zeitschritt werden die zeitlich veränderlichen Teile der Matrizen und der Vektor der "rechten Seite"  $f$  berechnet und zum konstanten Teil addiert. Danach erfolgt die Berechnung der entsprechenden Gleichungen. Als erste wird die Gleichung der Stromfunktion  $\psi$  gelöst, danach die Gleichung der Temperatur, die Gleichung der

azimutalen Geschwindigkeit und die Wirbeltransportgleichung. Für die Lösung wird die iterative Methode, die sogenannte Methode der Überrelaxation, benutzt. Der Relaxationsfaktor  $\omega$  wird zwischen 1 und 2 gewählt. In einigen Fällen, insbesondere für die Berechnung der Wirbeltransportgleichung, ist es sinnvoll, den Faktor  $\omega$  kleiner als 1 wählen. Dann wird das Relaxationsverfahren Unterrelaxation genannt. Die Gleichung wird solange iteriert, bis ein bestimmtes Konvergenzkriterium erfüllt ist. Für das Konvergenzkriterium  $err$  gilt

$$err < \frac{\max|\phi^{(n+1)} - \phi^{(n)}|}{\phi^{(n+1)}}, \text{ wobei } 10^{-6} < err < 10^{-4}.$$

Wenn eine stationäre Lösung zu erwarten ist, kann  $err$  größer sein. Wenn die genaue Zeitabhängigkeit der Strömung berechnet werden muß, sollte  $err$  kleiner sein.

### 3.4.4 Testberechnungen

Um das entwickelte Programm für Strömungsberechnungen zu testen, wurden

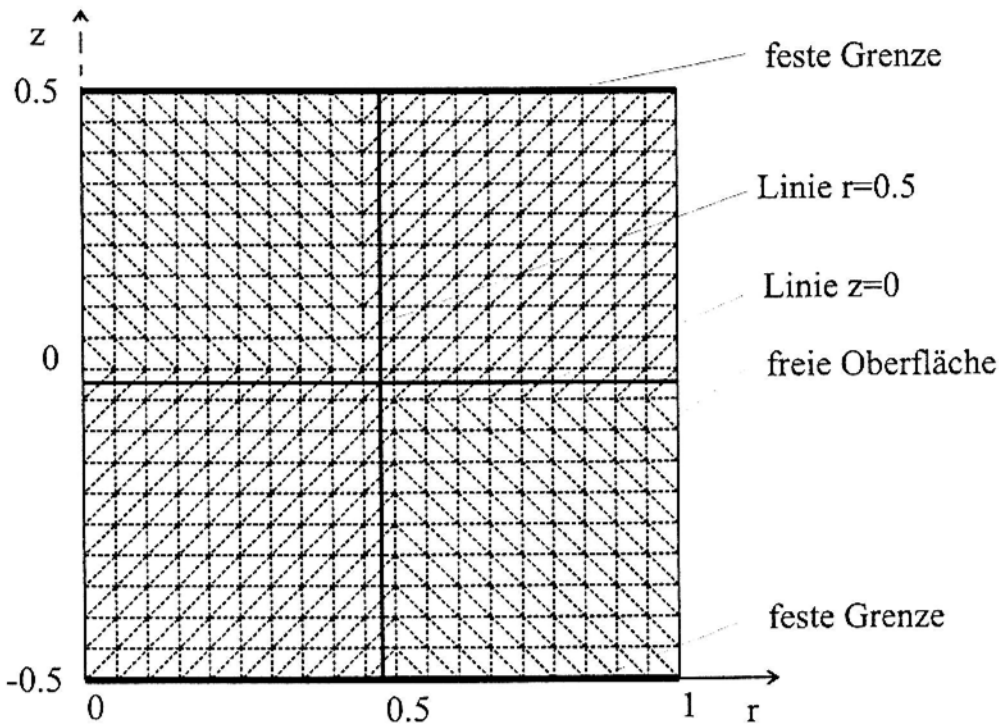


Bild 3.10: Berechnungsgebiet, FE Netz mit 20x20 Punkte, Linien  $r=0,5$ ,  $z=0$  und Randbedingungen für Vergleichsberechnung mit FLUENT.

Vergleichsberechnungen mit dem kommerziellen Programmpaket FLUENT von Fluent Inc. durchgeführt. FLUENT ist ein umfangreiches Programm, mit dem Strömungen verschiedener Art berechnet werden können [36]. Die Basis dieses Programms bildet die Methode der Finiten Volumen. Es können zwei- und dreidimensionale Probleme in kartesischen und zylindrischen Koordinatensystemen berechnet werden. Ein laminares und mehrere turbulente Strömungsmodelle stehen zur Verfügung.

Je zwei Vergleichsberechnungen wurden durchgeführt. Das Berechnungsgebiet ist ein Zylinder mit dem Radius 1 der und Höhe 1 (Bild 3.10). Die Stirnflächen sind fest (Haftbedingung), die Mantelfläche ist eine freie Oberfläche (keine Haftbedingung).

In einer ersten Berechnung ist der thermische Auftrieb die Bewegungsursache. An der freien Oberfläche ist ein konstanter Wärmefluß mit dem dimensionslosen Wert 1 angegeben. Die obere und untere Oberfläche haben die gleiche konstante Temperatur. Für die dimensionslosen Parameter gilt:  $Pr=1$  und  $Gr=1e4$ , alle anderen Parameter

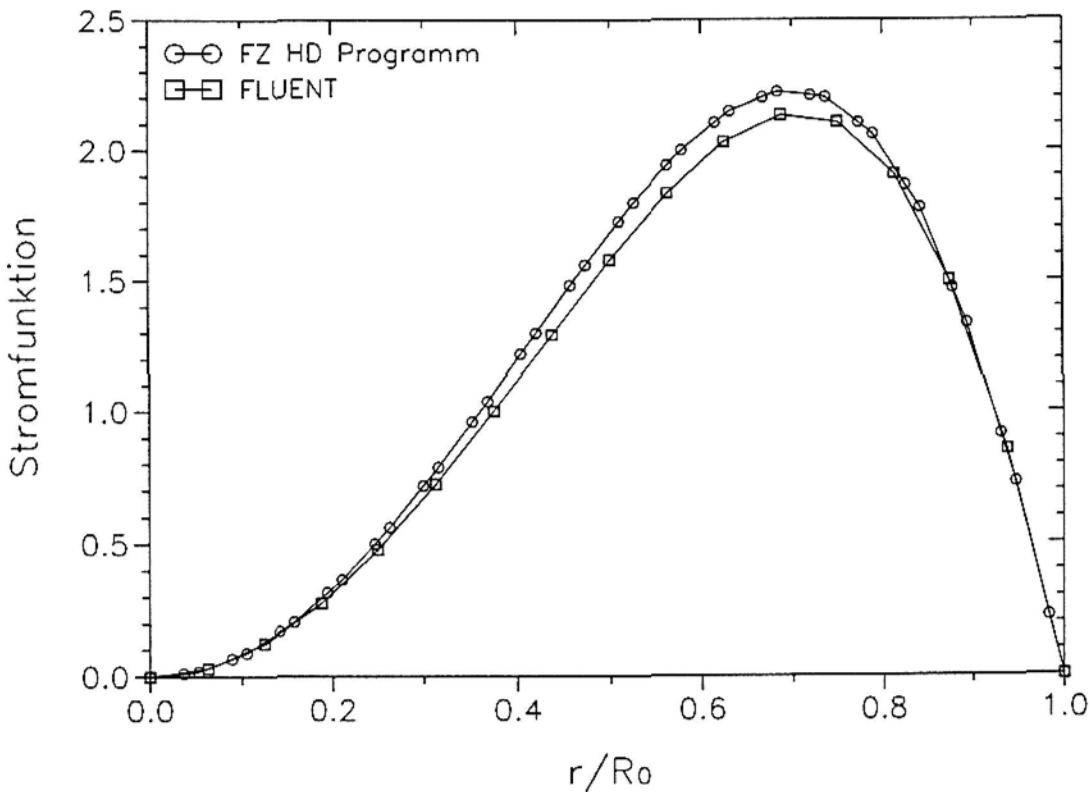


Bild 3.11: Verteilung der Stromfunktion ( $-\psi$ ) entlang der Linie  $z=0$ ; Strömungsquelle - thermischer Auftrieb.

sind gleich null. Die erwärmte Flüssigkeit strömt entlang der freien Oberfläche nach oben und bildet einen fast symmetrischen Wirbel. Die berechnete Verteilung der Stromfunktion an der Linie  $z=0$  ist im Bild 3.11 dargestellt. Die Lage des Maximums stimmt gut überein, die Maximalwerte unterscheiden sich um weniger als 5%. Bei der Berechnung der nichtlinearen Strömungsgleichungen mit unterschiedlichen Methoden ist das eine sehr gute Übereinstimmung.

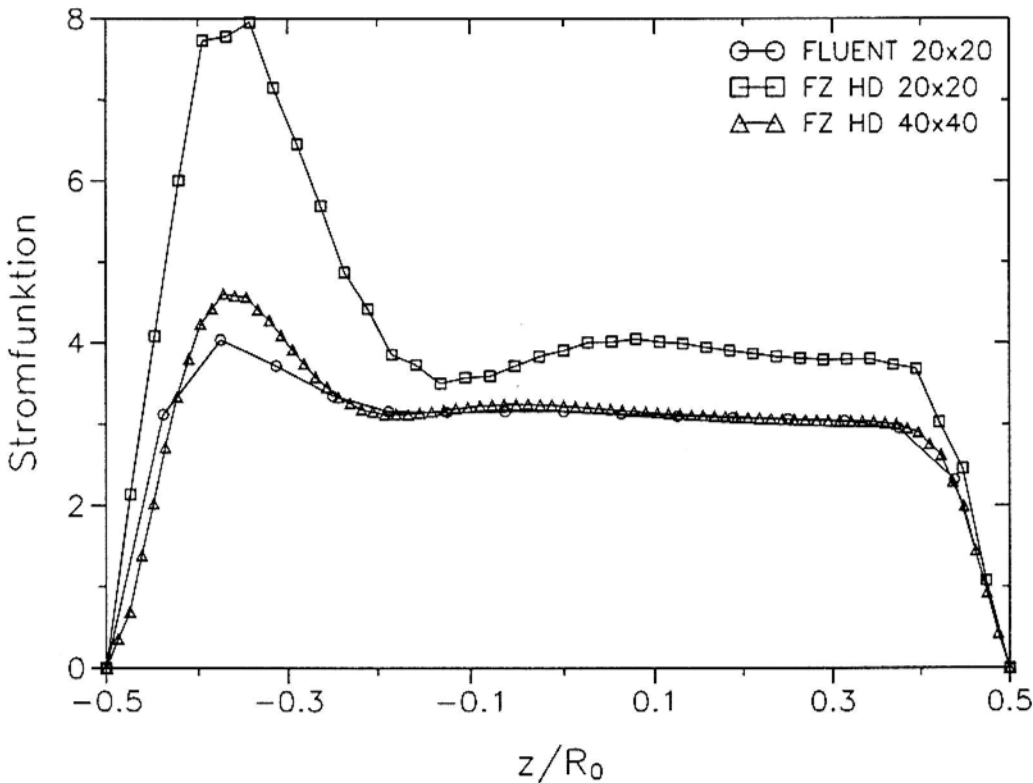


Bild 3.12: Verteilung der Stromfunktion ( $\psi$ ) entlang der Linie  $r=0.5$ ; Strömungsursache - Rotationskräfte.

In einer zweiten Berechnung wird die Strömung von Rotationskräften erzeugt. Die obere Fläche des Zylinders dreht sich mit einer konstanten dimensionslosen Geschwindigkeit  $Re=1000$ . An den festen Grenzen bilden sich die *Ekman'schen* Grenzschichten mit hohen Geschwindigkeiten aus. Im Bild 3.12 wird die Verteilung der Stromfunktion entlang der Linie  $r=0.5$  dargestellt. Wegen der ausgeprägten Grenzschichten sind die Berechnungen ungenauer und die Übereinstimmung bei 20x20 Punkte ist nicht besonders gut. Die Berechnung mit dem Gitternetz 40x40 stimmt viel besser mit den Ergebnissen des kommerziellen Pakets FLUENT überein. Dies ist auf die Tatsache zurückzuführen, daß die Randbedingungen in FLUENT

anders implementiert werden. Das letzte Element am Rand ist um den Faktor zwei kleiner, deshalb ist die Genauigkeit bei großen Geschwindigkeitsgradienten an der Grenze bei FLUENT höher.

Mit dem HD-Programm können auch instationäre Strömungen berechnet werden. Es ist vorgesehen, mögliche Instabilitäten der Schmelzenströmung zu untersuchen. Deshalb ist es wichtig, das zeitliche Verhalten des Programms zu überprüfen. Eine Möglichkeit der Überprüfung bietet die Konfiguration mit thermischem Auftrieb an. In einer horizontalen flüssigen Schicht, in der die Temperatur unten höher als oben ist, entsteht die Strömung in Form von sogenannten *Benard*-Zellen. Solche Strömungsformen sind in vielen Arbeiten theoretisch und experimentell untersucht worden. In Abhängigkeit von dem Temperaturgradienten entstehen in der Flüssigkeit unterschiedliche Konvektionsregime. Bei kleinen Temperaturgradienten findet keine Konvektion statt, bei der Erhöhung des Temperaturgradienten entsteht eine laminare Konvektion, die bei noch höheren Temperaturen in eine oszillierende Konvektion (*Rayleigh-Benard* Instabilität) und schließlich in eine turbulente Konvektion übergeht. Das Verhältnis des thermischen Auftriebs und der viskosen Kräfte wird durch die dimensionslose Kennzahl - *Rayleigh*-Zahl  $Ra$  charakterisiert. Der Übergang von der ruhenden Flüssigkeit zu einer stationären Konvektion wird für eine unendlich lange

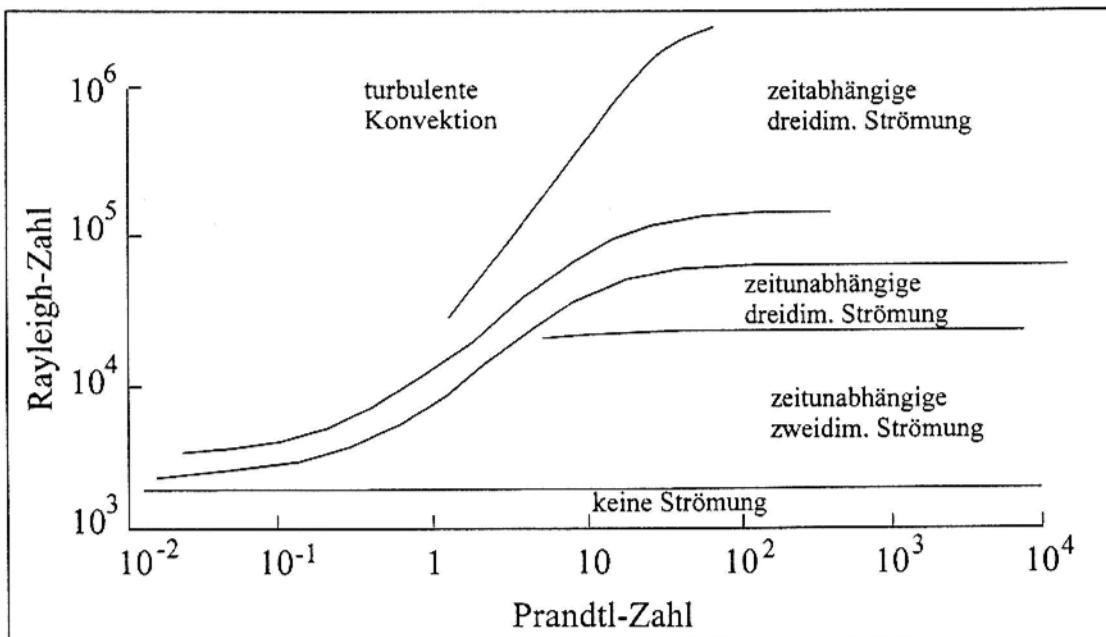


Bild 3.13: Art der Strömung in Abhängigkeit von der Rayleigh- und Prandtl-Zahl für die Benard-Konfiguration, nach Krishnamurti [37]

Schicht (aspect ratio  $\infty$ ) theoretisch zu  $Ra=1708$  bestimmt [31]. In [37] sind Konvektionsregime bei unterschiedlichen *Prandtl*- und *Rayleigh*-Zahlen untersucht worden. Im Bild 3.13 ist das Diagramm nach [37] dargestellt. Bei größeren *Prandtl*-Zahlen ist der Bereich der zeitabhängigen Konvektion relativ breit, bei  $Pr < 1$  geht die Konvektion jedoch fast direkt in turbulente Konvektion über.

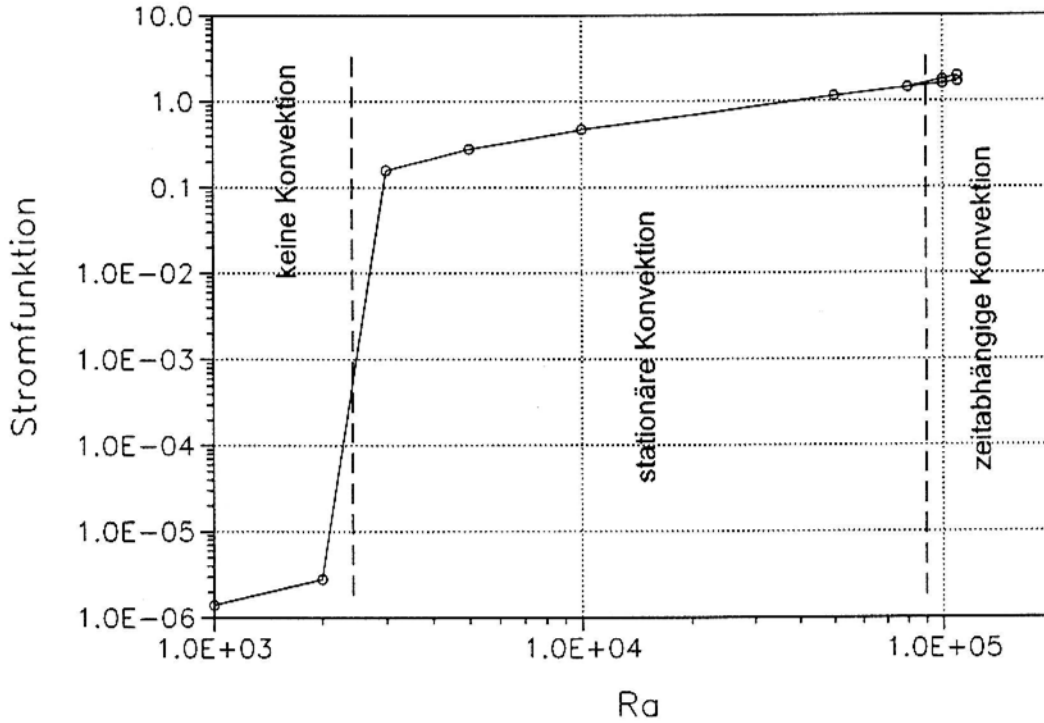


Bild 3.14: Wert der Stromfunktion abhängig von der Rayleigh-Zahl bei  $Pr=10$  und aspect ratio 2 in Benard-Konfiguration.

Für die Berechnungen wird ein zylindrisches Gebiet wie vorher verwendet (siehe Bild 3.10). Der aspect ratio des Gebietes ist 2. Die *Prandtl*-Zahl  $Pr$  ist 10. Im Bild 3.14 sind die Werte der Stromfunktion abhängig von der *Rayleigh*-Zahl dargestellt. Der Übergang zur laminaren Konvektion findet zwischen  $Ra=2000$  und  $Ra=3000$  statt. Der Wert ist höher als 1708, weil auch der aspect ratio kleiner ist. In [37] findet dieser Übergang für den aspect ratio 1 bei 4500 statt, also liegt der berechnete Wert zwischen beiden Referenzen und die Übereinstimmung ist gut. Der Übergang zu zeitabhängiger Konvektion findet zwischen  $Ra=9e4$  und  $Ra=1e5$  statt. In Experimenten [37] liegt der Wert etwas niedriger. Wieder kann man wegen der unterschiedlichen aspect ratio die Übereinstimmung als gut bezeichnen.

Die Berechnungen wurden auch bei  $Pr=1$  gemacht. Dabei wurde kein Regime mit instationärer Konvektion beobachtet. Im turbulenten Gebiet war die berechnete Strömung stationär. In Experimenten bei  $Pr=1$  [37] wurde dementsprechend auch kein Gebiet mit oszillierender Konvektion beobachtet - der Übergang von stationärer zu turbulenter Konvektion ist sehr rasch.

### 3.5 Kopplung aller einzelnen Modelle

Die Beschreibung aller physikalischen Prozesse ist nur ein Teil der gesamten Modellbildung und der Berechnungsalgorithmen. Die gegenseitige Beeinflussung von verschiedenen Feldern und Phasengrenzen ist sehr stark ausgeprägt. Auf den ersten Blick ist es schwer zu beurteilen, welche Phänomene beim FZ-Prozess entscheidend sind. Nur nach der Berechnung der einzelnen Felder und Phasengrenzen ist es möglich, die wichtigsten Wechselwirkungen einzuordnen und die Kopplung aller Modelle durchzuführen.

Der FZ-Prozess stellt ein elektromagnetisch-thermisch-hydrodynamisch gekoppeltes Problem dar. Im Bild 3.15 sind die Wechselwirkungen im FZ-System in einem Diagramm mit Pfeilen gekennzeichnet. Die Stärke des Einflusses wird mit der Größe des Pfeiles charakterisiert. Die Form des Induktors und die Stromstärke bestimmen das EM-Feld und dadurch auch die Verteilung der an den Si-Oberflächen induzierten Wirbelströme. Die Wärmequellen des elektrischen Stromes bestimmen das Temperaturfeld, wovon die Form der Phasengrenzen 2, 3, 6 (Bild 3.1) überwiegend abhängig ist. Die Form der fest/flüssig Grenzen 3 und 6 ist außerdem stark von der Ziehgeschwindigkeit abhängig. Die EM-Kraft an der freien Oberfläche 4 beeinflusst leicht die Form der Oberfläche und verursacht die Schmelzenströmung. Die Form der freien Oberfläche ist hauptsächlich durch die Schwer- und Oberflächenspannungskraft sowie durch die Position der Tripelpunkte bedingt. Die Lage der Tripelpunkte ist fast ausschließlich von dem Temperaturfeld oder der Position der Phasengrenzen 3 und 6 abhängig. Die Konvektion in der Schmelze ist außer von der Auftriebskraft und EM-Kraft noch stark von der Rotation des Kristalls und des Vorratsstabs abhängig. Die

Strömung beeinflusst das Temperaturfeld und dadurch auch die Form der Phasengrenzen.

Die thermischen Spannungen und die Verteilung des elektrischen Widerstandes werden in Rahmen dieser Arbeit nicht analysiert. Es wurde jedoch auf Basis der berechneten Temperaturfelder die Berechnung der thermischen Spannungen [38] durchgeführt (Modelle sind im [39] beschrieben) und auf Basis der Strömungsberechnungen wurden die Widerstandsverteilungen von Muiznieks [40] berechnet. Die Spannungen, die die Entwicklung der Dislokationen oder sogar den Zusammenbruch von Monokristallen verursachen, sind vom Temperaturfeld und der Form der Phasengrenze  $\delta$  abhängig. Die radiale Widerstandsverteilung, die eines der wichtigsten Merkmale für die Scheibenqualität ist, hängt hauptsächlich von der Strömung in der Schmelze ab.

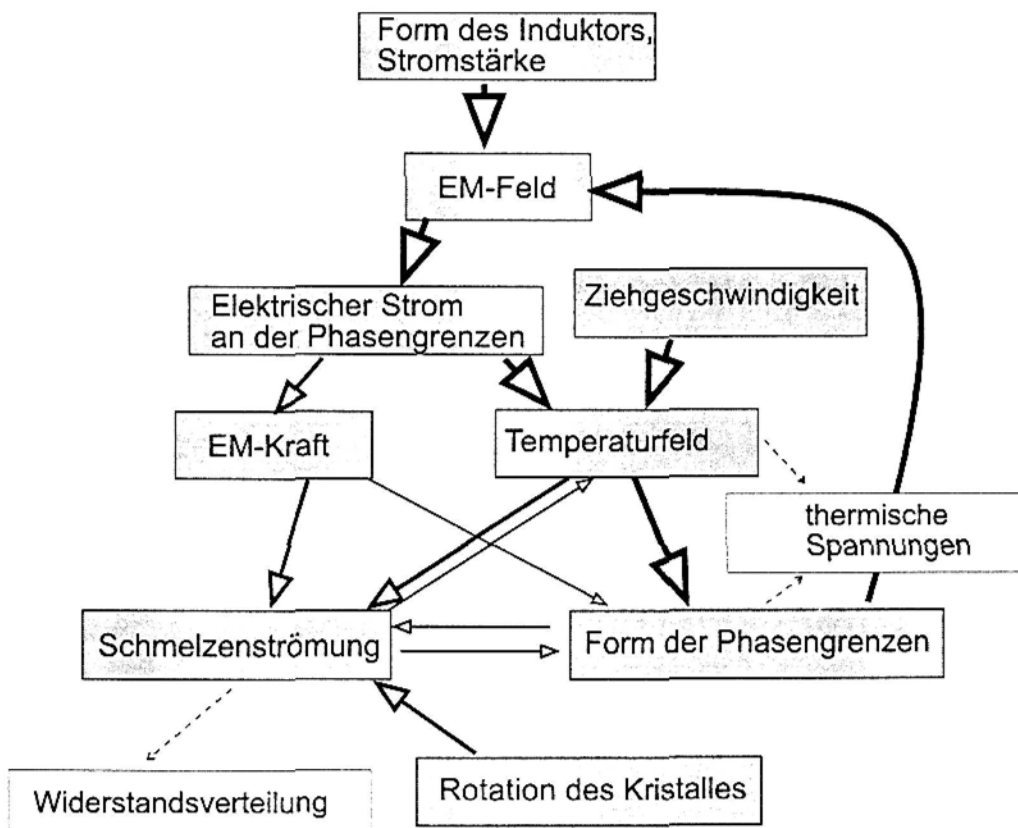


Bild 3.15: Schema der wichtigsten Einflüsse und Wechselwirkungen der einzelnen Felder und Parameter bei der FZ-Züchtung

Die Kopplung der einzelnen Berechnungen wird iterativ durchgeführt. Das Blockdiagramm der Berechnungsschritte ist im Bild 3.16 dargestellt. Die gesamte Berechnung ist in mehrere Schritte aufgeteilt:

- 0) Anfangsform der Phasengrenzen wird eingegeben. Es wird angenommen, daß keine Konvektion in der Schmelzzone besteht und die Wärme nur aufgrund der Wärmeleitung übertragen wird. Für Silizium mit kleiner *Prandtl*-Zahl ( $Pr=0.013$ ) ist diese Annahme auch physikalisch korrekt.
- 1) Das EM-Feld wird mit der BE-Methode berechnet. Daraus lassen sich die EM-Kräfte an der freien Oberfläche 4 und die Wärmequellen auf den äußeren Silizium-Oberflächen 1, 2, 4, 5 berechnen.
- 2) Das Temperaturfeld im Vorratsstab, im Kristall und in der Schmelzzone wird berechnet. Die Berechnung erfolgt iterativ. Da der Zusammenhang zwischen Wärmefluß und Temperatur in der Randbedingung (3.25) ausgeprägt nichtlinear ist, sind einige äußere Iterationsschritte mit Neuberechneten Randbedingungen im Anfangsstadium notwendig.
- 3) Phasengrenzen werden gemäß den Gleichgewichtsbedingungen verschoben.
  - Die freie Oberfläche wird ausgehend vom unteren Tripelpunkt ( $R_C, Z_C$ ) mit dem Runge-Kutta Schema IV.-Ordnung integriert. Der Parameter  $Z'$  wird im Iterationsprozess so ausgewählt, daß die Linie durch den oberen Tripelpunkt läuft. Die Lage der Endpunkte wird nicht geändert.
  - Die thermisch bedingten Phasengrenzen 2, 3, 6 werden abhängig von der Wärmebilanz im entsprechenden Element verschoben. Die Endpunkte der Linien werden nicht festgehalten sondern gemäß der Bilanz im letzten Element auch bewegt. Die Elemente werden entweder mit einem konstanten Schritt  $\mp h$  oder proportional zu der Abweichung verschoben. In der Endphase der Berechnungen wird der Schritt kleiner.
- 4) Die FE Netze werden für die Neuberechneten Gebiete adaptiert.

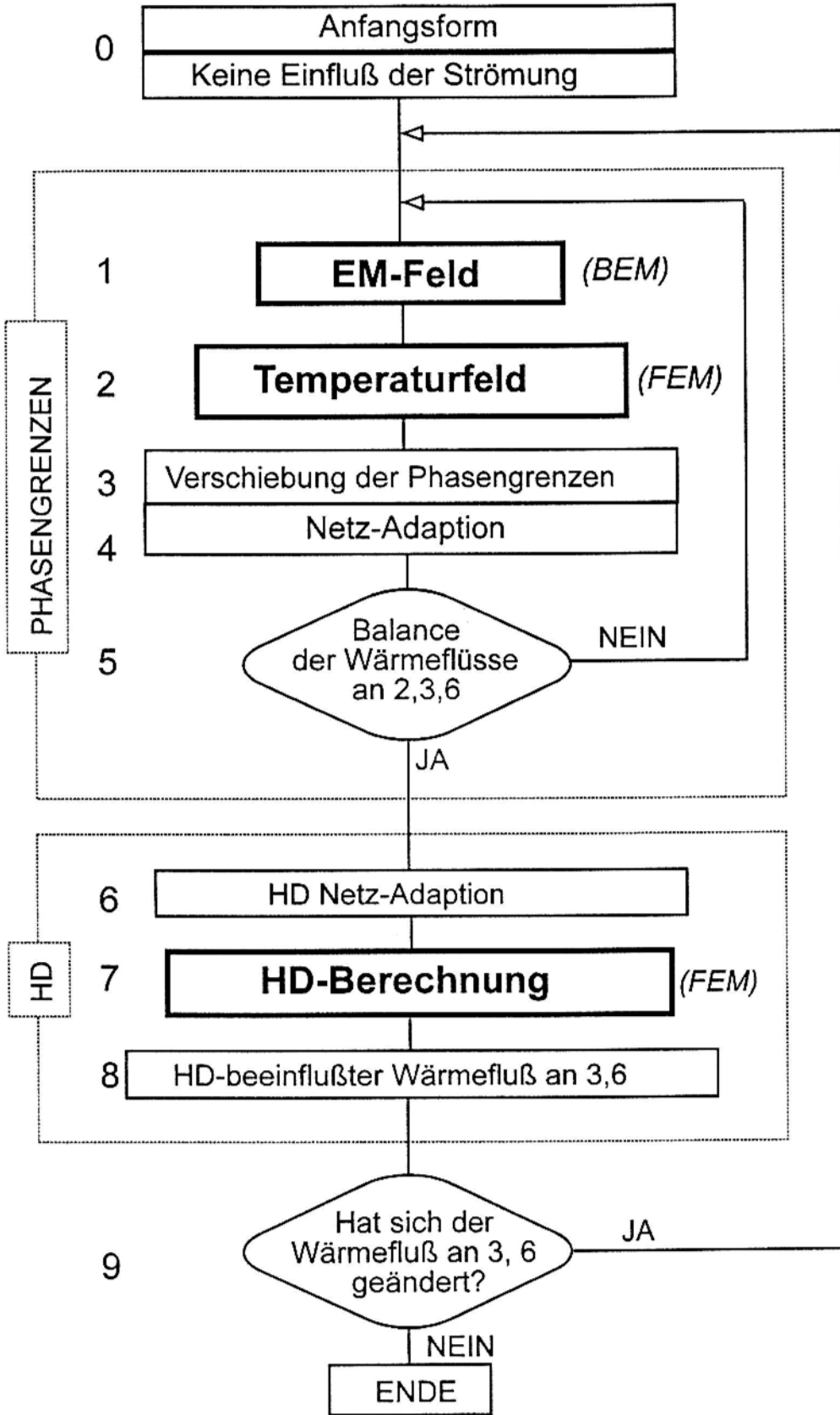


Bild 3.16: Blockdiagramm für die Kopplung einzelner Modelle.

- 5) Die Schritte 1 bis 3 werden solange durchgeführt, bis die Gleichgewichtsbedingungen an allen Oberflächen erfüllt sind. Die Berechnungen erfolgen interaktiv mit einer visuellen Kontrolle der Form der Phasengrenzen und der Disbalance in allen Elementen. Die Schrittgrößen werden manuell geändert. Die Berechnung der Form der Phasengrenzen dauert auf einem Pentium PC in Abhängigkeit von der Anfangsform bis zu einigen Stunden.
- 6) Für die Berechnung der Schmelzenströmung ist ein feineres FE-Netz notwendig als für die Berechnung des Temperaturfeldes für die Phasengrenzen. Jedes Randelement wird in 2 Teile unterteilt und es wird entweder ein vorhandenes FE-Netz adaptiert oder ein neues generiert.
- 7) Die Strömung und das Temperaturfeld in dem Schmelzengebiet werden berechnet. Die Gleichungen werden zeitabhängig so lange gelöst, bis eine stationäre oder quasi-stationäre (periodische) Lösung gefunden wird. Eine Berechnung mit einem FE-Netz von 4000 Punkte kann auf einem Pentium-PC bis zu einer Woche dauern. Auf leistungsfähigeren Rechner (z. B. Workstations) ist die Rechenzeit entsprechend kürzer.
- 8) Der Wärmefluß an den Phasengrenzen 3 und 6 wird berechnet. Wenn die Lösung instationär ist, wird der zeitliche Mittelwert verwendet. Der Unterschied zwischen den Wärmeflüssen mit (Punkt 8) und ohne (Punkt 2) Konvektion wird berechnet. Geht die Differenz gegen null, ist das gekoppelte Gesamtsystem gelöst. Wenn nicht, werden die Schritte 1 bis 8 wiederholt, wobei die Differenz zusätzlich zu den Gleichgewichtsbedingungen (3.27)-(3.29) addiert wird. Meistens sind nur 2 bis 3 Iterationen notwendig. Außerdem wird die Strömung von der Form der Phasengrenzen nicht besonders stark beeinflusst und nur kurzzeitige Strömungsberechnungen sind in den nächsten Iterationsschritten notwendig.

Die Kopplung zwischen dem BE-Modell und FE-Modell erfolgt dadurch, daß die Boundary Elemente mit der Randlinien der Finiten Elemente übereinstimmen. Die mit der BE berechneten Stromwerte werden in das Randintegral der Temperaturgleichung (3.71) eingebunden.

## 4. Ergebnisse und Diskussion

Obwohl alle Felder im System stark gekoppelt sind, ist eine Unterteilung der Berechnungen und Analyse der Ergebnisse in zwei große Teile möglich - Phasengrenzen und Schmelzenströmung. Wegen der kleinen *Prandtl*-Zahl ( $Pr_{Si} = 0.013$ ) beeinflusst die Konvektion das Temperaturfeld nicht sehr stark und man kann in erster Näherung die Form der Phasengrenzen ohne aufwendige Strömungsberechnungen untersuchen.

Bei der Untersuchung der Phasengrenzen geht es hauptsächlich um die Möglichkeit der Prozeßrealisierung. Die Begrenzungen können rein physikalisch, konstruktionstechnisch oder erfahrungsgemäß sein. Die Vergrößerung des Kristalldurchmessers und die Verkleinerung der Durchbiegung der Kristallisationsfront sind typische Probleme bei der Entwicklung des Prozesses.

Tab. 3: Physikalische Eigenschaften des Siliziums

Parameter		Wert	Einheit
Dichte der Schmelze	$\rho$	2530	$\text{kg/m}^3$
spez. Wärmekapazität	$c$	1000	$\text{J}/(\text{kg}\cdot\text{K})$
Volumen-			
ausdehnungskoeffizient	$\beta$	$1.5 \cdot 10^{-4}$	$\text{K}^{-1}$
Kinematische Viskosität	$\nu$	$3.4 \cdot 10^{-7}$	$\text{m}^2/\text{s}$
Wärmeleitfähigkeit	$\lambda$		
- Kristall		$98.9 - 0.0943 \cdot T + 2.89 \cdot 10^{-5} \cdot T^2$	$\text{W}/(\text{m}\cdot\text{K})$
- Schmelze		67.0	$\text{W}/(\text{m}\cdot\text{K})$
Elektrische Leitfähigkeit	$\sigma$		
- Kristall		$5 \cdot 10^4$	$\text{S}/\text{m}$
- Schmelze		$1.2 \cdot 10^6$	$\text{S}/\text{m}$
Schmelztemperatur	$T_0$	1685	$\text{K}$
Kristallisationswärme	$\kappa$	$1.8 \cdot 10^6$	$\text{J}/\text{kg}$
Emissionsgrad	$\varepsilon$		
- Kristall		0.64 ( $T < 1000 \text{ K}$ ) $0.9 - 2.6 \cdot 10^{-4} \cdot T$ ( $T > 1000 \text{ K}$ )	
- Schmelze		0.27	
Oberflächenspannung	$\gamma$	0.74	$\text{N}/\text{m}$
Oberflächenspannungs-			
koeffizient	$\partial\gamma/\partial T$	$-2.8 \cdot 10^{-4}$	$\text{N}/(\text{m}\cdot\text{K})$

Tab. 4: In verschiedenen Veröffentlichungen verwendeten Materialeigenschaften des Siliziums

Eigenschaft \ Veröffentlichung	[17]	[8]	[13]	[41]	[42]	[43]	[44]
Wärmeleitfähigkeit, W/m·K (fl.) (fest)	46.6	64 22	43.0	67	60	42.9 21.6	67 21.6
Wärmekapazität, J/kg·K (fl.) (fest)	1000	1059 1038	1049	911			1037 1037
Schmelztemperatur, K	1685	1683	1688	1685		1685	1685
Kristallisationswärme, 10 <sup>6</sup> J/kg		1.803	1.803			1.64	1.805
Dichte, kg/m <sup>3</sup> (fl.) (fest)	2530	2550 2330	2440	2500		2520	2530 2300
Kinem. Viskosität, 10 <sup>-7</sup> m <sup>2</sup> /s	3.0	2.8	3.26	3	3.00	2.8	3.5; 10.6
Volumenausdehnungskoeff, 10 <sup>-4</sup> K <sup>-1</sup> (fl.)	1.41	1.0		0.141	1.41	1.43; 14.3	
Elektrische Leitfähigkeit, 10 <sup>6</sup> S/m (fl.) (fest)	1			1.2			1.23 0.042; 0.059
Emissionsgrad (fl.) (fest)	0.26	0.3 0.7	0.5	0.1	0.318	0.3 0.58	0.27 0.46
Oberflächenspannung, N/m	0.736	0.72					0.72
Oberflächenspannungskoeff., 10 <sup>-4</sup> N/m·K	-2.79 -1.04	-4.3	-1				

Die Schmelzenströmung bestimmt die Dotierstoffverteilung an der Kristallisationsfront und somit die Verteilung des elektrischen Widerstands des gezüchteten Kristalls. Mit den Berechnungen sollen Einflußmöglichkeiten auf die Strömung gefunden werden, um sie kontrollieren zu können. Wenn man weiterhin den Zusammenhang zwischen der Strömung und der Widerstandsverteilung kennt, kann man letztere gezielt verbessern.

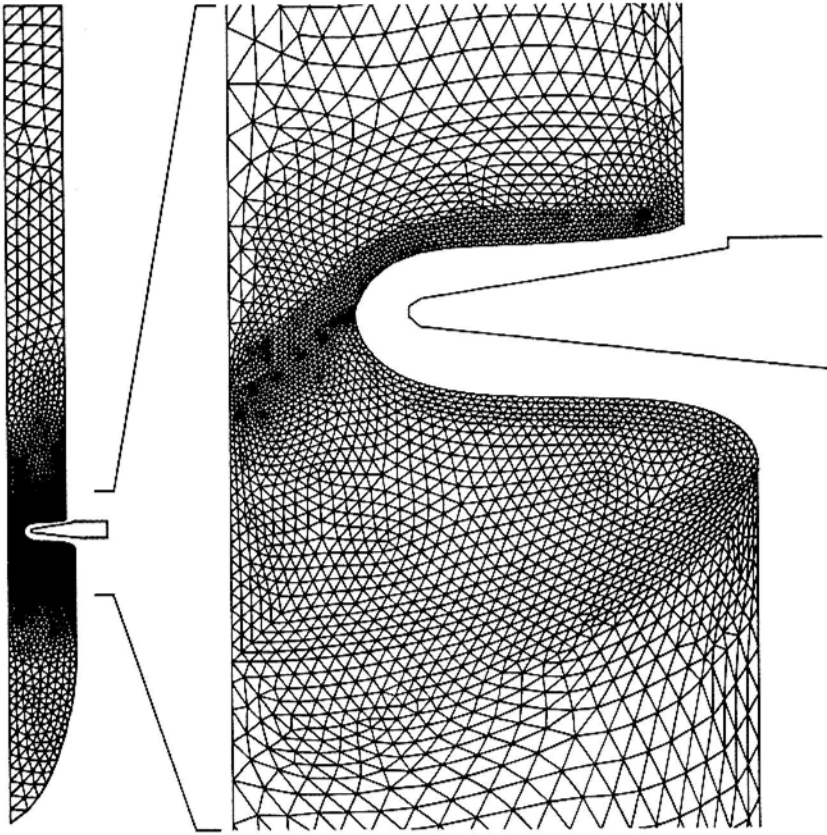
## 4.1 Vergleich mit dem Experiment

Als Basis für den Vergleich mit Experimenten und folgenden Parameterstudien wurde eine typische Ziehanlage für 4-Zoll Kristalle des Instituts für Kristallzüchtung, Berlin, gewählt. Zur Zeit haben 4-Zoll unter den FZ-Kristallen den größten Anteil auf dem Weltmarkt (neben 3-Zoll, 5-Zoll und 6-Zoll Kristallen), damit entsprechen die experimentellen Parameter den industriellen Parametern.

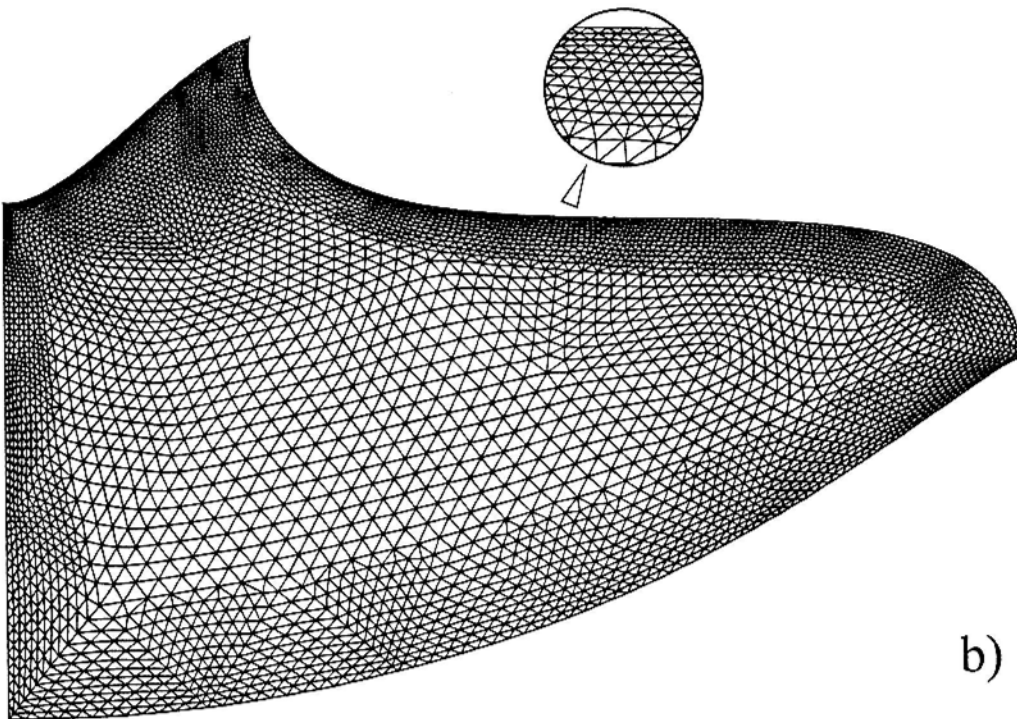
Die verwendeten physikalischen Eigenschaften des Siliziums sind in Tab. 3 zusammengefaßt. Nicht alle für die Simulation benötigten Eigenschaften des Siliziums sind eindeutig bekannt. In verschiedenen Arbeiten sind oft unterschiedliche Werte angegeben. In Tab. 4 sind Werte aus einigen Veröffentlichungen und Handbüchern enthalten. Man sieht, daß die Viskosität und die Temperaturabhängigkeit des Oberflächenspannungskoeffizienten sich sehr oft unterscheiden. Obwohl Silizium einer der am besten untersuchten Stoffe der Welt ist, sind die gemessenen Daten oft sehr alt und manchmal existiert nur ein Experiment [44]. In letzter Zeit, in der die Wichtigkeit der Simulation zunimmt, werden neue Experimente durchgeführt und damit neue, genauere Werte für die Materialeigenschaften erfaßt [45], [46].

In der Basiskonfiguration beträgt der Durchmesser des Kristalls 103 mm und der des Vorratsstabs 89 mm, die Ziehgeschwindigkeit ist 3.3 mm/min, der Kristall ist 195 mm und der Vorratsstab 390 mm lang. Die Rotationsgeschwindigkeit des Kristalls beträgt 5 U/min und die des Vorratsstabs 20 U/min in umgekehrter Richtung. Der Induktorstrom  $I_0$  wurde mit 945 A ist so gewählt, daß der untere Tripelpunkt sich 10.3 mm unter dem Induktor befindet (siehe Bild 3.1), was einem im Experiment gemessenen Abstand entspricht. Die entsprechenden dimensionslosen Parameter sind:

$$\begin{aligned}
 Pe_F &= 0.39, & Pe_C &= 0.32, & Bi_F &= 0.28, & Bi_C &= 0.28, & Bi_M &= 0.16, \\
 Qe_F &= 2.07, & Qe_C &= 2.07, & Qe_M &= 1.45, & Cr_F &= 0.34, & Cr_C &= 0.41, \\
 Fe &= 0.18, & Sg &= 0.012, & Gr &= 2.7e9, & Pr &= 0.013, & Re_F &= -16.7 \cdot 10^3, \\
 Re_C &= 4.09 \cdot 10^3, & Em &= 1.9 \cdot 10^9, & Ma &= 3.0 \cdot 10^7.
 \end{aligned}$$

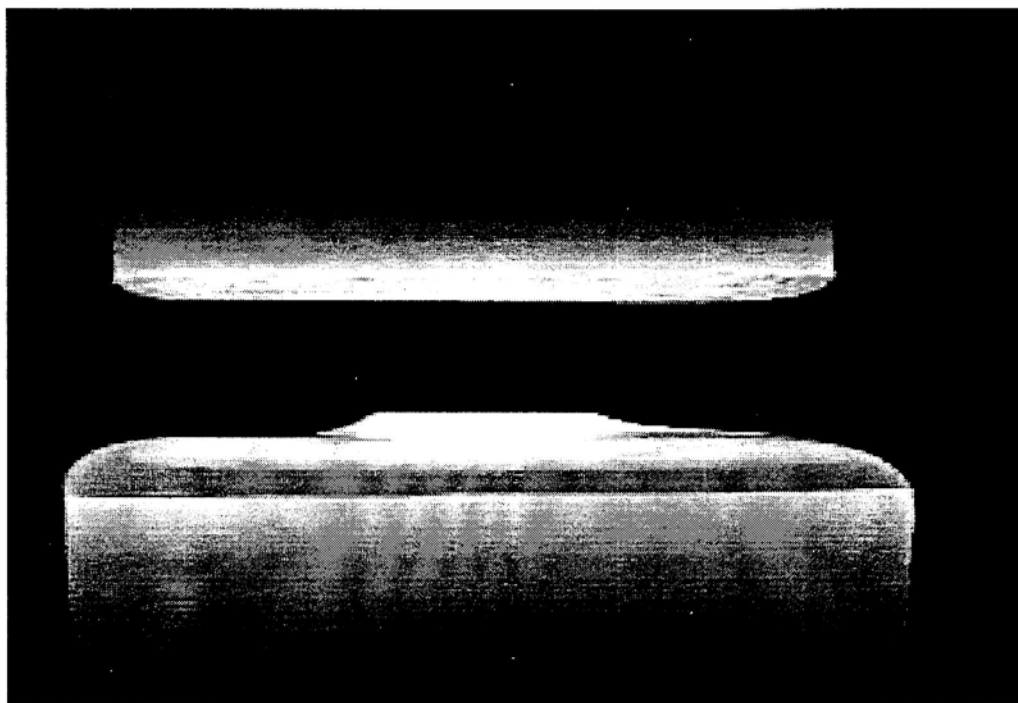


a)

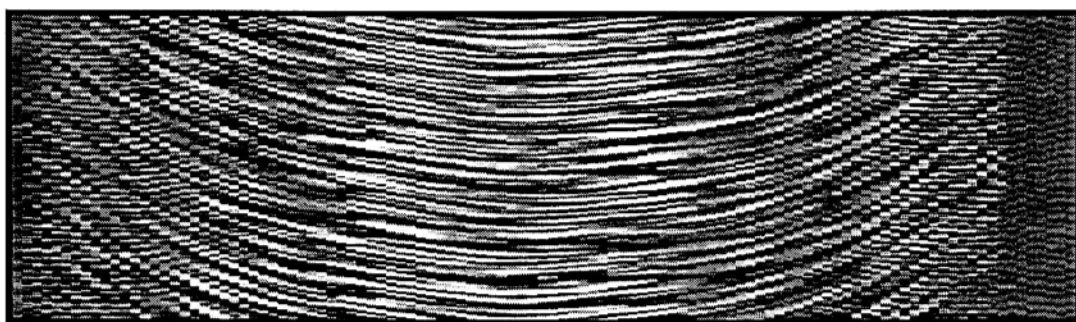


b)

Bild 4.1: Finite Elemente Netz für die Berechnung des Temperaturfeldes (a) und der Schmelzenströmung (b)



*Bild 4.2: Aus der Video des FZ-Prozesses erstellter Bild: Vorratsstab, Induktor, Schmelze, Kristall (nach [29])*



*Bild 4.3: Photo-scanning Messungen des elektrischen Widerstands in der vertikalen Querschnitt des Kristalls (nach [29])*

Für die Beschreibung der EM-Eigenschaften der Abschmelzfront 2 (Bild 3.1), wo die Oberfläche teilweise mit Flüssigkeitstropfen überdeckt ist, wird der Wert des Koeffizienten  $\xi$  benötigt. In dem folgenden Berechnungen wurde der Wert  $\xi$  so gewählt, daß die berechnete Position der Abschmelzfront mit der gemessenen übereinstimmt. Ein Vergleich mehrerer Experimente mit den Berechnungen führen zu einem Wert  $\xi=1.4$ , wobei dieser Wert praktisch unabhängig von den Züchtungsparametern ist.

Das FE-Netz für die Berechnung des Temperaturfeldes und der Phasengrenzen ist im Bild 4.1-a gezeigt. Das Netz enthält insgesamt 6166 lineare Dreieckselemente und 3277 Knoten. Der Vorratsstab enthält 2510, die Schmelze 2336 und der Kristall 1320 Elemente. Die Phasengrenzen sind in 302 Linienelemente unterteilt. Die Elementgröße ist stark ortsabhängig und in etwa den erwarteten Temperaturverteilungen angepaßt. In der Nähe der Schmelzzone, wo die größten Temperaturgradienten auftreten, ist die Elementgröße entsprechend klein. Das Gitternetz für die Berechnung der Schmelzenströmung ist im Bild 4.1-b dargestellt. Es ist wesentlich feiner als das Netz für die Berechnung des Temperaturfeldes und enthält 7760 Elemente. Um die Geschwindigkeitsgradienten in der Grenzschicht genauer aufzulösen, ist das Netz am Rand erheblich feiner als in der Mitte. Für die Erzeugung der FE-Netze wurde ein eigener Netzgenerator benutzt. Er arbeitet nach dem Prinzip der Makroelemente. Zuerst wird das Gebiet in wenige große Dreiecke ( in diesem Fall 95 Dreiecke) automatisch oder "per Hand" aufgeteilt. Danach wird jedes Dreieck automatisch in kleinere Dreiecke unterteilt, wobei sich die Elementgröße nichtlinear ändern kann.

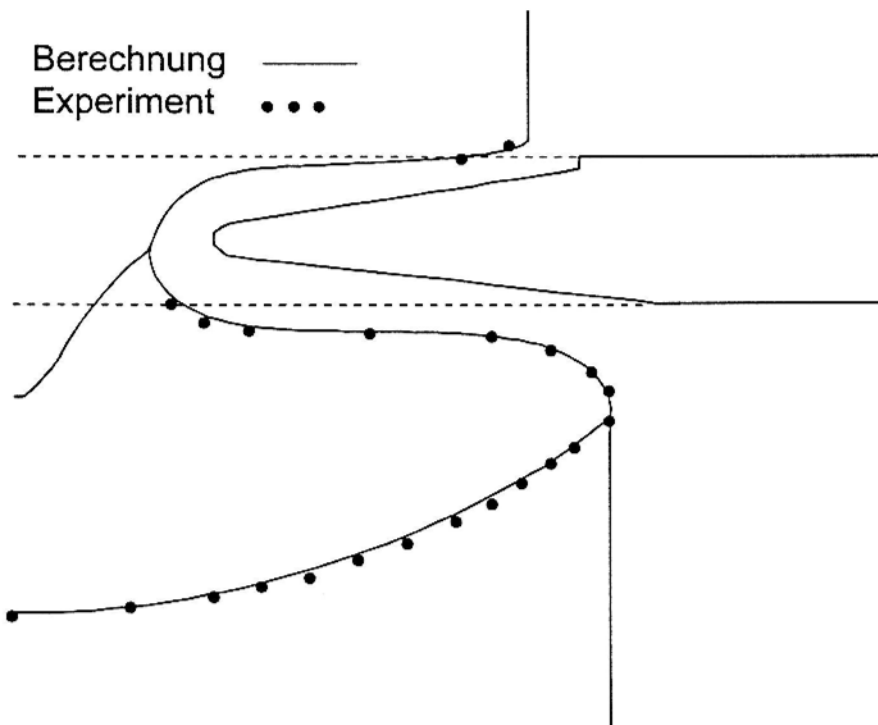


Bild 4.4: Vergleich zwischen berechneten (Linien) und gemessenen (Punkte) Phasengrenzen

Das Experiment [29] wurde auf Video aufgenommen. Die Form der Phasengrenzen wurde mit digitalisierten Einzelbildern erfaßt (Bild 4.2). Die Verteilungen des elektrischen Widerstands und die Form der Kristallisationsfront wurden anhand von photo-scanning Messungen [47] ermittelt. Der Kristall wurde in Längsrichtung durchgeschnitten und die vertikale Ableitung des elektrischen Widerstands gemessen. Die Oberfläche wurde mit einem Abstand zwischen den Meßpunkten von 0.1 mm in vertikaler Richtung und 1 mm in radialer Richtung vermessen. Das Meßergebnis ist im Bild 4.3 mit unterschiedlichen Graustufen dargestellt. Man kann im Bild die Form der Kristallisationsfront leicht erkennen.

Die berechneten und gemessenen Phasengrenzen werden im Bild 4.4 verglichen. Die Form der gemessenen Phasengrenzen sind den Bild 4.2 und Bild 4.3 entnommen. Bei der Berechnung wird auch der Einfluß der Strömung berücksichtigt. Die Übereinstimmung zwischen dem Experiment und der Berechnung ist gut. Geringe Unterschiede sind im Mittelbereich der Kristallisationsfront und im zentralen Bereich des Induktors (in der sogenannten "Halszone") festzustellen.

## **4.2 Analyse der Phasengrenzen und analytische Modelle**

### **4.2.1 Abschmelzfront**

Wie schon bei der Modellbildung im Abschnitt 3.3.1 erwähnt wurde, ist das Abschmelzen des Vorratsstabes ein komplizierter Prozeß, der sich kaum mit einfachen Modellen beschreiben läßt. Geschmolzenes Silizium zieht sich zu kleinen Tröpfchen zusammen und fließt unter Wirkung der Schwerkraft entlang der Oberfläche des Vorratsstabes in die Schmelze hinein. Die Oberfläche ist nicht glatt sondern mehr oder weniger mit Rillen und anderen Unebenheiten durchquert. Da sich die elektrische Leitfähigkeit des Siliziums in festem und flüssigem Zustand um den Faktor 25 unterscheiden, ist die Eindringtiefe und dementsprechend auch die induzierte Wärmemenge sehr stark von der Verteilung des flüssigen Siliziums an der Oberfläche abhängig.

Es ist notwendig, das Verhältnis zwischen der festen und flüssigen Phase des Siliziums an der Oberfläche zu bestimmen. Man kann in erster Näherung annehmen, daß die Oberfläche des Vorratsstabes von einer flüssigen Schicht mit der Dicke  $h$  bedeckt ist. Die Schicht wird durch EM- oder Oberflächenspannungskräfte am Vorratsstab gehalten. Unter der Wirkung der Schwerkraft fließt die Schmelze entlang der Oberfläche nach unten. Der Durchfluß  $Q$  nach [31] ist

$$Q = \frac{gh^3}{3\nu} \sin \alpha ,$$

wobei  $\alpha$  der Neigungswinkel der Oberfläche,  $g$  die Schwerkraft,  $\nu$  die kinematische Viskosität und  $h$  die Dicke der flüssigen Schicht ist. Andererseits ist der Durchfluß mit dem pro Zeiteinheit abgeschmolzenen Volumen gleich. Daraus folgt bei  $r = 0.5R_0$  die Gleichung für die Dicke der flüssigen Schicht  $h$  :

$$h = \sqrt[3]{\frac{9 u_F R_0 \nu}{4 g \sin \alpha}} ,$$

wobei  $u_F$  die Vorschubgeschwindigkeit,  $R_0$  der Radius des Vorratsstabes ist.

Man sieht, daß die Dicke der flüssigen Schicht wegen der Kubikwurzel sehr unempfindlich gegenüber Parameteränderungen ist. Für die Konfiguration aus der Abschnitt 4.1 mit der Vorschubgeschwindigkeit  $u_F = 5 \cdot 10^5$  m/s,  $R_0 = 0.05$  m und  $\alpha = 2.5^\circ$  ist die Dicke  $h = 0.16$  mm. Die Eindringtiefe des EM-Feldes für flüssiges Si bei der Frequenz  $f = 3$  MHz ist  $\delta = 0.26$  mm, deshalb fließt der Strom sowohl im flüssigen als auch im festen Silizium. Dies wurde mit einem Koeffizienten  $\xi$  berücksichtigt (Abschnitt 3.3.1 und 4.1), der das Verhältnis zwischen den Wärmequellen in flüssigem Silizium zu festen Silizium mit einer flüssigen Schicht beschreibt. An der Abschmelzfront wurde dessen Wert experimentell mit  $\xi = 1.4$  bestimmt ( $\xi = 1$  für die rein flüssige und  $\xi = 5$  für die rein festen Phase). Man kann den Wert von  $\xi$  bei bekannter Dicke der flüssigen Schicht berechnen. Die eindimensionale Berechnung des Vektorpotentials des EM-Feldes mit der Methode der finiten Differenzen ist elementar und wird hier nicht beschrieben. Der berechnete Koeffizient  $\xi$  ist 2.5 für das Verhältnis Schichtdicke zu Eindringtiefe  $h/\delta = 0.6$  ( $h = 0.16$  mm,  $f = 3$  MHz). Das bedeutet, daß in Wirklichkeit mehr Strom durch die flüssige Phase fließt als die stark



erreicht ein breiteres Gebiet die Schmelztemperatur (Kurven 1 bis 4) . In dieser Zeit wird ein Teil der Energie für den Phasenübergang in den flüssigen Zustand verwendet. Ein starker Temperatursprung findet im Zeitpunkt 6 statt, zu dem erst im Inneren des Körpers die Schmelze entsteht und wegen der besseren elektrischen Leitfähigkeit mehr Strom fließt. Die Eindringtiefe wird kleiner und die Temperatur in tieferen Bereichen sinkt wegen weniger Wärmequellen. Der nächste Temperatursprung findet in dem Moment statt, wo die Oberfläche flüssig wird und dabei weniger Wärme abgestrahlt werden kann (Kurve 25).

#### 4.2.2 Freie Schmelzenoberfläche

Die Form der freien Schmelzenoberfläche wird grundsätzlich von der Oberflächenspannung und der Schwerkraft bestimmt. Die Form und Stabilität der freien Oberfläche für die Konfiguration, die der FZ-Züchtung von Kristallen mit kleinem Durchmesser entsprechen, sind in [4] untersucht worden. Es wurde gezeigt, daß für eine klassische FZ Anordnung mit Vorratsstab oben und Kristall unten die flüssige Zone noch bei einem Winkel von  $90^\circ$  (horizontal) am Vorratsstab stabil ist. Die maximale Höhe der flüssigen Zone ist auf etwa 14.8 mm begrenzt, wenn der Radius des Vorratsstabes dem Kristallradius entspricht.

Um die Form und die Stabilität bei größeren Kristallen zu untersuchen, wurde das Modell aus Abschnitt 3.3.2 verwendet. Der Halsradius, wo die freie Schmelzenoberfläche den Vorratsstab berührt (oberer Tripelpunkt), ist viel kleiner als der Kristallradius. Dabei ist ein Großteil der Schmelzenoberfläche horizontal und flach, nur in der Nähe des Kristalls und des Vorratsstabs ist sie gekrümmt. Im Bild 4.6 sind Oberflächen für den Parameter  $S_g = 0.012$  (Material Silizium, Kristalldurchmesser 100 mm) bei unterschiedlichem Referenzdruck  $Z'$  dargestellt. Die Endpunkte der Linien entsprechen einem Winkel von  $90^\circ$  am Vorratsstab, der Kontakt mit der Abschmelzfront (Endpunkt der freien Oberfläche) ist jedoch in jedem beliebigen Punkt der Linie möglich. Die einzige Begrenzung ist der Winkel der freien Oberfläche der nur maximal  $13^\circ$  (Kontaktwinkel für Silizium) größer als der Winkel

der Abschmelzfront in diesem Punkt sein darf, sonst ziehen die Oberflächenspannungskräfte die Schmelze entlang der Abschmelzfront hoch.

Bei der Analyse der Form der Phasengrenzen ist es wichtig, die Höhen  $h_1$ ,  $h_2$ ,  $h_3$  (Bild 4.6) zu kennen, deshalb wurden sie numerisch berechnet. Die Höhe des flachen Teils der Schmelzenoberfläche über dem Kristallrand

$$\hat{h}_1 \approx 1.5\sqrt{Sg}; \quad h_1 \approx 1.5\sqrt{\frac{\gamma}{\rho g}} = 8.2 \text{ mm}$$

ist bei  $h_1 \ll R_0$  und  $R_H \ll R_0$  nur von Materialeigenschaften abhängig, wobei  $R_H$  den Halsradius bezeichnet.

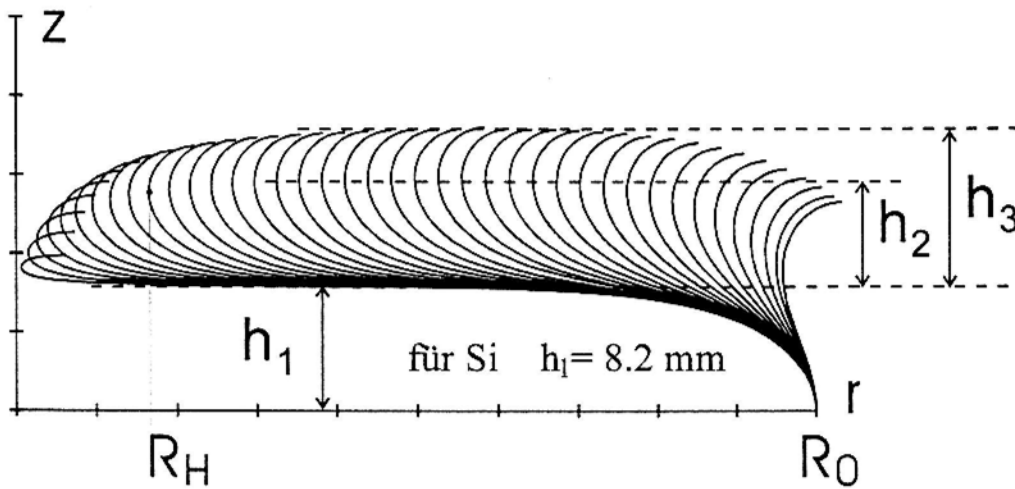


Bild 4.6: Zur Analyse der Form der freien Oberfläche

Die Beobachtungen in Ziehanlagen und auch numerische Berechnungen zeigen, daß die Abschmelzfront in der Nähe des Kontakts mit der Schmelze nahezu vertikal verläuft. Dann ist die minimale Höhe des flüssigen Halses gleich  $h_2$ . Die maximale Höhe des Halses wird beim Winkel  $90^\circ$  erreicht und mit  $h_3$  bezeichnet. Die maximalen Werte dieser Höhen werden beim  $R_H \approx R_0 / 2$  erreicht und sind

$$h_2 \approx 1.3 \sqrt{\frac{\gamma}{\rho g}} = 7.1 \text{ mm},$$

$$h_3 \approx 1.9 \sqrt{\frac{\gamma}{\rho g}} = 10.4 \text{ mm}.$$

Bei kleineren Halsdurchmessern sind die Zonenhöhen etwas kleiner. Allgemein gilt, daß die gesamte Zonenhöhe zwischen 15.3 und 18.6 mm liegen kann. Diese Zahlen sind etwas größer als das von *Coriell* [4] berechnete Maximum von 14.8 mm für die Konfiguration mit kleineren Kristalldurchmessern.

### 4.2.3 Temperaturfeld im Kristall

Wenn die Länge des Stabes viel größer ist als der Radius, kann man die Temperaturverteilung auch etwas vereinfacht als eindimensional betrachten. Es wird angenommen, daß der Temperaturgradient in axialer Richtung viel größer ist als in radialer Richtung. Dann muß man die Wärmeleitungsgleichung nur in axialer Richtung lösen, wobei die radiale Wärmeleitung und Abstrahlung als Wärmesenken berücksichtigt werden:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = 2 \text{Bi} T^4 .$$

Die dimensionslosen Randbedingungen lauten:

$$T|_{z=0} = 1; \quad \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=\infty} = 0 .$$

Die Lösung dieser Gleichung wird in der Form  $T(z)=(a+b \text{Bi}^\epsilon z)^d$  gesucht und ist leicht zu finden:

$$T(z) = \left( 1 + z \sqrt{\frac{9}{5} \text{Bi}} \right)^{-\frac{2}{3}} \quad (4.1)$$

Diese Temperaturverteilung wird im nächsten Unterkapitel mit numerisch berechneten Werten bei unterschiedlichen *Biot*-Zahlen verglichen. Der dimensionslose Wärmefluß bzw. Temperaturgradient an der Phasengrenze ( $z=0$ ) ist

$$q = -\sqrt{\frac{4}{5} \text{Bi}} . \quad (4.2)$$

Gemäß dieser Formel kann man die für den FZ-Prozess notwendige Leistung berechnen. Die gesamte Leistung ergibt sich aus der Summe der im Kristall und Vorratsstab abgeführten und von der Abschmelzfront und Schmelzenoberfläche abgestrahlten Wärme. Der Wärmefluß muß mit der jeweiligen Querschnittsfläche

multipliziert werden. Bei kleinem Halsdurchmesser (in Vergleich zum Kristalldurchmesser) und gleichen Kristall- und Vorratsstabdurchmessern bekommt man die Gleichung für die erforderliche Leistung

$$\hat{Q} = 2\pi \left( \sqrt{\frac{4}{5}} \text{Bi} + \frac{\varepsilon_M}{\varepsilon_C} \text{Bi} (1 - T_{I,\text{eff}}^4) \right),$$

wobei  $T_{I,\text{eff}}$  die effektive Temperatur des Induktors ist. Die Leistung ist praktisch nur von der *Biot-Zahl*  $\text{Bi}$  abhängig, die nur eine variable Größe, den Kristallradius  $R_0$  enthält. Im Bild 4.7 ist die Leistung für  $T_{I,\text{eff}} = 0.84$ ,  $\varepsilon_M = 0.27$ ,  $\varepsilon_C = 0.46$  dimensionsbehaftet (mit  $\lambda T_0 R_0$  multipliziert) abhängig von Kristalldurchmesser dargestellt. Der größte Teil der Wärme wird durch die Kristalloberflächen zum Gehäuse abgestrahlt, obwohl bei größeren Durchmessern die Wärmestrahlung zum Induktor stärker zunimmt. Die numerisch berechneten Leistungen sind mit Punkten dargestellt. Die Form der entsprechenden Phasengrenzen ist in Bild 4.22 zu sehen. Die Übereinstimmung mit den analytischen Ergebnissen ist gut. Bei der numerischen Berechnung ist die Leistungskurve etwas flacher, weil der Durchmesser des Polystabes für alle Berechnungen konstant war.

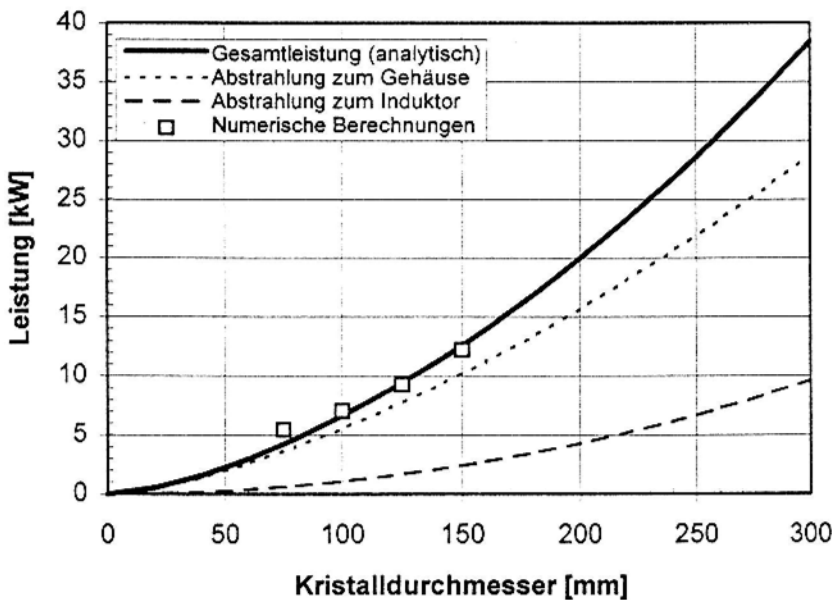


Bild 4.7: Für den FZ-Prozeß erforderliche Leistung

#### 4.2.4 Kristallisationsfront

Die Prozesse an der Kristallisationsfront sind für die Qualität des Kristalls entscheidend, deshalb ist auch deren Verständnis besonders wichtig. In diesem Abschnitt wird die Abhängigkeit sowohl der makroskopischen Parameter wie Wärmefluß und Temperatur als auch der Form dieser Grenze von den anderen Prozessparametern untersucht.

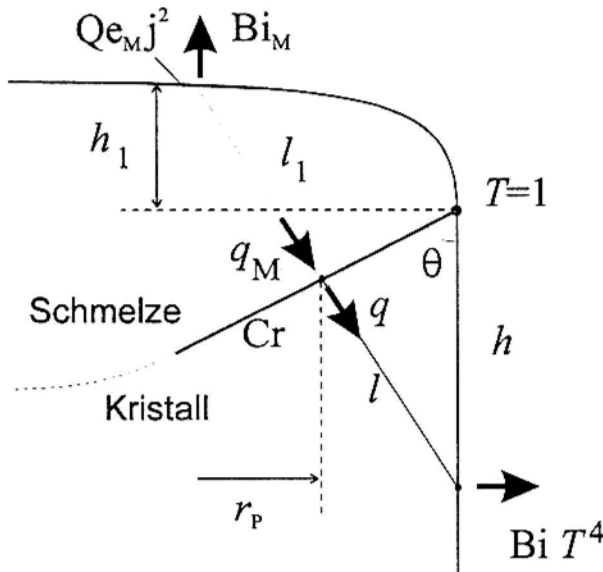


Bild 4.8: Zum analytischen Modell der Abschmelzfront

Die Bezeichnungen für ein einfaches analytisches Modell sind im Bild 4.8 angegeben. Es wird angenommen, daß die Temperatur sich linear ändert und Temperaturgradienten senkrecht zur Kristallisationsfront gerichtet sind. Die hier folgenden Gleichungen sind dimensionslos. Der Wärmefluß  $q$  entsteht wegen der Temperaturdifferenz zwischen der Kristallisationsfront (Schmelztemperatur  $T=1$ ) und der Kristalloberfläche ( $T < 1$ ) im Abstand  $h$  vom Tripelpunkt:

$$q = \frac{1-T}{l}. \quad (4.3)$$

Einerseits muß der Wärmefluß gleich der von der Kristalloberfläche abgestrahlten Wärme (Wärmequellen werden vernachlässigt) sein:

$$q \cos \Theta = \text{Bi} T^4. \quad (4.4)$$

Andererseits muß der Wärmefluß  $q$  der Summe der Kristallisationswärme und dem zusätzlichen Wärmefluß aus der Schmelze entsprechen:

$$q = Cr \sin\Theta + q_M. \quad (4.5)$$

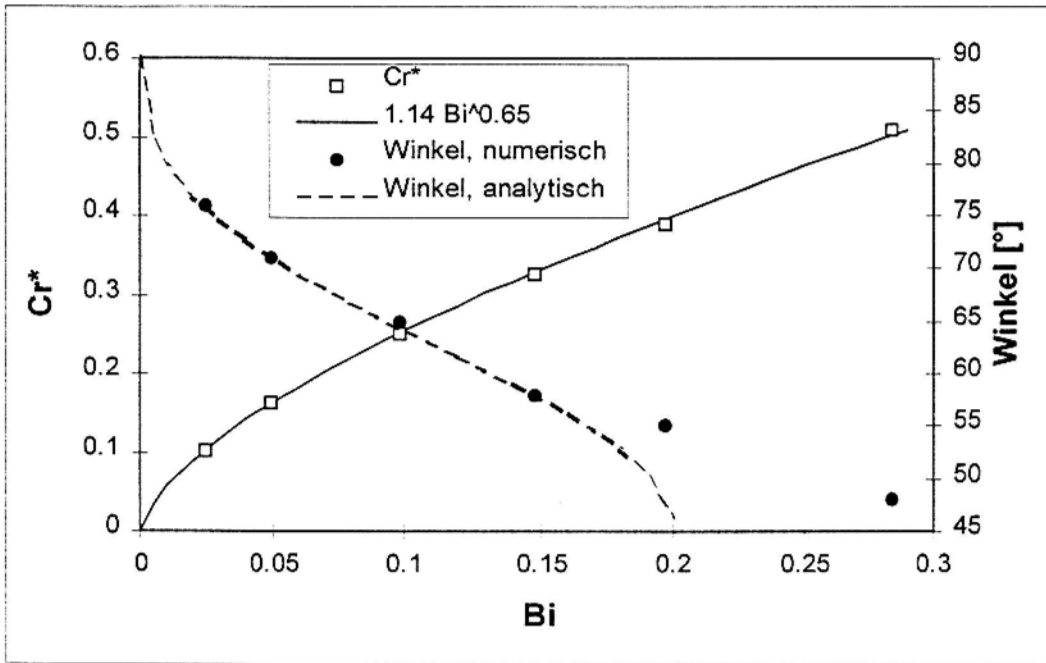


Bild 4.9: Abhängigkeit des Parameters  $Cr^*$  von dem Parameter  $Bi$ ; Numerisch und analytisch berechnete Winkel der Phasengrenze  $\Theta$

Aus den Formeln (4.3)-(4.5) kann man die Temperatur  $T$  als Funktion von  $h$ ,  $Rd$ ,  $\Theta$  und den Wärmefluß  $q_M$  als Funktion von  $h$ ,  $Rd$ ,  $Cr$  und  $\Theta$  berechnen. Der Winkel  $\Theta$  ist aus diesen Formeln nicht zu bestimmen und muß vorgegeben werden. Der Wärmefluß  $q_M$  ist von der Temperaturverteilung in der Schmelze abhängig und kann in der Mitte und am der Rand durchaus unterschiedliche Werte annehmen. Um die Situation zu vereinfachen, wird der Wärmefluß  $q_M$  als klein im Vergleich zur Kristallisationswärme angenommen, was bei höheren Ziehgeschwindigkeiten auch der Fall ist. Dann kann der Winkel in der Nähe des Tripelpunktes ( $T \approx 1$ ) aus den Formeln (4.3) und (4.4) bestimmt werden:

$$\Theta = 2 \arcsin \frac{2Bi}{Cr}. \quad (4.6)$$

Numerische Berechnungen mit  $q_M=0$  bei unterschiedlichen Parametern  $Rd$  (proportional zum Kristallradius) zeigen, daß die Phasengrenze nur bei einem

bestimmten Wert für  $Cr$  existiert. Dieser Wert wird im folgenden mit  $Cr^*$  bezeichnet, er kann die maximale Kristallisationsgeschwindigkeit bei gegebenen Abstrahlungsbedingungen ( $Rd$ ) bestimmen.  $Cr^*$  ist im Bild 3.1 abhängig von dem Parameter  $Rd$  dargestellt. Eine Approximation ergibt

$$Cr^* = 1.14 Bi^{0.65}. \quad (4.7)$$

Der Winkel  $\Theta$  ist bei größeren Werten für  $Rd$  kleiner und die Durchbiegung der Phasengrenze größer. Bild 4.9 zeigt, daß die Übereinstimmung des numerisch berechneten Winkels mit der nach Formel (4.4) berechnetem Winkel bei kleineren Werten für  $Rd$  und  $Cr$  sehr gut ist.

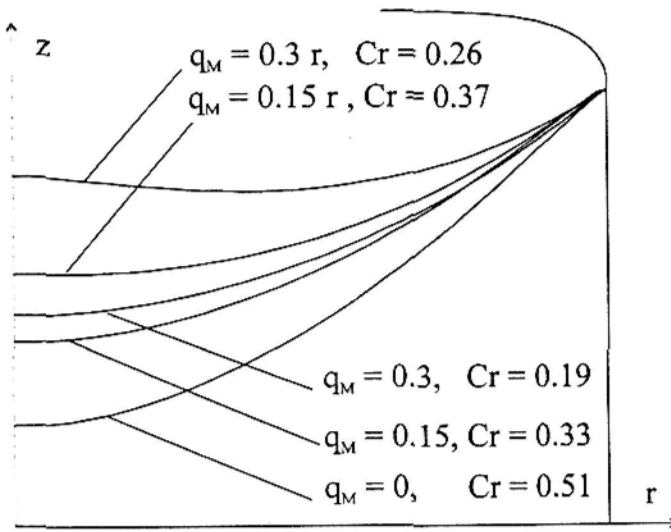


Bild 4.10: Form der Phasengrenze für  $Rd=0.283$  und unterschiedliche  $q_M$

Bei realen Ziehbedingungen ist der Wärmefluß aus der Schmelze immer vorhanden. Je kleiner der Parameter  $Cr$  ist, desto größer muß der Wärmefluß  $q_M$  sein, um die durch  $Rd$  bestimmte Abstrahlung zu gewährleisten. Die Kompensation von  $Cr$  und  $q_M$  muß am Kristallrand genauer angepaßt sein, weil da die Wärmeflüsse größer sind. Bei typischen FZ-Anordnungen ist der Temperaturgradient im Zentrum kleiner als am Rand und deswegen wird bei kleinerem Parameter  $Cr$  die Durchbiegung der Phasengrenze kleiner. Diese Tatsache wird sowohl in Experimenten als auch in numerischen Berechnungen (Bild 4.16) beobachtet.

Wie weit die Durchbiegung der Phasengrenze von der Verteilung  $q_M(r)$  beeinflusst wird, zeigen die nächsten Berechnungsergebnisse. Der Parameter  $Rd$  ist 0.283. Der Wärmefluß  $q_M$  wird als konstant oder linear vom Radius abhängig angegeben. Der Parameter  $Cr$  wird für jede Berechnung so angepaßt, daß die Berechnung der Phasengrenze möglich ist. Im Bild 4.10 sind die berechneten Phasengrenzen dargestellt. Wenn der Wärmefluß von der Schmelze größer ist, ist der Parameter  $Cr$  (Ziehgeschwindigkeit) kleiner. Es gilt der Zusammenhang

$$Cr^* \approx Cr + q_M. \quad (4.8)$$

Auch die Durchbiegung der Phasengrenze wird dabei kleiner. Dieser Effekt ist noch ausgeprägter, wenn der Wärmestrom  $q_M$  im Zentrum kleiner ist als am Rand.

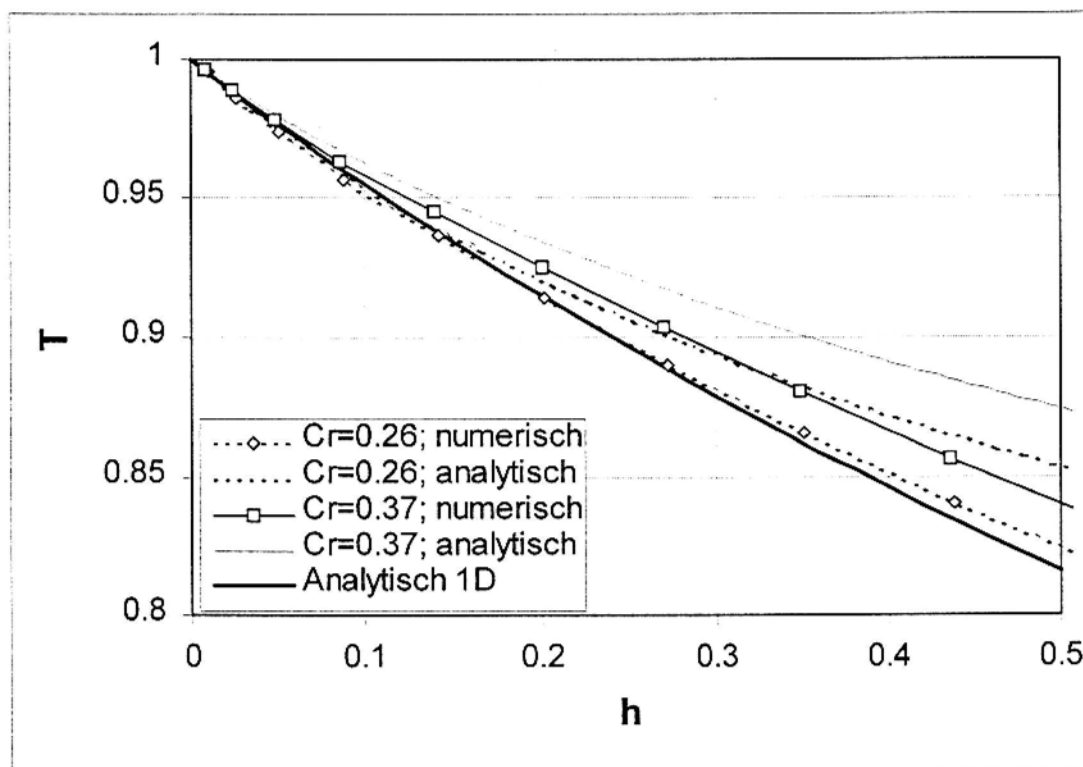


Bild 4.11: Temperaturverlauf am Kristallrand für  $Rd=0.284$  und unterschiedliche Parameter  $Cr$ ; Vergleich zwischen analytischem und numerischem Modell

Wenn  $q_M$  bekannt ist, kann man auch den erforderlichen Strombelag und die Wärmequellen an der Schmelzenoberfläche berechnen. Nach Bild 4.8 gilt für die dimensionslosen Wärmequellen

$$Qe_{MJ}^2 = q_M + Bi_M \left( 1 + q_M \frac{h_1 + h \cos^2 \Theta}{\sin \Theta} \right)$$

und die Oberflächentemperatur

$$T = 1 + q_M \frac{h_1 + h \cos^2 \Theta}{\sin \Theta}.$$

Die Konstante  $h_1$  wurde im Unterkapitel 4.2.2 bestimmt.

Der Winkel zwischen dem Kristallrand und der Phasengrenze ist nicht nur vom Parameter  $Rd$  sondern auch von der Verteilung des Wärmestroms  $q_M$  und vom  $Cr$  abhängig. Die analytischen Abhängigkeiten  $T(h)$  werden bei konstantem  $Rd$  und unterschiedlichen Winkeln  $\Theta$  mit numerischen Berechnungen verglichen. Parameterstudien zeigen, daß der Winkel bzw. die Durchbiegung der Phasengrenze von der Ziehgeschwindigkeit (Bild 4.17) abhängig ist. Bei einer Ziehgeschwindigkeit von  $v_C = 2.5$  mm/min ( $Cr=0.26$ ) ist der Winkel  $\Theta = 63^\circ$  und bei  $v_C = 3.6$  mm/min ( $Cr=0.37$ ) ist  $\Theta = 57^\circ$ . Im Bild 4.11 sind die numerischen und analytischen Ergebnisse für zwei unterschiedliche Winkel (bzw. Ziehgeschwindigkeiten oder Parametern  $Cr$ ) dargestellt. Das einfache analytische Modell zeigt deutlich auch den numerisch berechneten Trend, daß bei kleinerem Winkel (größerer Ziehgeschwindigkeit) die Temperatur langsamer abfällt und dadurch integral mehr Wärme abgestrahlt wird. Im Diagramm ist auch der Temperaturverlauf dargestellt, der mit dem eindimensionalen Modell ohne Berücksichtigung der Winkel berechnet wurde (Formel (4.1)). In größerem Abstand vom Schmelzpunkt liegt dieser Verlauf noch näher an den numerischen Berechnungen als die winkelabhängigen analytischen Temperaturverteilungen.

#### 4.2.5 Globales analytisches Modell

Ein globales Modell wird die Zusammenhänge zwischen den geometrischen Maßen des Systems und den dimensionslosen Parametern verdeutlichen. Die Bezeichnungen sind im Bild 4.12 dargestellt. Es werden die Formel (4.2) und die Wärmeflußbedingungen an der Abschmelzfront und der freien Oberfläche verwendet.

An der Abschmelzfront gilt:

$$\xi Qe_M j_1^2 - Cr - Bi_F - (0.8Bi_F)^{0.5} = 0. \quad (4.9)$$

Entsprechend kann man für die freie Schmelzenoberfläche schreiben:

$$Qe_M j_2^2 + Cr - Bi_M - (0.8Bi_C)^{0.5} = 0. \quad (4.10)$$

Mit Hilfe der Flußerhaltung des EM-Feldes erhält man:

$$j_1 h_1 R_1 = j_2 h_2 R_2.$$

Die Bedingung, daß der integrale Strom im Silizium gleich mit dem Induktorstrom ist, liefert:

$$l_1 j_1 + l_2 j_2 = 1.$$

Die Länge der Oberfläche, wo Strom induziert wird, kann man aus den geometrischen Daten des Induktors und dem Abstand zwischen der Siliziumoberfläche und Induktor berechnen:

$$l_1 = (R_1 - R_f) + 0.5\pi h_1 + 0.5\pi h_1$$

$$l_2 = (R_2 - R_f) + 0.5\pi h_1 + 0.5\pi h_2$$

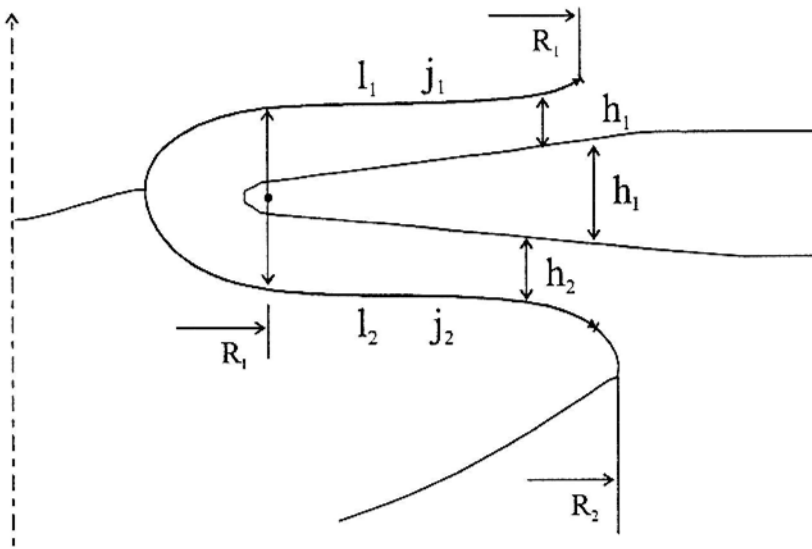


Bild 4.12: Bezeichnungen zum globalen Modell

Wenn die Maße  $R_f$ ,  $h_1$ ,  $R_1$ ,  $R_2$  und die Parameter  $Qe$ ,  $Cr$ ,  $Bi$  bekannt sind, kann man die Abstände  $h_1$  und  $h_2$  zwischen dem Induktor und der Siliziumoberflächen wie folgt berechnen:

$$h_1 = \frac{2R_2}{\pi j_1 (R_1 + R_2)} \left( 1 - \frac{\pi}{2} h_1 j_1 - \frac{\pi}{2} h_1 j_2 - j_2 (R_2 - R_1) - j_1 (R_1 - R_1) \right)$$

$$h_2 = \frac{2R_1}{\pi j_2 (R_1 + R_2)} \left( 1 - \frac{\pi}{2} h_1 j_1 - \frac{\pi}{2} h_1 j_2 - j_2 (R_2 - R_1) - j_1 (R_1 - R_1) \right)'$$

wobei der Strombelag  $j_1$  und  $j_2$  aus der Formeln (4.9) und (4.10) berechnet wird. Im

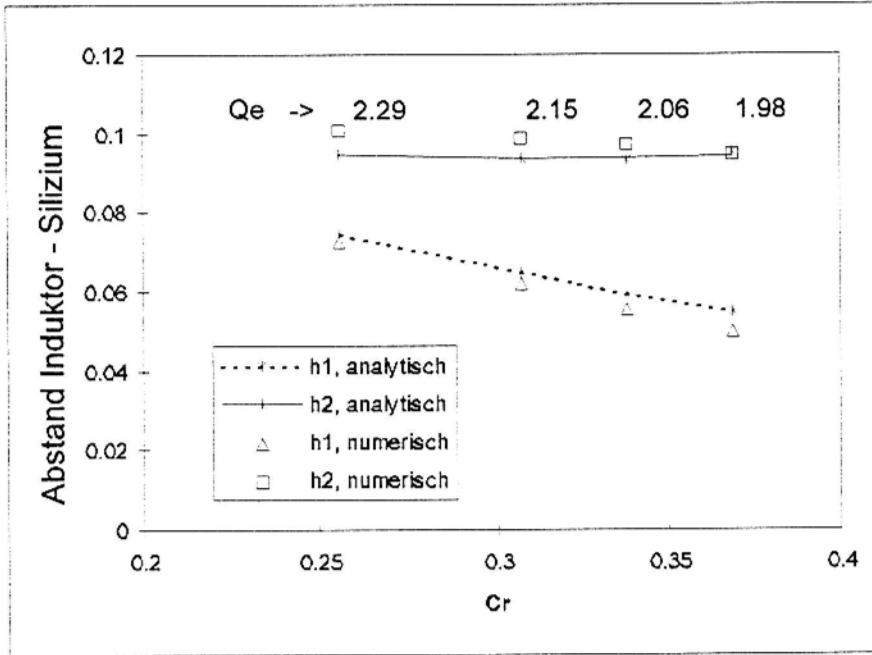


Bild 4.13: Numerisch und analytisch berechneten Abstände  $h_1$  und  $h_2$

Bild 4.13 werden die analytisch und numerisch berechneten Abstände  $h_1$  und  $h_2$  miteinander verglichen. Als Beispiel wurden die Berechnungen mit unterschiedlichen Ziehgeschwindigkeiten genommen (Bild 4.17). Der Induktorstrom (Parameter  $Q_e$ ) wird dabei gleichzeitig so angepaßt, daß der Abstand  $h_2$  praktisch konstant bleibt. Die erzielte Übereinstimmung ist gut. In den folgenden zwei Bildern werden die analytischen Ergebnisse dargestellt, in denen nur ein Parameter geändert wurde.

Im Bild 4.15 sind die Abstände in Abhängigkeit vom Parameter  $Cr$  bei unterschiedlichem Parameter  $Q_e$  dargestellt. Bei größeren Werten des Parameters  $Cr$  nimmt der Abstand  $h_2$  sehr stark zu - es wird die maximale Ziehgeschwindigkeit erreicht (siehe Abschnitt 4.2.4). Bei kleineren Ziehgeschwindigkeiten ( $Cr$ ) und kleineren Stromstärken ( $Q_e$ ) geht der Abstand zu null, dabei ist es nicht möglich, eine Schmelzzone zu bekommen.

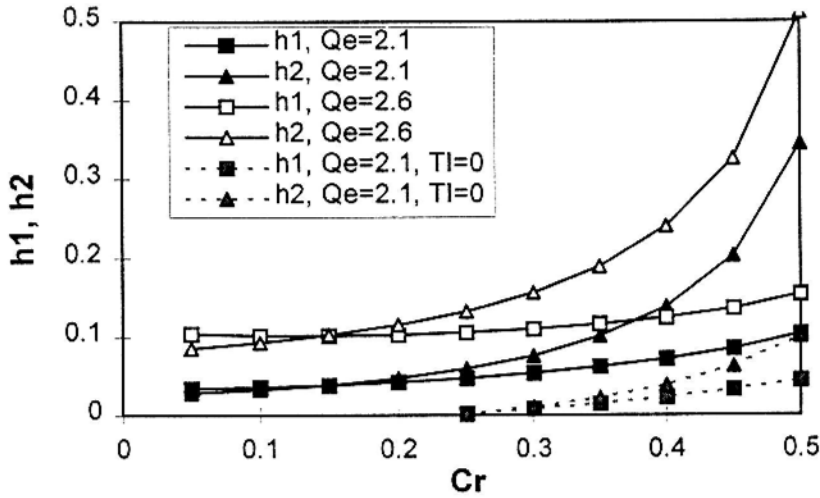


Bild 4.15: Abhängigkeit der Abstände  $h_1$  und  $h_2$  von der Parameter  $Cr$

Im Bild 4.14 sind die Größen  $h_1$  und  $h_2$  in Abhängigkeit von  $Q_e$  (Induktorstrom) dargestellt. Es ist deutlich ein Minimum des Parameters  $Q_e$  zu erkennen, bei dem der Prozeß noch möglich ist. Bei  $Cr=0$  steigt der Abstand  $h_1$  schneller als  $h_2$ . Wenn  $Cr$  größer wird, steigt der Abstand  $h_2$  schneller.

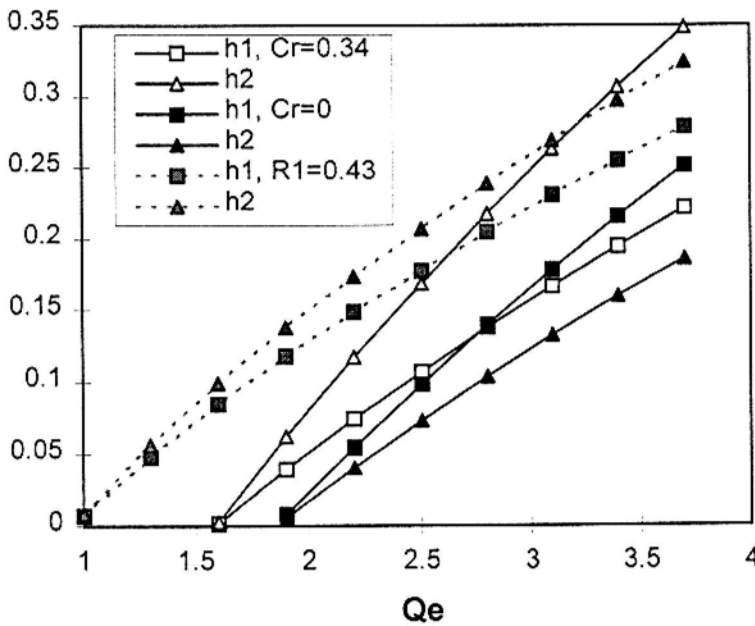


Bild 4.14: Abhängigkeit der Abstände  $h_1$  und  $h_2$  von der Parameter  $Q_e$

### 4.3 Form der Phasengrenzen: Parameterstudien

Mit dem Berechnungsprogramm ist es möglich, Einflüsse unterschiedlichen Parameter auf die Form der Phasengrenzen zu untersuchen. Im diesen Abschnitt werden die wichtigsten Zusammenhänge untersucht. Wenn nicht anders gesagt, wird neben dem zu untersuchenden Parameter auch der Induktorstrom in jeder Berechnungsreihe so variiert, daß der Abstand  $h_c$  (Bild 3.1) zwischen dem unteren Tripelpunkt und dem Induktor konstant bleibt. Die anderen Parametern wurden wie in der Berechnung, die mit dem Experiment verglichen wurde (Abschnitt 4.1), gewählt. Der Einfluß der Schmelzenströmung wird nicht berücksichtigt.

Einige wichtige Größen wie Durchbiegung der Phasengrenze, Induktorstrom, Temperaturüberhöhung in der Schmelze usw. sind für alle folgenden Berechnungsserien in der Tab. 5 zusammengefaßt.

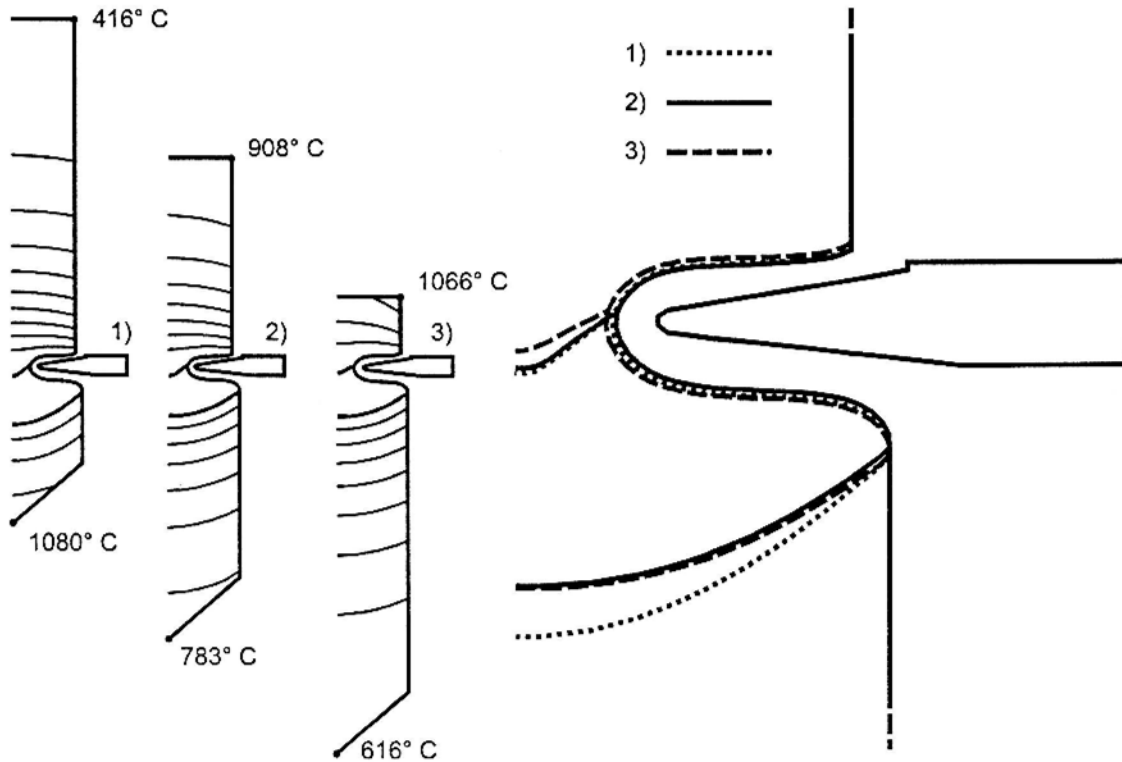


Bild 4.16: Form der Phasengrenzen und das Temperaturfeld (100 K Temperaturdifferenz zwischen zwei Isothermen) in unterschiedlichen Wachstumsstadien: 1 - Anfang, 2 - Mitte, 3 - Ende

### Wachstumsstadium

Im Bild 4.16 sind die berechneten Phasengrenzen und das Temperaturfeld in unterschiedlichen Wachstumsstadien dargestellt. Man sieht, daß die Temperaturverteilung und die Form der Phasengrenzen von der Länge des Kristalls und des Vorratsstabs abhängig ist. Im Anfangsstadium ist die Durchbiegung der Kristallisationsfront größer und die mittlere Temperatur des Kristalls ist höher. Eine größere Durchbiegung ist ein unerwünschter Effekt, weil sie zu höheren thermischen Spannungen führt [48]. Beobachtungen in Züchtungsprozessen zeigen, daß wenn ein Zusammenbruch des Kristalls stattfindet, erfolgt er meistens im Anfangsstadium, wo die Durchbiegung der Phasengrenze größer ist. [49], [50].

### Ziehgeschwindigkeit

Der Einfluß der Ziehgeschwindigkeit auf die Form der Phasengrenzen ist im Bild 4.17 dargestellt. Die Ziehgeschwindigkeit wird von 2.5 mm/min bis 3.6 mm/min variiert. Bei höheren Ziehgeschwindigkeit ist die Durchbiegung der Kristallisationsfront

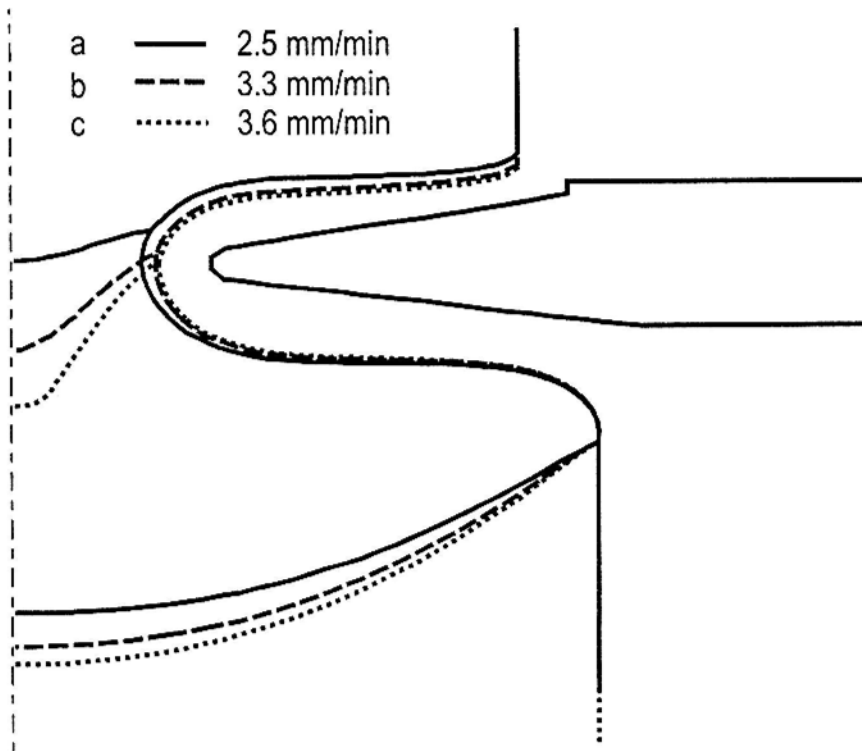


Bild 4.17: Einfluß der Ziehgeschwindigkeit auf die Form der Phasengrenzen

größer. Dabei werden die Temperaturgradienten im Kristall höher, und mehr Kristallisationswärme kann abgeführt werden. Die Abschmelzfront liegt näher am Induktor, um die größere Abschmelzwärme pro Zeiteinheit durch zusätzliche Wärmequellen kompensieren zu können. Mit zunehmender Ziehgeschwindigkeit wird es immer schwerer, den zentralen Teil der Abschmelzfront (Grenze fest/flüssig) abzuschmelzen. Einerseits wird mehr Wärme zum Schmelzen benötigt, andererseits wird der Wärmefluß von der Schmelze wegen geringerer Überhitzung in der Schmelze (Tab. 5) kleiner. Schon bei einer Ziehgeschwindigkeit von 3.8 mm/min war die Berechnung wegen des zu langen Mittelteils unmöglich, da dieser fast bis zur Kristallisationsfront reichte.

### Induktorstrom

In dieser Berechnungsreihe wird nur der Induktorstrom geändert, alle anderen Parameter bleiben konstant. Wie im Bild 4.18 dargestellt ist, ändert sich die Zonenhöhe am stärksten bei Änderung der Induktorleistung. Der Halsdurchmesser wird auch wesentlich kleiner bei größeren Zonenhöhe. Wenn dieser Durchmesser zu

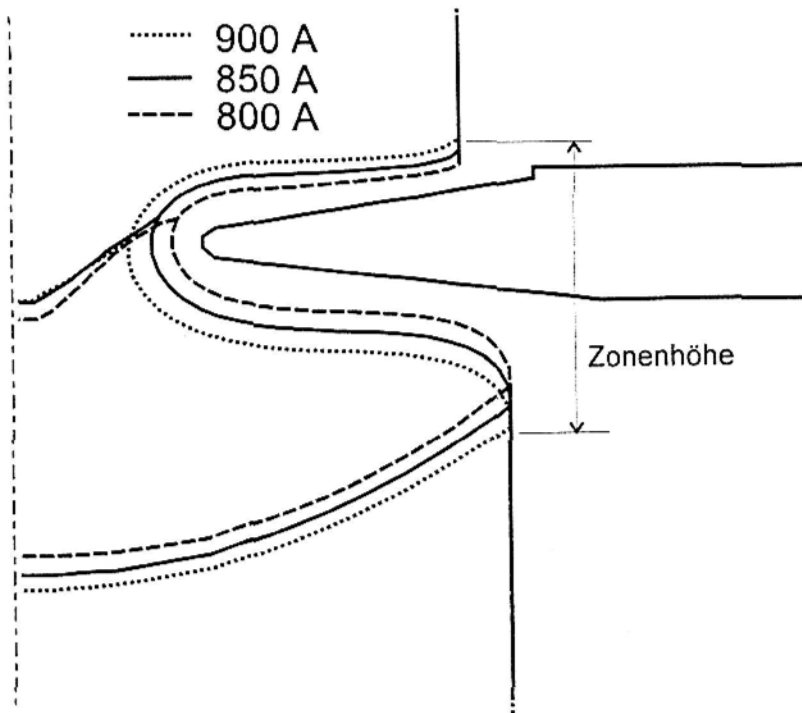


Bild 4.18: Form der Phasengrenzen in Abhängigkeit vom Induktorstrom

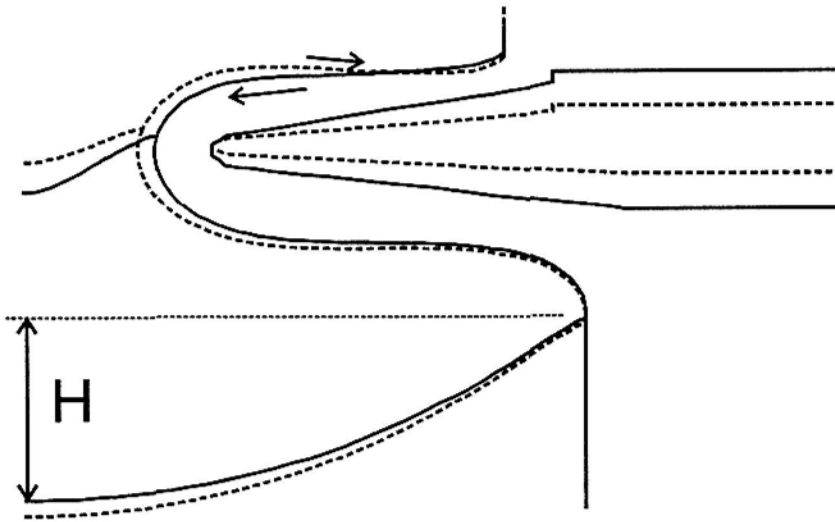


Bild 4.19: Einfluß der Induktorhöhe auf die Form der Phasengrenzen

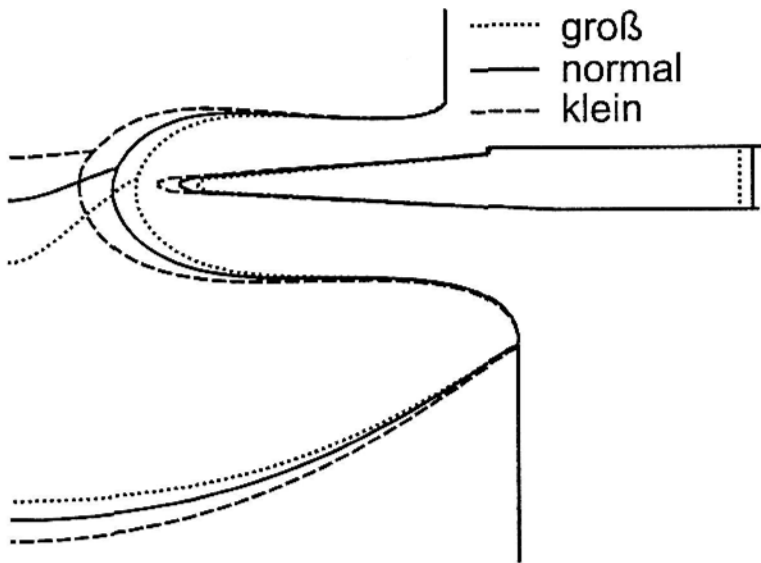


Bild 4.20: Einfluß des Innenlochs des Induktors auf die Form der Phasengrenzen

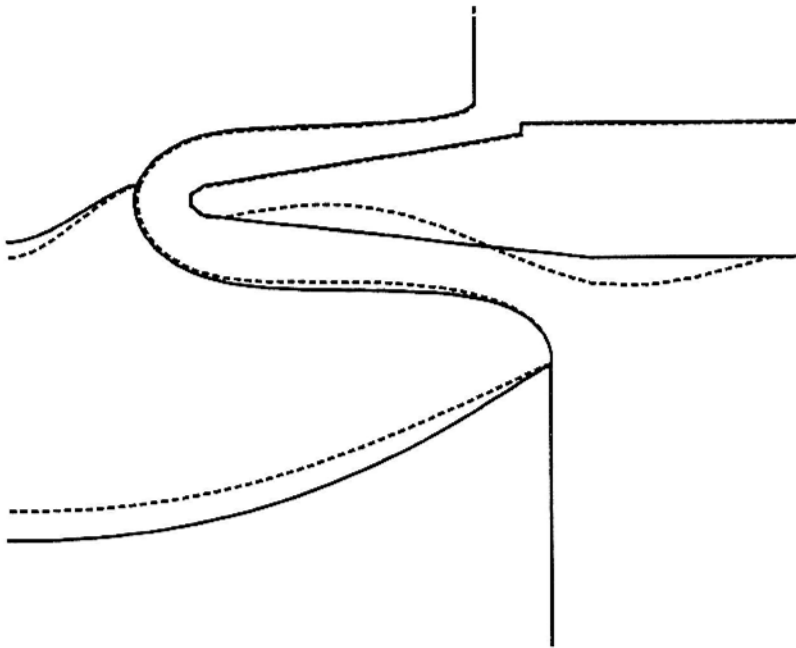
klein wird, kann der Abbruch des flüssigen Halses zu einem Prozeßabsturz führen. Die Durchbiegung der Kristallisationsfront und Position des zentralen Bereichs der Abschmelzfront ändern sich geringfügig.

#### Form des Induktors

Die Form des Induktors ist eine sehr wichtige Einflußgröße bei der FZ-Züchtung von Siliziumkristallen mit großem Durchmesser. Die Form des Induktors wurde mit zunehmendem Kristalldurchmesser von einer einfachen Windung mit Rohrquerschnitt

(Bild 2.1) zu einem keilförmigen Induktor komplizierter Form weiterentwickelt. Die Entwicklung fand hauptsächlich empirisch statt. Mit Hilfe des Berechnungsprogramms ist es möglich, die Grenzen der Formänderung zu berechnen, bei denen der Prozeß noch möglich ist.

Im Bild 4.19 sind die berechneten Phasengrenzen für verschiedene Induktorhöhen dargestellt. Bei dünnerem Induktor ist die Abschmelzfront zu flach und teilweise sogar nach außen geneigt. Das ist nicht zulässig, weil das abgeschmolzene Silizium nicht entlang der Phasengrenze in die Schmelze fließt, sondern nach außen. Die



*Bild 4.21: Einfluß der Induktorform auf die Form der Phasengrenzen*

Durchbiegung der Kristallisationsfront ist größer bei flacheren Induktoren.

Im Bild 4.20 sind Induktoren mit unterschiedlichen Lochdurchmessern, die sich um etwa 10% gegenüber dem mittleren unterscheiden, dargestellt. Man sieht, daß bei kleinerem Lochdurchmesser die Durchbiegung der Kristallisationsfront größer und der Halsdurchmesser viel kleiner wird. Der zentraler Teil der Abschmelzfront steigt mit kleinerem Lochdurchmesser an. Bei Änderung des Innenlochs um weitere 10% ist kein Prozeß mehr möglich. Bei zu kleinem Loch bricht der flüssige Hals ab. Bei größerem Loch schmilzt der Vorratsstab im zentralen Bereich nicht mehr ab.

Gewöhnlich haben die Induktoren eine bestimmte Neigung an der Ober- und Unterseite. Die Änderung des Winkels ändert die Strom- und Wärmequellenverteilung zwischen dem inneren und äußeren Bereich (z.B. Bild 4.19). Wenn man den Winkel nicht konstant hält, kann man die Stromverteilung noch gezielter beeinflussen. Im Bild 4.21 ist mit einer gestrichelten Linie ein Induktor dargestellt, der viel Wärme im zentralen und äußeren Bereich aber wenig Wärme im mittleren Bereich der Schmelzenoberfläche erzeugt. So wird die Durchbiegung der Kristallisationsfront wesentlich kleiner bei geringer Änderung des Halsdurchmessers und der Abschmelzfront.

### Kristalldurchmesser

Um den Einfluß des Kristalldurchmessers auf die Form der Phasengrenzen zu veranschaulichen, wurden Berechnungen bei unterschiedlichen Kristalldurchmessern und gleichbleibenden anderen Parametern durchgeführt. Im Bild 4.22-a sind die Phasengrenzen beim Kristalldurchmesser von 75, 100, 125 und 150 mm abgebildet. Im Bild 4.22-b ist die Durchbiegung der Kristallisationsfront abhängig vom Kristalldurchmesser dargestellt.

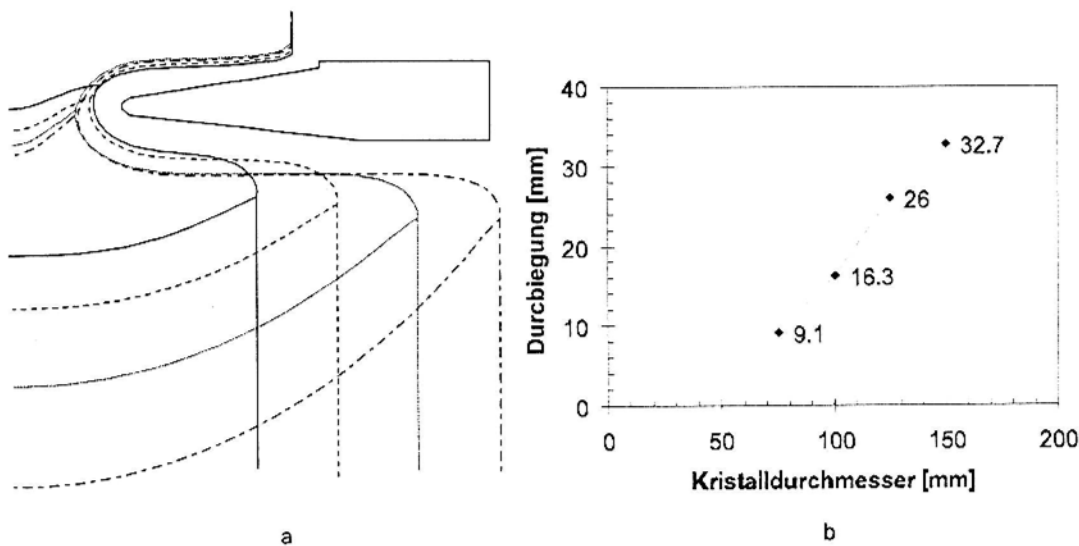


Bild 4.22: Form der Phasengrenzen (a) und Durchbiegung der Kristallisationsfront (b) bei unterschiedlichen Kristalldurchmessern

Die Durchbiegung der Kristallisationsfront bzw. der Winkel der Phasengrenze am Kristall nimmt bei größeren Durchmessern zu, was auch die Berechnungen im Abschnitt 4.2.4 zeigen. Die Form der Abschmelzfront ändert sich unwesentlich. Bei größeren Kristalldurchmessern ist die Vorschubgeschwindigkeit des Vorratsstabs höher, deswegen ist der mittlere Teil etwas tiefer in die Schmelze eingetaucht als bei kleineren Kristalldurchmessern. Der Halsdurchmesser ist vom Kristalldurchmesser praktisch unabhängig. Die unterschiedlichen Halsdurchmesser im Bild 4.22 kommen wegen verschiedener Zonenhöhen zustande.

### Stromfrequenz

Aus der Definition der dimensionslosen Parameter sieht man, daß die Stromfrequenz direkt nur den Parameter  $Q_e$  beeinflusst. Bei höheren Frequenz wird mehr Wärme pro Flächeneinheit bei gleicher Stromdichte im Silizium eingebracht. Da die Zonenhöhe konstant gehalten wird, muß der Strom kleiner sein. Dementsprechend ist der EM-Druck auf die freie Oberfläche kleiner und die freie Oberfläche liegt näher am Induktor im zentralen Gebiet, wo der maximale Strom fließt (Bild 4.23). Wegen des kleineren Abstands wird der Strom in dieser Stelle größer und es wird mehr Wärme in der Mitte der Schmelze eingebracht. Dadurch wird die Durchbiegung der

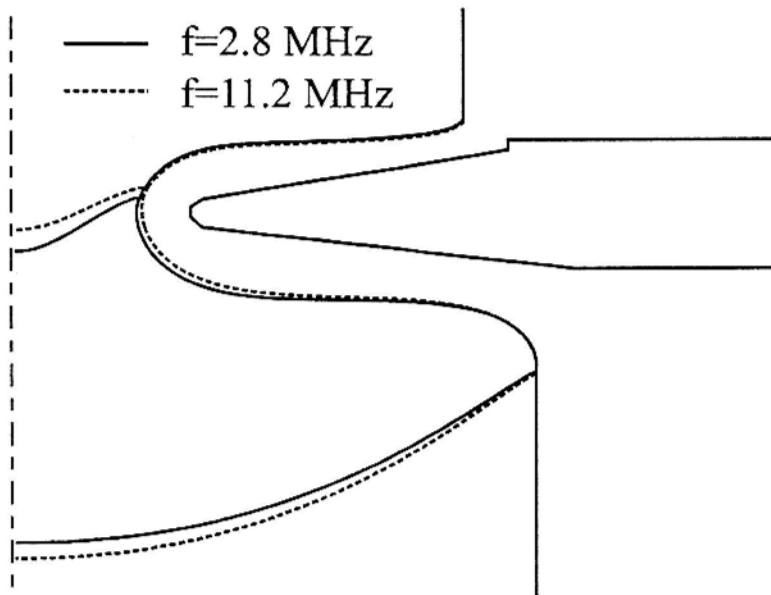


Bild 4.23: Form der Phasengrenzen bei verschiedenen Stromfrequenzen

Kristallisationsfront größer und der mittlere Teil der Abschmelzfront liegt höher. Bei der Berechnung wurde nicht berücksichtigt, daß sich bei höherer Frequenz das Verhältnis zwischen Eindringtiefe des EM-Feldes und der Dicke der flüssigen Schicht ändern kann, was den Wert des Parameters  $\xi$  verändert (Abschnitt 4.2.1).

### Reflektor

Insbesondere bei Kristallen mit größeren Durchmessern (150 - 200 mm) können die thermischen Spannungen die Festigkeitsgrenze des Kristalls überschreiten, was zu einem Bruch des Kristalls schon im Anfang des Wachstumsstadiums führen kann. Um die thermischen Spannungen im Kristall zu verringern, können Reflektoren oder passive Nachheizer in der Nähe der Phasengrenze angebracht werden. Es ist bekannt, daß allgemein die thermischen Spannungen bei kleinerer Durchbiegung der Phasengrenze und kleineren Temperaturgradienten an der Phasengrenze [48] kleiner werden. Im den nächsten zwei Berechnungsbeispielen beträgt der Kristalldurchmesser 150 mm. Im Bild 4.24 sind die berechneten Phasengrenzen für unterschiedliche

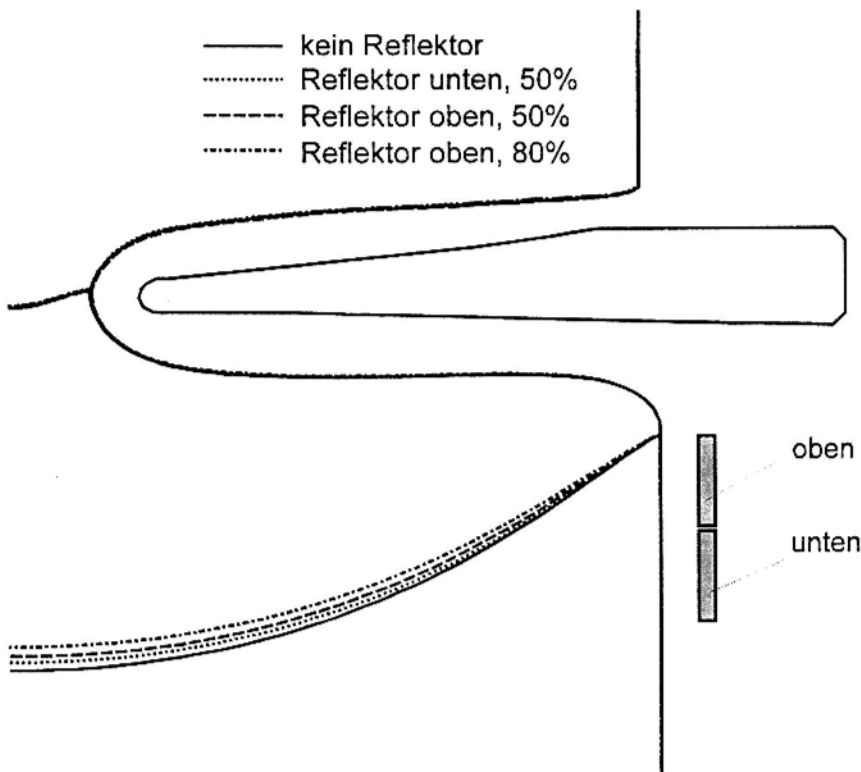


Bild 4.24: Form der Phasengrenzen in Abhängigkeit von der Position und Reflexivität des Reflektors

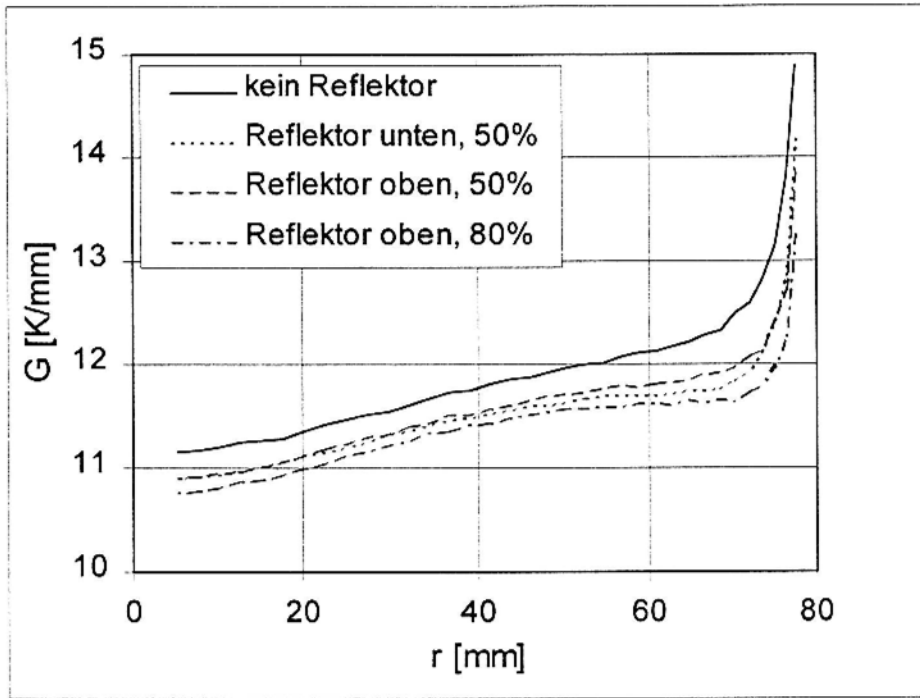


Bild 4.25: Temperaturgradient  $G$  an der Kristallisationsfront im Kristall für unterschiedliche Reflektoren

Reflektoren abgebildet. Höher angeordnete Reflektoren verkleinern die Durchbiegung der Phasengrenze stärker, als niedriger angeordnete. Ein Reflektor mit höherem Reflexionsgrad beeinflusst die Form der Phasengrenze stärker.

#### Zusätzliche Schlitz

Um die Stromverteilung im Induktor zu verändern, können radiale Schlitz verwendet werden, wie mit dem Modell im Abschnitt 3.1.2 beschrieben wird. Die radial am Innenloch angeordneten Schlitz bewirken, daß der Strom im zentralen Bereich geschwächt und mehr nach außen gedrängt wird. Das Bild 4.26 zeigt, daß sowohl längere (6% länger) als auch breitere (25% breiter) Schlitz die Durchbiegung der Phasengrenze verkleinern und den Halsdurchmesser vergrößern. Die maximale Temperatur in der Schmelze wird kleiner, weil weniger Wärmequellen im zentralen Bereich erzeugt werden.

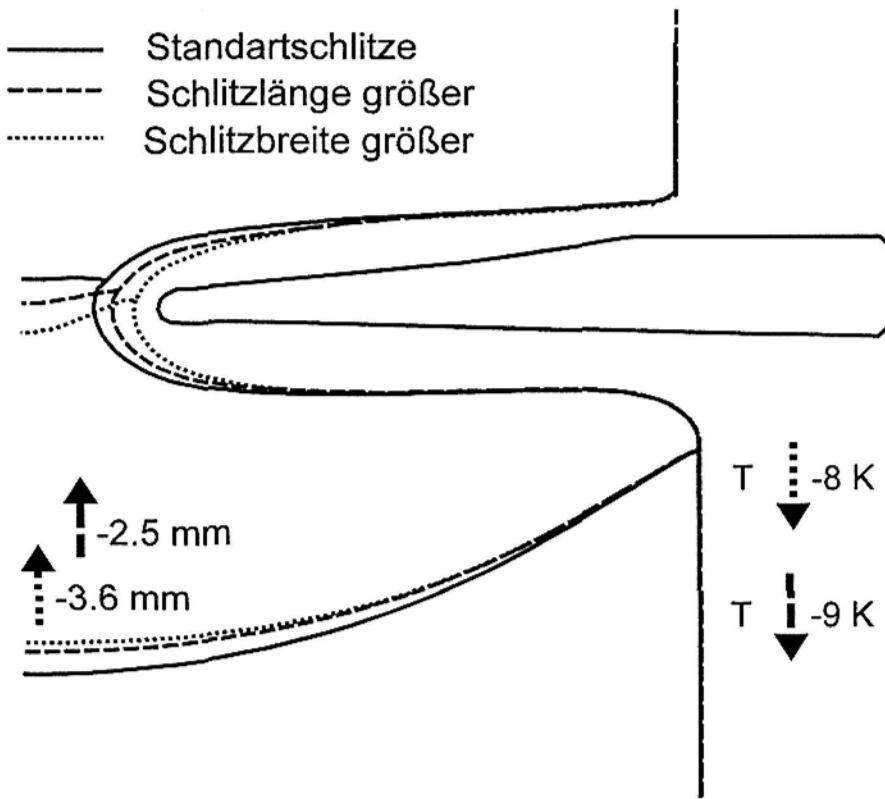


Bild 4.26: Form der Phasengrenzen in Abhängigkeit von der Länge und Breite der zusätzlichen Schlitze

### Zusammenfassung

Die Parameterstudien zeigen, daß die Form der Phasengrenzen stark vom Prozeßstadium, von der Induktorform und von den Züchtungsparametern abhängig ist.

In der Tab. 5 ist die Abhängigkeit der wichtigsten geometrischen Parameter wie Durchbiegung der Kristallisationsfront und Halsdurchmesser sowie die maximale Temperaturdifferenz in der Schmelze für ausgewählte Berechnungen zusammengefaßt. Von der Form der Kristallisationsfront sind die thermischen Spannungen im Kristall und die Kristallqualität abhängig. Der Halsdurchmesser ist ein wichtiges Maß für die Realisierbarkeit des Prozesses. Durch die Temperaturdifferenz in der Schmelze ist die Stärke des thermischen Auftriebs bestimmt.

Tab. 5: Zusammenfassung der Parameterstudien: Durchbiegung der Kristallisationsfront, maximale Temperaturdifferenz in der Schmelze und Halsdurchmesser für ausgewählte Parameteränderungen.

Geänderter Parameter	Berechnete Größen		
	Durchbiegung der Phasengrenze, [mm]	Temperaturdifferenz in der Schmelze, [K]	Halsdurchmesser, [mm]
Durchmesser des Innenlochs, [mm]	(Bild 4.20)		
29.6	15.35	68.9	14.0
33.8	17.20	54.8	20.5
37.5	19.07	46.4	25.1
Kristalldurchmesser, [mm]	(Bild 4.22)		
75	9.1	45.0	
100	16.3	49.9	
125	26.0	53.4	
150	34.7	71.6	
Ziehgeschwindigkeit, [mm/min]	(Bild 4.17)		
2.5	14.61	60.0	22.08
3.0	16.28	49.9	23.47
3.3	17.48	43.6	24.23
3.6	18.94	37.4	24.92
Induktorstrom, [A]	(Bild 4.18)		
800	17.44	48.4	31.29
850	17.23	43.8	27.20
900	16.50	38.7	22.31
Induktorhöhe, [mm]	(Bild 4.19)		
12.5	16.28	50.0	23.47
6.25	17.20	54.8	20.55

Der wichtigste Einflußparameter beim FZ-Kristallziehen ist die Form des Induktors, die die Strom- und Wärmequellenverteilung sowie den Abstand zwischen Induktor und Phasengrenzen bestimmt. Der Durchmesser des Innenlochs beeinflusst den Halsdurchmesser und die Durchbiegung des zentralen Teils der Abschmelzfront. Die Induktorhöhe hat starken Einfluß auf die Form der Abschmelzfront und der Kristallisationsfront. Die Form der Induktorunterseite beeinflusst die Durchbiegung der Kristallisationsfront, wobei andere Phasengrenzen fast unverändert bleiben. Die Schlitze haben Einfluß auf die Durchbiegung der Kristallisationsfront, den Halsdurchmesser und die Durchbiegung der Abschmelzfront.

---

Eine höhere Ziehgeschwindigkeit erhöht die Durchbiegung der Kristallisationsfront und Abschmelzfront und verkleinert den Abstand zwischen Induktor und Abschmelzfront.

Der Induktorstrom ändert die Zonenhöhe und den Halsdurchmesser, wobei andere Größen wenig beeinflußt werden.

Die Frequenz hat wenig Einfluß auf die Form der Phasengrenzen.

Ein Reflektor in der Nähe der Kristallisationsfront beeinflußt die Form der Kristallisationsfront und die Temperaturgradienten an dieser Phasengrenze.

Bei kleinerer Kristalllänge (Anfangsstadium des Ziehprozesses) ist die Durchbiegung der Kristallisationsfront größer.

Bei der Analyse der Parametereinflüsse kann man auch sekundäre Effekte oder Zusammenhänge feststellen. Es ist sehr deutlich zu sehen, daß bei kleinerem Halsdurchmesser die Durchbiegung der Abschmelzfront im zentralen Bereich kleiner und die Durchbiegung der Kristallisationsfront größer ist.

## 4.4 Schmelzenströmung

Die Analyse der Schmelzenströmung wird mit der Berechnung der typischen Basiskonfiguration begonnen, danach wird der Einfluß von Parameteränderungen und die Stabilität der Strömung bei der FZ-Kristallzuchtung untersucht. Anschließend werden die Möglichkeiten der nichtstationären Kristallrotation simuliert und analysiert.

Für die Berechnung der Strömung wird die Konfiguration (siehe Abschnitt 4.1) mit folgenden für die Strömung relevanten dimensionslosen Parametern benutzt:  $Fe=0.18$ ,  $Sg=0.012$ ,  $Gr=2.7e9$ ,  $Pr=0.013$ ,  $Bi_M=0.16$ ,  $Qe_M=1.45$ ,  $Re_F=-16.7 \cdot 10^3$ ,  $Re_C=4.09 \cdot 10^3$ ,  $Em=1.9 \cdot 10^9$ ,  $Ma=3.0 \cdot 10^7$ . Als Gebiet für die Berechnung werden die ohne HD-Einfluß berechneten Phasengrenzen benutzt. Das Gebiet ist in 7760 Dreieckselemente unterteilt. Als Anfangsbedingungen sind die konstante Schmelztemperatur  $T_0$  für das Temperaturfeld und die Rotation der Schmelze als starren Körper zusammen mit dem Kristall für die azimuthale Geschwindigkeit angenommen. Für die meridionale Strömung wird mit einem Nullfeld gestartet.

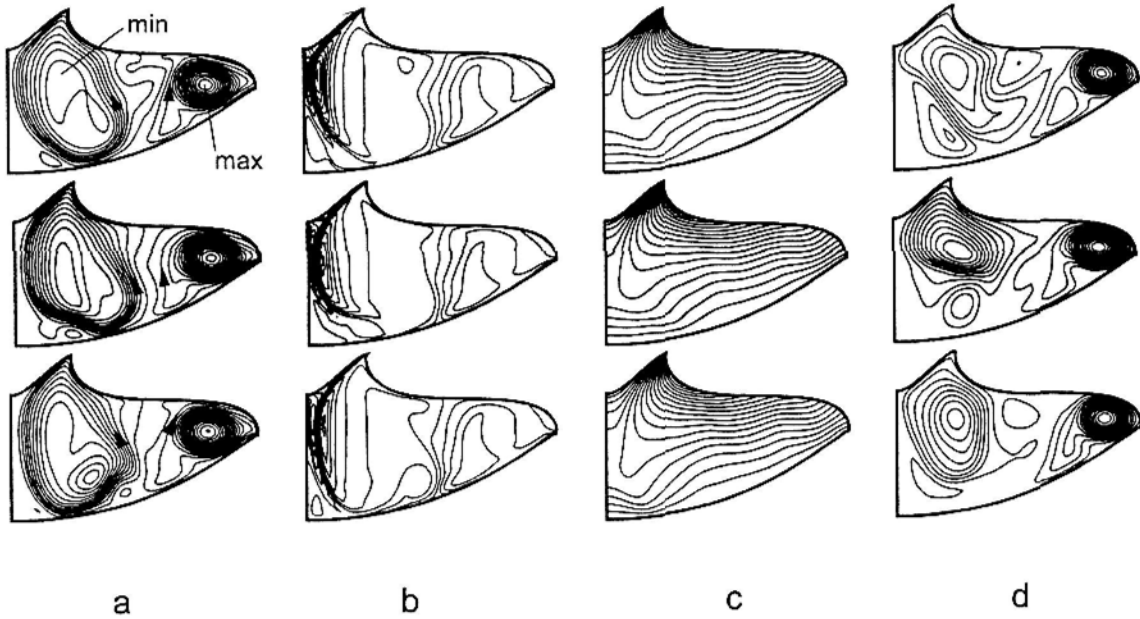


Bild 4.27: Isolinien der Stromfunktion (a), der azimuthalen Geschwindigkeit (b) und der Temperatur (c) für drei nacheinander folgende Zeitpunkte. Parameterwerte  $Gr=2.7 \cdot 10^9$ ,  $Pr=0.013$ ,  $Bi_M=0.16$ ,  $Qe_M=1.45$ ,  $Re_F=-16.7 \cdot 10^3$ ,  $Re_C=4.09 \cdot 10^3$ ,  $Em=1.9 \cdot 10^9$ ,  $Ma=3.0 \cdot 10^7$ . Isolinien der Stromfunktion (d) mit  $Em=0$ ,  $Ma=0$

Nach einer bestimmten Berechnungszeit hat die Strömung einen Zustand mit sich wiederholenden Oszillationen mit begrenzter Amplitude angenommen. Es wurden 150 Sekunden mit einem Zeitschritt von 0.0015 Sekunden berechnet. Im Bild 4.27 sind die Isolinien der Stromfunktion (a), der azimuthalen Geschwindigkeit (b) und der Temperatur (c) für drei im Abstand von 2 s aufeinanderfolgenden Zeitpunkten dargestellt. Die Isolinien der Stromfunktion zeigen die Strömungsrichtung und deren Dichte ist der Geschwindigkeit proportional (siehe auch die Definition der Stromfunktion (3.38)). Die Strömung in meridionaler Ebene ( $r,z$ -Ebene) hat zwei Wirbel. Die Isolinien der Stromfunktion zeigen, daß der äußere Wirbel nahezu stabil ist. Der innere Wirbel dagegen zeigt bemerkenswerte Oszillationen der Geschwindigkeit, insbesondere im unteren Bereich an der Kristallisationsfront. Da sind die meridionalen und azimuthalen Geschwindigkeitsfelder besonders stark gekoppelt. Man kann auch sehen, daß die Geschwindigkeitsschwankungen die Temperaturschwankungen erzeugen.

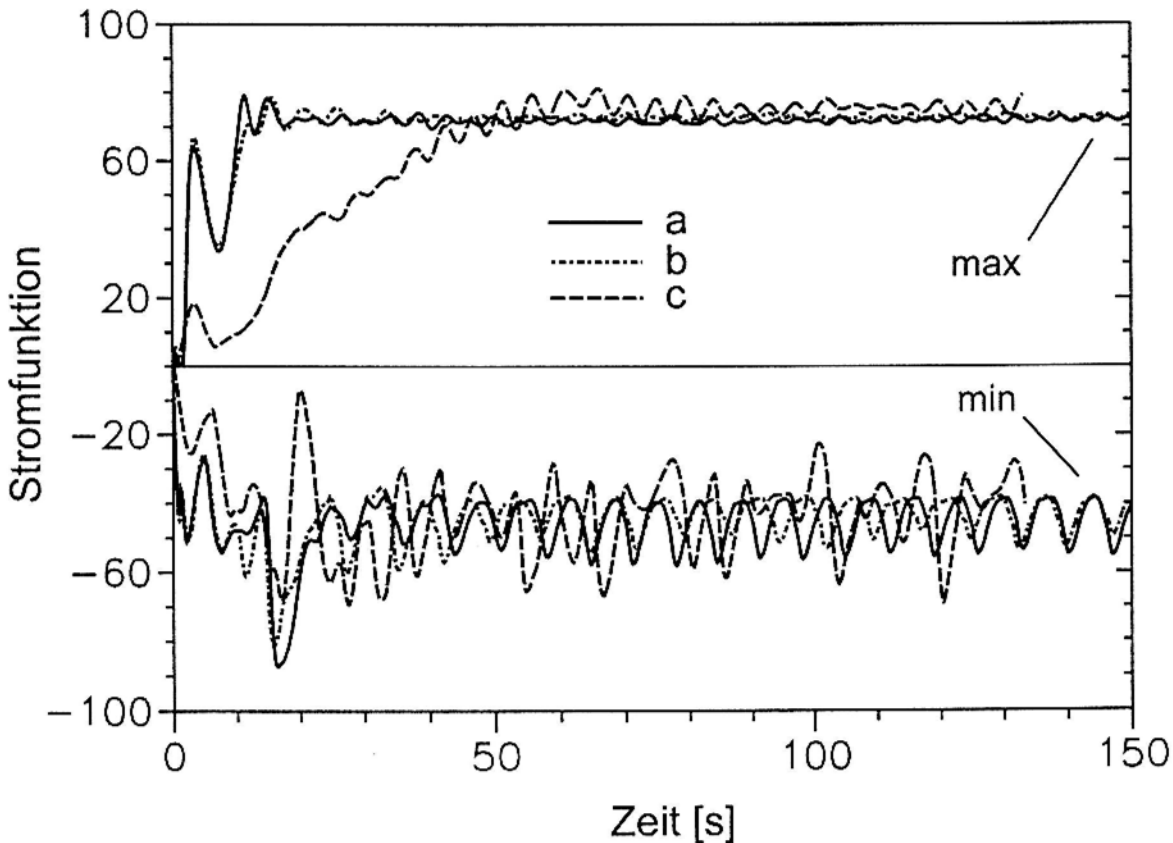


Bild 4.28: Zeitlicher Verlauf des Minimums und Maximums der Stromfunktion für zwei unterschiedliche Gitternetze: (a) 7760 und (b) 3006 Elemente. Die gestrichelten Linien (c) entsprechen den Fall ohne Marangoni- und EM-Kräfte

Um den Einfluß der unterschiedlichen Kräfte auf die Strömung zu analysieren wurden die Strömungsberechnungen ohne Einfluß der EM- und Marangoni-Kräfte wiederholt ( $Em=0$ ,  $Ma=0$ ). Die entsprechenden Isolinien der Stromfunktion sind im Bild 4.27-d dargestellt. Die Struktur der Strömung mit zwei Hauptwirbeln bleibt in etwa gleich, was auf die dominierende Rolle des thermischen Auftriebs gegenüber der EM- und Marangoni-Konvektion in diesem Parameterbereich hinweist. Die Unterschiede zwischen beiden Fällen treten hauptsächlich in den zentralen Bereich auf, insbesondere in der Nähe der Kristallisationsfront. Natürlich müssen bei genauer Berechnung der Temperatur- und Geschwindigkeitsfelder die Marangoni- und EM-Kräfte berücksichtigt werden.

Zur Abschätzung der dominierenden Konvektionsmechanismen kann auch die dynamische Bond-Zahl verwendet werden, die das Verhältnis zwischen Auftriebs- und Marangoni-Kräften beschreibt [51]:

$$Bo = \frac{Gr}{Ma} = \frac{\beta g \rho R_0^2}{\partial \gamma / \partial T}.$$

Für  $Bo > 1$  dominiert die thermische Auftriebskonvektion gegenüber der Marangoni Konvektion. Für die berechnete FZ-Anlage mit 100 mm Kristallradius ist  $Bo = 63.3$ , was auf die Dominanz des thermischen Auftriebs hinweist. Bei größeren Kristalldurchmessern ist der thermische Auftrieb von immer größerer Bedeutung.

Im Bild 4.28 ist die Zeitabhängigkeit des Minimums und Maximums der Stromfunktion bzw. die Intensität des inneren und äußeren Wirbels dargestellt. Die Periode der Oszillationen ist etwa dreimal kleiner als die Periodendauer der Kristallrotation. Das System hat den quasistationären Zustand nach etwa 20 Sekunden erreicht.

Im Bild 4.28 ist ebenfalls ein Vergleich der Ergebnisse bei unterschiedlichen Gitternetzen abgebildet. Die durchgezogene Linie entspricht dem Gitternetz mit 7760 Elementen, die Punktlinie entspricht dem Netz mit 3006 Elementen. Sowohl der Mittelwert der Stromfunktion als auch die Frequenz und Amplitude der Oszillationen stimmen sehr gut überein, was die Genauigkeit der nichtstationären Berechnungen

bestätigt. Es wurden auch Berechnungen mit unterschiedlichen Zeitschritten verglichen. Der Zeitschritt ist so klein gewählt, daß eine Verdoppelung des Zeitschrittes keinen sichtbaren Einfluß auf das zeitliche Verhalten der Stromfunktion hat.

Mit der gestrichelten Linie im Bild 4.28 sind die Berechnungsergebnisse für den Fall ohne Marangoni- und EM-Kräfte dargestellt. Die Ähnlichkeit der Kurven bestätigt, daß die Situation von der thermischen Konvektion bestimmt ist.

#### 4.4.1 Einfluß auf die Form der Phasengrenzen

Bei der Analyse der Form der Phasengrenzen wurde auf die Strömungsberechnungen verzichtet. In diesem Unterkapitel werden die Berechnungsergebnisse dargestellt, die den Einfluß der Strömung auf die Form der Phasengrenze gemäß Iterationsschema (Kapitel 3.5) berücksichtigen. Die Phasengrenze (Kristallisationsfront) hat die endgültige Form nach 3 Iterationen angenommen.

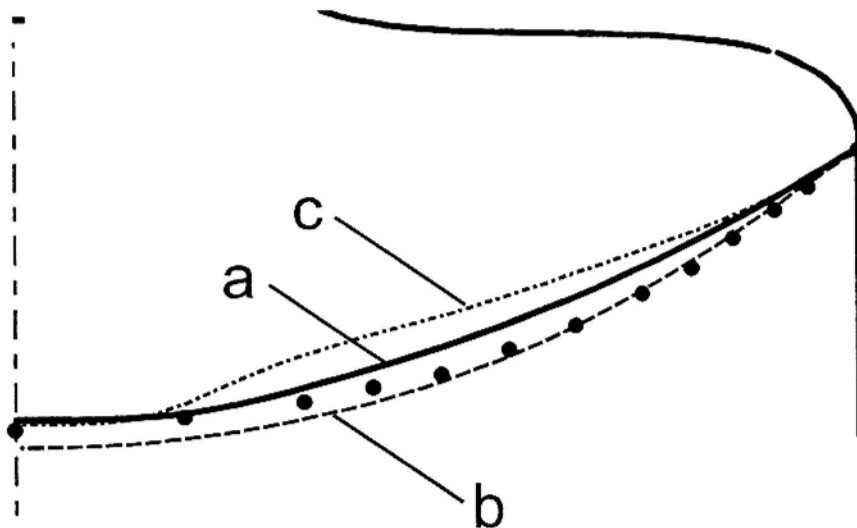


Bild 4.29: Einfluß der Schmelzenströmung auf die Form der Kristallisationsfront. a) - Strömung bei Kristallrotation 5 U/min, b) - ohne Strömung, c) - Strömung ohne Rotation. Die Punkte stellen die gemessene Form der Phasengrenze dar

Im Bild 4.29 ist die Form der Kristallisationsfront bei drei unterschiedlichen Strömungen in der Schmelzenzone dargestellt. Linie (a) entspricht der Basiskonfiguration mit Kristallrotation 5 U/min, die Punkte stellen die gemessene Form der Phasengrenze dar. Linie (b) ist die Phasengrenze ohne Berücksichtigung der Schmelzenströmung. Der Abstand zwischen den Linien beträgt 2 - 3 mm. Linie (c) ist die Form der Phasengrenze für einen nichtrotierenden Kristall. In diesem Fall ist der Strömungseinfluß größer. Bei höherer Kristallrotation wird der Einfluß der Strömung immer kleiner (siehe nächstes Unterkapitel). Die Formänderung der Schmelzenzone beeinflusst die Konvektion sehr wenig. Der Unterschied zwischen Minima und Maxima der Stromfunktion in den Berechnungsgebieten (a) und (b) ist viel kleiner als die Amplitude der zeitlichen Oszillationen der Stromfunktion. Deswegen können die Konvektionsberechnungen mit ausreichender Genauigkeit auch ohne Neuberechnung der Phasengrenzen durchgeführt werden.

#### **4.4.2 Zusammenhang zwischen dem instationären Geschwindigkeitsfeld und der Widerstandsverteilung im gezüchteten Kristall**

Die berechneten Oszillationen der Temperatur und der Strömungsgeschwindigkeit können für die Analyse des Dotierstoffeinbaus und der Widerstandsverteilung im Kristall verwendet werden.

Im Bild 4.30 sind die berechneten normalen Ableitungen der tangentialen Geschwindigkeit an der Kristallisationsfront dargestellt. Jede Kurve entspricht einem Zeitpunkt, das Zeitintervall zwischen zwei Kurven ist 0.05 s. Die Parameter entsprechen der Basiskonfiguration (Strömungsbilder in Bild 4.27). Die Schwankungen der Geschwindigkeit sind im zentralen Bereich, wo der mittlere Wirbel nahe an der Phasengrenze liegt, sehr ausgeprägt. Im äußeren Bereich und in der Nähe der Symmetrieachse sind die Geschwindigkeitsschwankungen sehr klein.

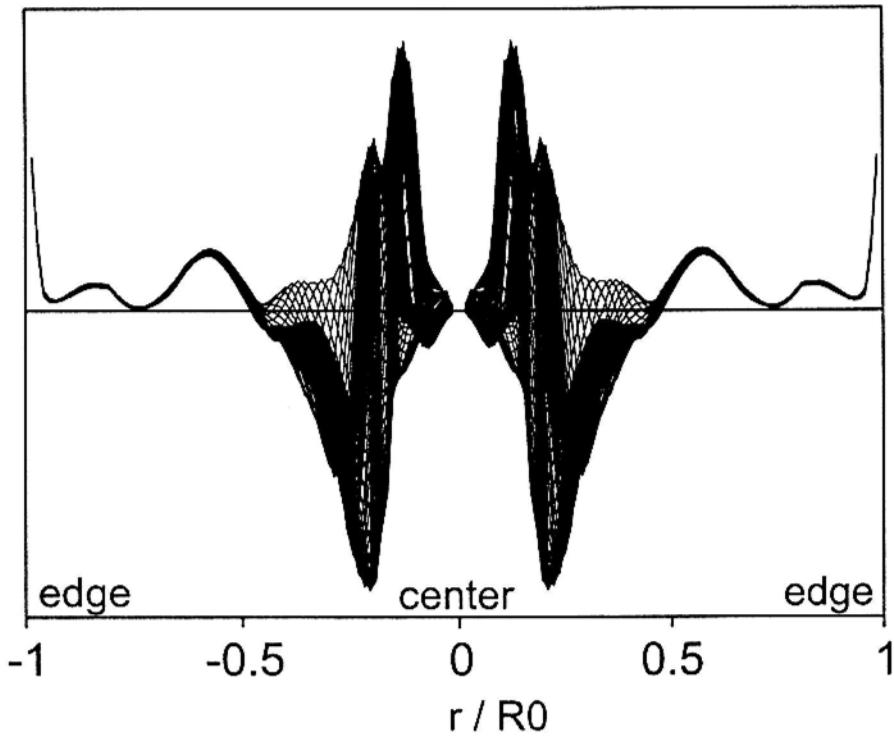


Bild 4.30: Verteilung der normalen Ableitung der tangentialen Geschwindigkeit an der Kristallisationsfront für mit 0.05 sek. aufeinanderfolgende Zeitpunkte (Parameter entsprechen der Berechnung von Bild 4.27 a,b,c)

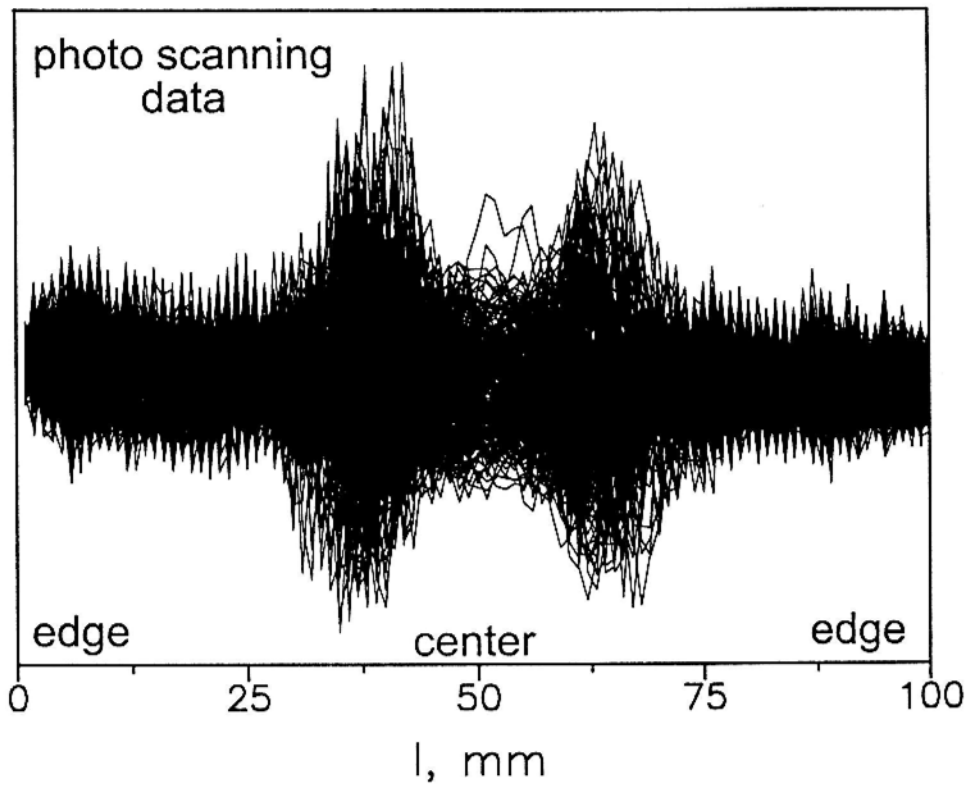


Bild 4.31: 210 Photo-Scanning Profile in radialer Richtung über den Kristalldurchmesser mit axialem Abstand 0.1 mm.  $R_0 = 51.5$  mm, Ziehgeschwindigkeit 3.3 mm/min, Kristallrotation 5 U/min (nach [29])

Die Konvektion in der Schmelze bestimmt den Dotierstoffeinbau und damit auch den lokalen elektrischen Widerstand des Kristalls, wobei eine höhere Dotierstoffkonzentration einem kleineren Widerstand entspricht. Während des Kristallwachstums entsteht in der Schmelze an der Kristallisationsfront eine Diffusionsgrenzschicht mit erhöhter Dotierstoffkonzentration [52], weil die Dotierstoffe mit kleinerer Wahrscheinlichkeit als die Siliziumatome im wachsenden Kristall eingebaut werden. Im Schmelzenvolumen außerhalb der Grenzschicht ist die Dotierstoffkonzentration nahezu konstant. Das Verhältnis zwischen den Dotierstoffkonzentration in gewachsenen Kristall  $c_C$  und in der Schmelze  $c_M$  direkt an der Phasengrenze wird Gleichgewichtsverteilungskoeffizient  $k_0$  genannt. Der effektive Verteilungskoeffizient  $k_{eff}$  stellt das Verhältnis zwischen Dotierstoffkonzentration im Schmelzenvolumen und Kristall dar [53]

$$k_{eff} = \frac{k_0}{k_0 + (1 - k_0) \cdot \exp(-u_C \delta_D / D)}, \quad (4.11)$$

und ist von der Ziehgeschwindigkeit  $u_C$ , Dicke der Diffusionsgrenzschicht  $\delta_D$  und vom Diffusionskoeffizienten  $D$  abhängig. Die Dicke der Diffusionsgrenzschicht ist wiederum von der Strömungsgeschwindigkeit abhängig. Nach der klassischen Grenzschichttheorie ist

$$\hat{\delta}_D \sim Re^{-1/2} Sc^{-1/2}, \quad (4.12)$$

wobei  $Sc = \nu/D$  die Schmidt- und  $Re$  die Reynolds-Zahlen sind. An einer rotierenden Scheibe, was besser der Situation bei der Kristallzüchtung entspricht, wird die Dicke der Grenzschichtes mit folgender Gleichung beschrieben [54]:

$$\delta = 1.6 Sc^{-1/3} (\nu / W_C)^{1/2}. \quad (4.13)$$

Die Formeln (4.11)-(4.13) zeigen, daß die momentane Dotierstoffkonzentration im Kristall von der Ziehgeschwindigkeit und von der Strömungsgeschwindigkeit an der Kristallisationsfront abhängig ist. Die Schwankungen der Ziehgeschwindigkeit werden von den Temperaturschwankungen verursacht, die wiederum den Strömungsschwankungen folgen. Die Berechnungen zeigen, daß die Temperaturschwankungen einen ähnlichen radialen Verlauf wie die Geschwindigkeitsschwankungen (Bild 4.30) haben, deswegen wird hier die

Geschwindigkeitsschwankung mit der Widerstandsschwankung verglichen. Genauere Quantitative Zusammenhänge sind z.B. in [55] und [56] als zeitabhängige numerische Simulation der Dotierstoffkonzentration bei periodischer Änderung der Ziehgeschwindigkeit und in [57] bei periodischen Temperaturschwankungen dargestellt.

Wenn die Strömungsgeschwindigkeit an der Kristallisationsfront schwankt, müssen auch ähnliche Schwankungen der Dotierstoffkonzentration und des elektrischen Widerstands im gewachsenen Kristall räumlich abgebildet sein. Bei höheren Geschwindigkeit wird die Dicke der Grenzschicht kleiner, die Dotierstoffkonzentration im Kristall kleiner und der Widerstand höher.

Die berechneten Geschwindigkeitskurven werden mit photo-scanning- Messungen in einem vertikalen Kristallquerschnitt (Bild 4.3) verglichen. Die Meßsignale sind der axialen Ableitung des elektrischen Widerstands proportional. Bild 4.31 zeigt die Ergebnisse als Kurven in radialer Richtung bei unterschiedlicher axialer Position mit einem Schritt von 0.1 mm. Die Amplitude der gemessenen Widerstandsszillationen zeigen die gleiche radiale Verteilung mit zwei Maxima wie die Geschwindigkeitsschwankungen in Bild 4.31. Die Messung zeigt auch Widerstandsschwankungen über den ganzen Kristalldurchmesser, die eine etwa zwei mal kleinere Amplitude als die Maxima haben. Diese Schwankungen werden Rotationstriations genannt und entstehen wegen der Unsymmetrie der Anlage, besonders wegen des Induktorspaltes. Dieser Vergleich gilt als wichtiger indirekter Beweis für die Genauigkeit der verwendeten Modelle und der Strömungsberechnung, da eine direkte Messung der Strömungsgeschwindigkeiten wegen des sehr hohen Aufwands und der Komplexität noch nicht in einer FZ-Anlage durchgeführt worden ist.

### 4.4.3 Parameterstudien

Einer der wichtigsten Einflußparameter für die Schmelzenströmung, der sich rechnerisch genauso einfach wie praktisch verändern läßt, ist die Kristallrotation. Es wurden drei Berechnungen mit unterschiedlicher Kristallrotation berechnet - 5 U/min, 10 U/min und 20 U/min ( $Re_C = 4090, 8180, 16360$ ). Die andere Parameter entsprechen der Basiskonfiguration.

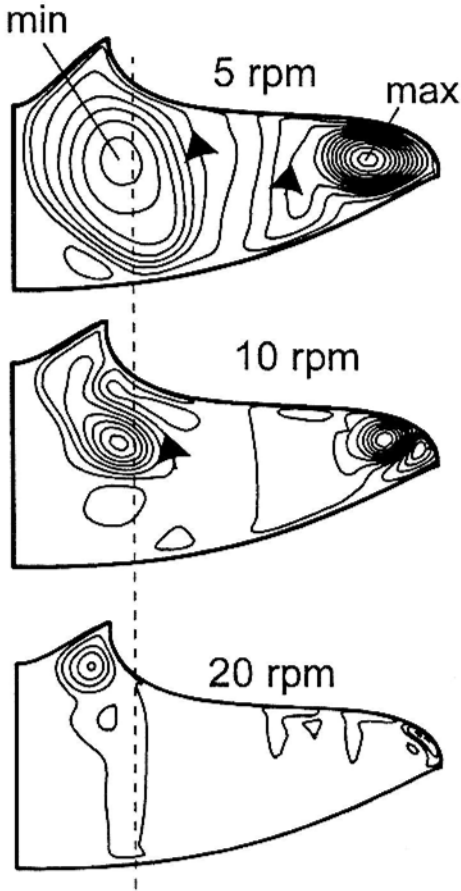


Bild 4.32: Isolinien der Stromfunktion bei unterschiedlichen Kristallrotation

Im Bild 4.32 sind die Isolinien der Stromfunktion für alle drei Varianten dargestellt. Die Änderung der Stromfunktion zwischen zwei benachbarten Isolinien  $d\psi$  ist in allen Bildern gleich. Man sieht, daß die meridionale Konvektion bei zunehmenden Rotationsgeschwindigkeit unterdrückt wird - es bleiben immer weniger Stromlinien im Schmelzenvolumen. Bei 20 U/min ist eine bemerkbare Konvektion nur noch am Vorratsstab und an der freien Oberfläche vorhanden. Im übrigen Volumen rotiert die Schmelze praktisch wie ein starrer Körper. Die Durchmischung in der Schmelze wird

verhindert und damit kann eine hohe radiale Inhomogenität der Dotierstoffverteilung auftreten. Die Temperaturverteilung bei höheren Rotationsgeschwindigkeit wird von der Konvektion weniger beeinflusst und gleicht sich der Temperaturverteilung ohne Konvektion an.

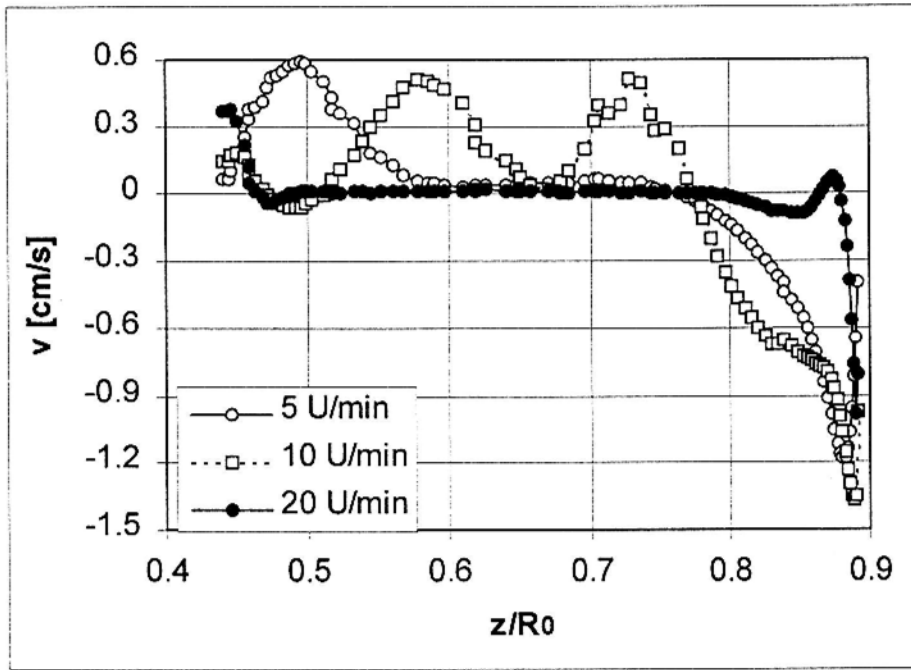


Bild 4.33: Radiale Geschwindigkeitskomponente  $u_r$  im vertikalen Querschnitt bei  $r/R_0 = 0.28$  für unterschiedliche Kristallrotationsgeschwindigkeiten

Wenn auch bei höheren Rotationsgeschwindigkeiten die Konvektion unterdrückt ist, bildet sich an der Kristallisationsfront eine Randschicht mit hoher Geschwindigkeit. Im Bild 4.33 ist die radiale Geschwindigkeitskomponente  $u_r$  entlang der vertikalen Linie bei  $r/R_0 = 0.28$  für unterschiedliche Kristallrotationsgeschwindigkeiten dargestellt. Man sieht, daß bei höherer Rotationsgeschwindigkeit die Geschwindigkeit in der Nähe der Kristallisationsfront sogar größer geworden ist. Bei dominierenden zentrifugalen Kräften entwickeln sich an festen Wänden *Eckman*-Randschichten [54]. Nach der allgemeinen Randschichttheorie ist die Dicke der *Eckman*-Randschichtes

$$\hat{\delta} = \sqrt{E} = \frac{1}{\sqrt{\text{Re}_c}},$$

wobei  $E$  die *Eckman*-Zahl ist. Für eine rotierende Scheibe in unendlicher ruhender Flüssigkeit (*Karman*-Strömung) hat die radiale Geschwindigkeitskomponente Maximum im Abstand  $\delta$  von der Oberfläche. Für eine Rotationsgeschwindigkeit 20 U/min ( $\text{Re}_c = 1.64 \cdot 10^3$ ) ist der Abstand  $\delta$  gleich 0.4 mm. Die Berechnungsergebnisse, die in Bild 4.33 dargestellt sind, zeigen das Geschwindigkeitsmaximum auch exakt mit 0.4 mm Abstand von der Kristallisationsfront, was die Entwicklung der *Eckman*-Randschichten bei höheren Rotationsgeschwindigkeiten in der Schmelzzone bestätigt.

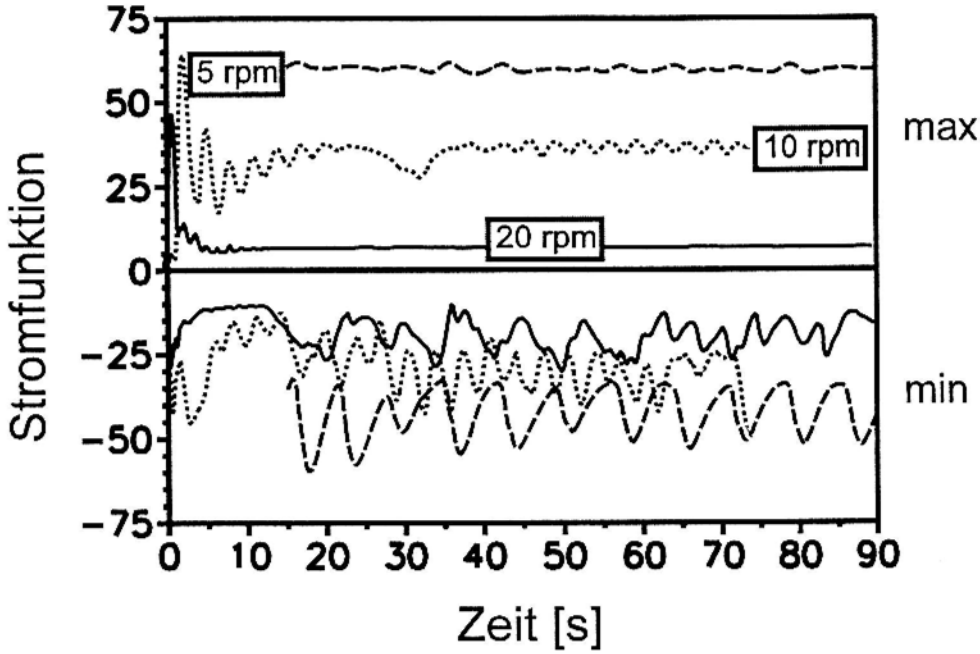


Bild 4.34: Zeitlicher Verlauf des Maximums (äußerer Wirbel) und Minimums (innerer Wirbel) der Stromfunktion bei drei unterschiedlichen Kristallrotationsgeschwindigkeiten

Im Bild 4.34 sind das Minimum und Maximum der Stromfunktion zeitabhängig dargestellt. Bei höherer Rotationsgeschwindigkeit werden die Extremwerte und deren Schwankungsamplitude kleiner. Nur der innere Wirbel am Vorratsstab weist Schwankungen auf. Der Einfluß der Kristallrotation auf die Stabilität der Strömung wird im nächsten Unterkapitel näher untersucht. Da die Änderung der Rotationsgeschwindigkeit im Bereich von einigen U/min bis zu ca. 20 - 40 U/min in der Praxis ohne weiteres realisierbar ist, ist die Rotationsgeschwindigkeit ein sehr einflußreicher Parameter für die Kontrolle der Schmelzenströmung.

Um die Analyse der weiteren Einflußparametern einfacher und durchsichtiger zu gestalten, wird in der folgenden Parameterstudie die Vorratsstab- und Kristallrotation zu null gewählt. Das verkürzt auch die Rechenzeit, weil alle untersuchten Konfigurationen ohne Rotation relativ schnell zu einer stationären Lösung konvergieren.

Der Einfluß der Induktorform auf die Konvektion ist im Bild 4.35 dargestellt. Die für die Strömungsberechnungen verwendeten Phasengrenzen sind im Bild 4.21 verglichen. Der modifizierte Induktor (2) erzeugt weniger Wärmequellen im mittleren Bereich (Bild 4.35-c), weshalb dort auch die Temperatur wesentlich niedriger ist (Bild 4.35-b). Die Isolinien zeigen, daß die Intensität des äußeren Wirbels beim Induktor (2) kleiner ist und ein zusätzlicher Wirbel am Kristallrand entsteht. Der kleine Wirbel wird von EM-Kräften erzeugt, weil beim Induktor (2) ein zusätzliches Strommaximum an der freien Oberfläche vorhanden ist (Bild 4.35-c).

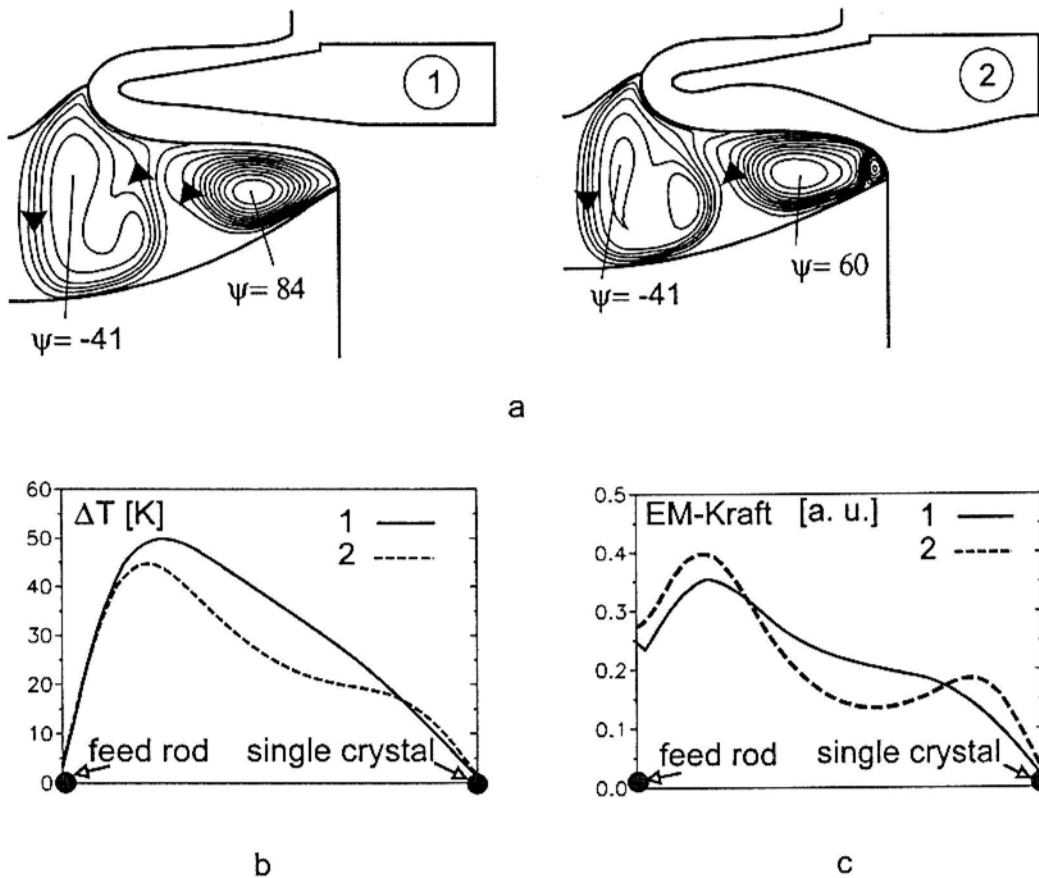
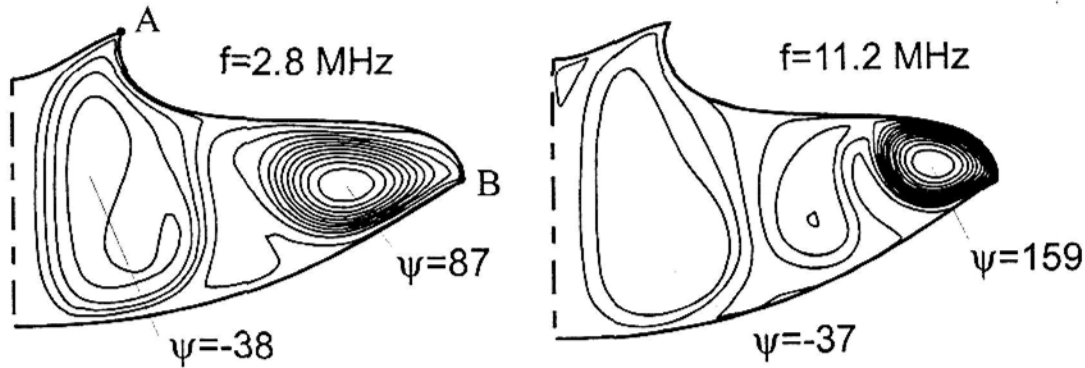


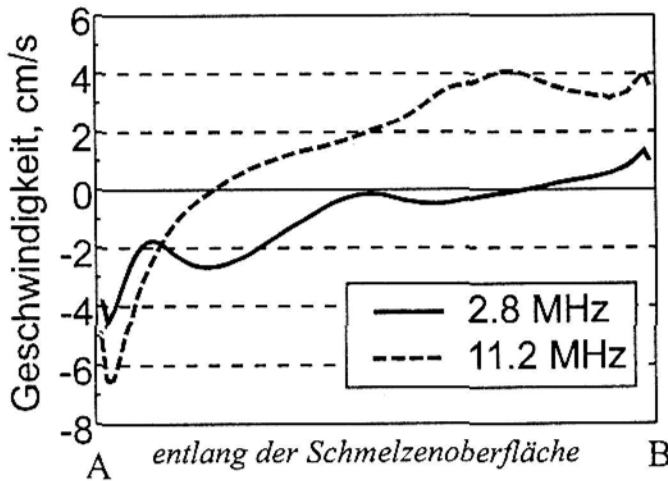
Bild 4.35: Vergleich von zwei unterschiedlichen Induktorformen: (a) - Isolinien der Stromfunktion, (b) - Temperatur an der freien Oberfläche, (c) - dimensionslose Oberflächenstromdichte an der freien Oberfläche

Im Bild 4.36 sind Berechnungsergebnisse für zwei unterschiedliche Stromfrequenzen - 2.8 MHz und 11.2 MHz - abgebildet. Die entsprechenden Phasengrenzen sind im Bild 4.23 verglichen. Bei einer viermal höheren Frequenz sind die EM-Kräfte um den

Faktor zwei kleiner. Der innere Wirbel zeigt keine besondere Änderungen, der äußere Wirbel ist intensiver und gleichzeitig kleiner geworden. Die EM-Kräfte in oberflächennahen Schicht wirken hauptsächlich den Marangoni- und Auftriebskräften entgegen. Das ist gut im Bild 4.36b zu sehen, wo die tangentielle Geschwindigkeit entlang der freien Oberfläche dargestellt ist. Bei 2.8 MHz sind die Strömungsgeschwindigkeiten in weiten Bereichen unter 1 cm/s, bei 11.2 MHz steigen die Geschwindigkeiten über 4 cm/s. Natürlich können mit Berücksichtigung der Rotation diese Einflüsse weniger ausgeprägt sein.



a



b

Bild 4.36: Isolinien der Stromfunktion (a) und tangentielle Geschwindigkeit an der freien Oberfläche bei unterschiedlichen Stromfrequenzen

Im Bild 4.37 sind die Berechnungsergebnisse bei unterschiedlichen Kristalldurchmessern dargestellt. Der Induktor und Vorratsstab sind in beiden Varianten gleich, der Kristalldurchmesser beträgt 75 bzw. 125 mm. Bei kleinem

Durchmesser sind beide Wirbel fast gleich intensiv, bei großem Durchmesser ist die Intensität des äußeren Wirbels viel größer - die Strömungsgeschwindigkeit ist etwa viermal größer als bei dem kleineren Kristall. Die Ursache dafür ist veränderte Geometrie der Schmelzenzone und die ca. viermal größere Grashof-Zahl  $Gr$ . Die größere Durchbiegung bzw. der steilere Winkel der Kristallisationsfront verstärken die Auftriebskonvektion im äußeren Wirbel. Der innere Wirbel nimmt bei großem Kristalldurchmesser ein relativ kleines Volumen ein, weil der Halsdurchmesser durchmesserunabhängig bleibt. Deshalb ist auch die Intensität des Wirbels kleiner. Die kleinen unterschiedlich positionierten Wirbel an der freien Oberfläche werden von EM-Kräften erzeugt.

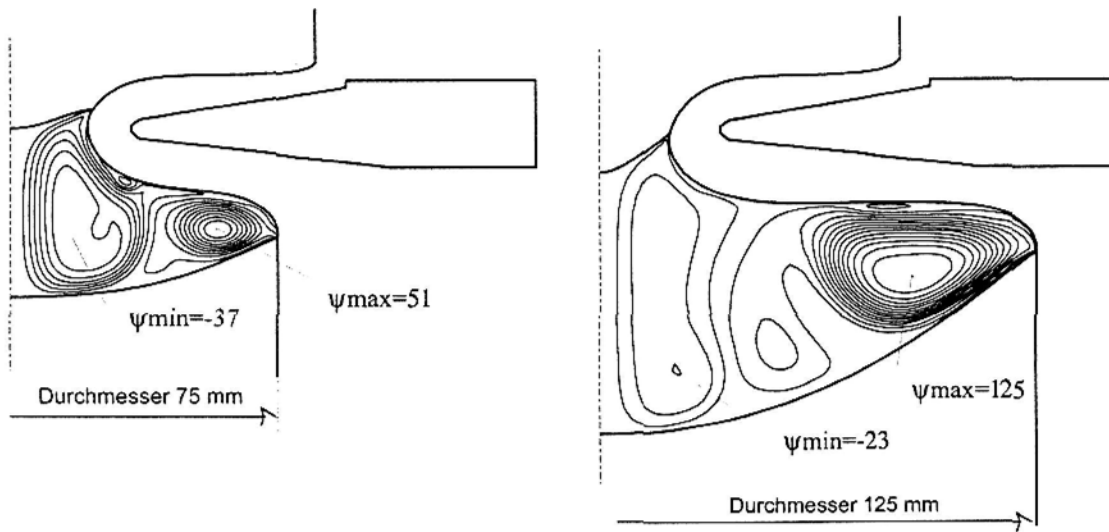
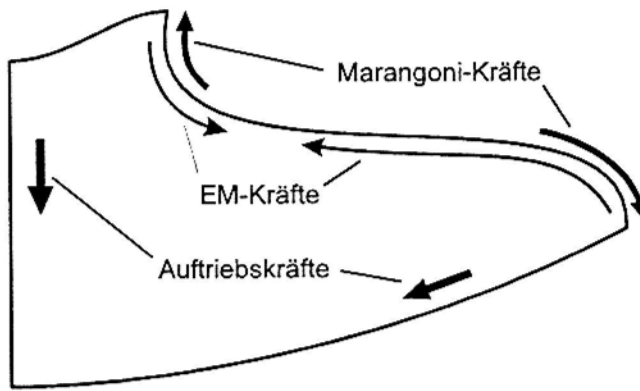


Bild 4.37: Konvektion in der Schmelzzone bei unterschiedlichen Kristalldurchmessern

Aus der Strombelag- und Temperaturverteilungen an der freien Oberfläche kann man Information über die Kräfteverteilung einzelner Konvektionsmechanismen für typische FZ-Konfigurationen erhalten. Die Strombelagsverteilung an der Schmelzenoberfläche hat ein Maximum in Abstand von ca.  $1/3$  der Gesamtlänge des Vorratsstabs (Bild 4.35-c, durchgezogene Linie). Die EM-Konvektion ist vom Kristall und Vorratsstab zu diesem Maximum hingerrichtet, wobei die Kraft proportional zur tangentialen Ableitung der Stromstärke im Quadrat ist (siehe Formel (3.43)).

Die Temperaturverteilung an der Oberfläche ist der Strombelagsverteilung sehr ähnlich (Bild 4.35-b). Die Marangoni-Konvektion ist vom Gebiet mit höherer



*Bild 4.38: Schematische Darstellung der in der Schmelzzone wirkenden Kräfte und der Strömungsrichtungen*

Oberflächentemperatur zur niedrigeren Temperatur hingerrichtet, in diesem Fall - von der Mitte zum Kristall und Vorratsstab. Die Kraft ist dem Temperaturgradienten an der Oberfläche proportional.

Die thermische Auftriebskraft ist eine Volumenkraft, die wegen der Dichteunterschiede in der Schmelze entsteht. Wenn sich nebeneinander zwei Zellen mit unterschiedlichen Temperatur befinden, steigt die wärmere und leichtere Schmelze nach oben und kältere Schmelze sinkt ab. Die Isothermen in Bild 4.27 zeigen, daß in der FZ-Konfiguration zwei Gebiete mit starken radialen Temperaturgradienten vorhanden sind. Die kalte Schmelze sinkt vom dem Vorratsstab im Zentrum und im äußeren Bereich entlang der Kristallisationsfront nach unten. Die so ermittelten allgemeinen Krafrichtungen sind im Bild 4.38 schematisch dargestellt. Die Rotationskräfte, die im nächsten Unterkapitel genauer betrachtet werden, bremsen die radiale Geschwindigkeitskomponente und dadurch die Strömung allgemein.

#### 4.4.4 Stabilität der Strömung

Die Berechnungen haben gezeigt, daß man bei bestimmten Parametern eine nichtstationäre oszillierende Konvektion als Lösung der HD Gleichungen bekommt. Die Lösung ohne Rotation ist im untersuchten Parameterbereich immer stationär. Das deutet auf die mit der Kristallrotation verbundenen Kräfte als Ursache für die Geschwindigkeitsoszillationen hin. Die numerischen Effekte wurden mit gleichbleibenden Ergebnissen bei unterschiedlichen FE Netzen, Zeitschritten und Berechnungsgenauigkeiten weitgehend ausgeschlossen.

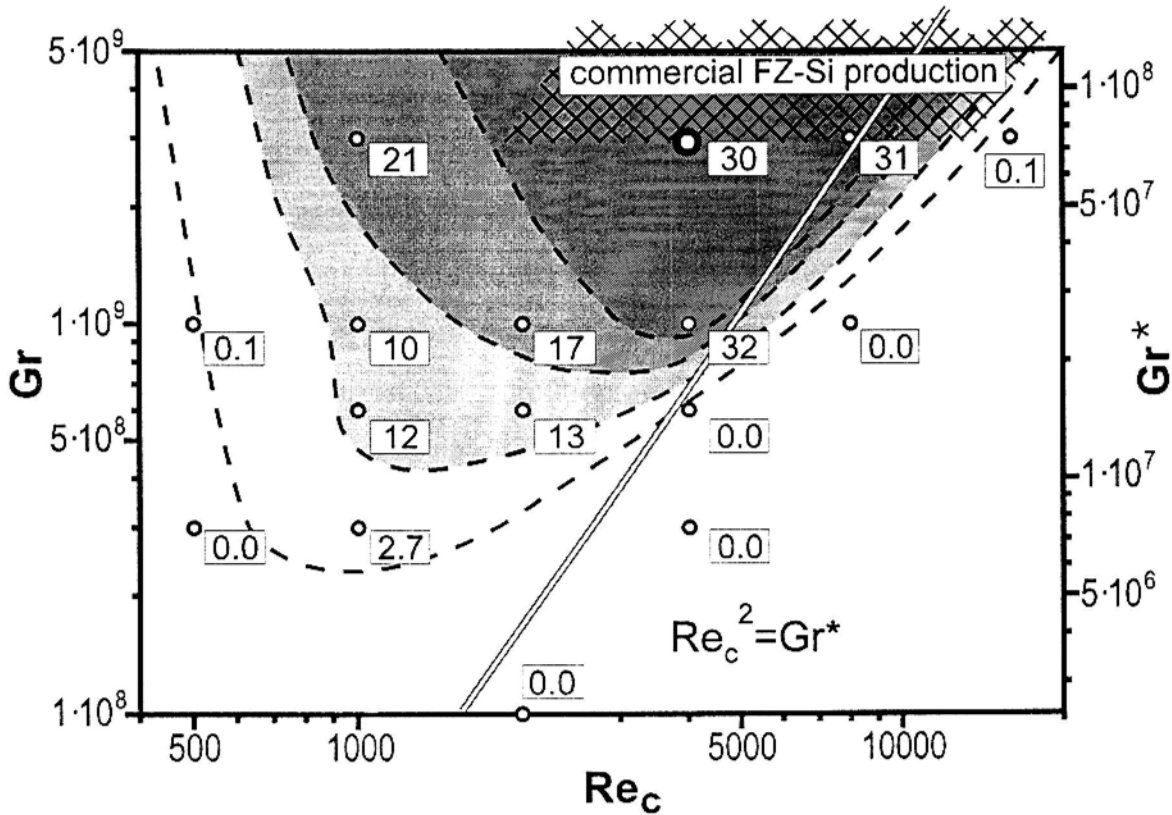


Bild 4.39: Stabilitätsdiagramm der Schmelzenströmung

Das Parametergebiet, wo die instationären Lösungen auftreten, wurde genauer untersucht. Die Anzahl der geänderten Parameter mußte begrenzt werden. Als Quelle für Rotationskräfte wurde die Kristallrotation ausgewählt. Die Rotation des Vorratsstabes wurde zu null gewählt. Als Antriebskraft in der meridionalen Ebene wurde der thermische Auftrieb gewählt, der in typischen FZ-Anlagen

dominierende Kraft ist. Es wurden 16 Strömungsberechnungen bei unterschiedlichen  $Re_C$  und  $Gr$  Zahlen durchgeführt und die Stabilität der Lösungen untersucht. Als Stabilitätskriterium wurde die Amplitude der Schwankungen des Stromfunktionsminimums, d.h. die zeitliche Änderung der Strömungsintensität im inneren Wirbel gewählt. Amplituden im äußeren Wirbel lieferten ähnliche Ergebnisse. Im Bild 4.39 sind die Isolinien der Schwankungsamplitude im Parameterbereich  $Re_C$  und  $Gr$  dargestellt. Die Berechnungspunkte sind mit kleinen Kreisen gekennzeichnet, die Schwankungsamplitude ist bei jedem Punkt notiert.

Die Temperaturdifferenz in der Schmelzenzone bestimmt die Intensität des thermischen Auftriebs. In den Berechnungen wird die Schmelztemperatur  $T_0$  für die Bestimmung der  $Gr$ -Zahl benutzt. Dieser Wert, der die Strahlung gut beschreibt, ist viel höher als die charakteristische Temperaturdifferenz in der Schmelze. Die Berechnungsergebnisse (Tab. 5) zeigen, daß diese Temperaturdifferenz von der Form der Schmelzenzone stark abhängig ist und etwa zwischen  $0.022 \cdot T_0$  und  $0.042 \cdot T_0$  liegt. Die Temperaturdifferenz in der Schmelzenzone, die für die Stabilitätsberechnungen benutzt wurde, ist  $0.025 \cdot T_0$ . Um die Ergebnisse besser mit anderen Berechnungen vergleichen zu können, ist die Einführung der modifizierten charakteristischen Temperatur für den thermischen Auftrieb  $T_0^* = 0.025 \cdot T_0$  in der Formel für den Parameter  $Gr^*$  sinnvoll. Die entsprechenden Werte des Parameters  $Gr^*$  sind im Bild 4.39 an der rechten Achse gezeigt.

Aus dem Bild 4.39 sieht man, daß Schwankungen bei  $Gr > 3 \cdot 10^8$  entstehen können, was einem Kristallradius  $R_0 > 25$  mm ( $Gr \sim R_0^3$ ) entspricht. Bei niedriger Kristallrotation und hoher Kristallrotation ist die Konvektion stabil, bei mittleren Rotationsgeschwindigkeiten ist die Strömung instabil. Ähnlicher Effekt, in dem die Instabilität bei mittleren Rotationsgeschwindigkeiten auftritt, wurde in rotierenden Flüssigkeiten von *Gelfgat* und *Gorbunov* in [63] numerisch und experimentell beobachtet. Das Gebiet mit den Parametern der kommerziellen FZ-Si Produktion liegt etwa zwischen  $R_0 = 50 - 80$  mm und  $W_C = 3 - 16$  U/min. Dieser Bereich entspricht den dimensionslosen Parametern  $Gr = 2.7 \cdot 10^9 - 1.1 \cdot 10^{10}$ ,  $Re_C = 2.4 \cdot 10^3 - 3.3 \cdot 10^4$  und ist im

Diagramm schraffiert. Man sieht, daß dieser Bereich in Gebiet der instationären Konvektion liegt.

Allgemein betrachtet ist die Ursache einer periodischen Änderung einer beliebiger Größe mit einem Energieübergang (Umwandlung) verbunden. Als klassische Beispiele kann man den mathematischen Pendel (kinetische Energie und potentielle Energie) oder den elektrischen Schwingkreis (Energie des magnetischen und elektrischen Feldes) nennen. Im konkreten Fall findet der Übergang der Energie von meridionaler (radialer) zu azimuthaler Strömung statt. Es wird weiter der Einfachheit halber die radiale Geschwindigkeitskomponente statt der meridionalen Komponente verwendet, auch deswegen, weil die Oszillationen an der Kristallisationsfront betrachtet werden. Die Oszillationen sind besonders stark ausgeprägt, wenn die Energien beider Strömungskomponenten etwa gleich sind:

$$\frac{1}{2} \rho u_{\varphi}^2 = \frac{1}{2} \rho u_r^2.$$

Mit der Annahme  $u_r \sim Gr^{1/2}$  kann man diese Gleichung mit dimensionslosen Parametern ausdrücken:

$$Gr^* = Re^2.$$

Diese Linie ist im Bild 4.39 eingetragen. Man sieht, daß die Position der Linie mit der Position der größten Amplitude der Oszillationen übereinstimmt. Wenn  $Gr^* \gg Re^2$ , dominiert die meridionale Strömung, im anderen Fall - die azimuthale Strömung. In beiden Fällen ist die Strömung stabil, weil relativ wenig Energie ( $\Delta E/E \ll 1$ ) von einer zur anderen Strömungskomponente übertragen werden kann.

Die periodischen Schwankungen der Strömungsgeschwindigkeit und die Ursache des Energieübergangs kann man mit folgenden Modell beschreiben. Am Anfang rotiert die Flüssigkeit als fester Körper und es findet keine meridionale Konvektion statt. Es wird angenommen, daß an einem Ort die Rotationsgeschwindigkeit größer ist als woanders auf diesem axialen Querschnitt und die Isolinien der azimuthalen Geschwindigkeit gebogen sind (Bild 4.40). Der axiale Gradient der azimuthaler Geschwindigkeit

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{u_\varphi^2}{r} \right)$$

ist eine Quelle in der Wirbeltransportgleichung (3.34). Da, wo die Isolinien der azimuthalen Geschwindigkeit gebogen sind, entstehen Gebiete mit positiver bzw. negativer Wirbelfunktion (Rotor der Geschwindigkeit). Laut Gleichung (3.35) ist die Wirbelfunktion die Quelle für die Generation der Stromfunktion und

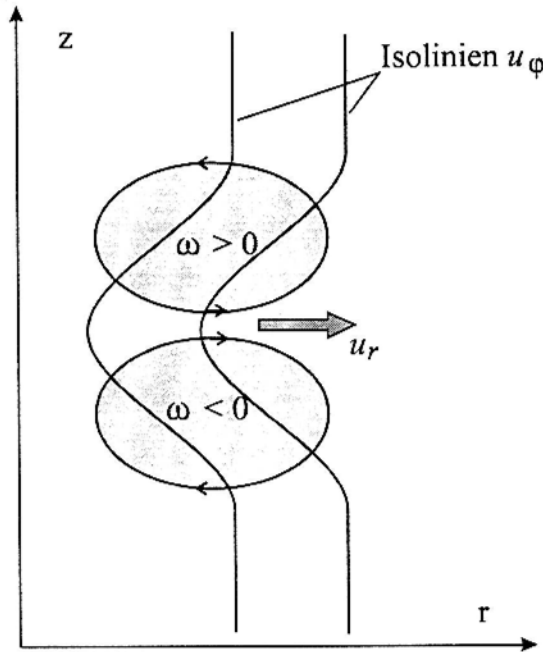


Bild 4.40: Zur Erklärung der Strömungszillationen

dementsprechend der meridionalen Strömung. Es werden zwei Wirbel erzeugt, die die schneller rotierende Flüssigkeit nach außen transportieren. Wegen der Trägheit fließt die Flüssigkeit weiter nach außen, wenn auch der axiale Gradient der azimuthalen Geschwindigkeit ausgeglichen ist. Die Isolinien krümmen sich in die andere Richtung, und der Prozess wiederholt sich erneut.

In der Literatur sind viele Mechanismen der Strömungsinstabilität beschrieben. Als Beispiele kann man die *Benar-Rayleigh* Instabilität (siehe Unterkapitel 3.4.4), baroklinische Wellen [58], [59], *Taylor-Wirbel* [31], [60] und Trägheitswellen (*inertial waves*) [61] nennen. Die letzten vier Beispiele beziehen sich auf die Instabilität in rotierenden Flüssigkeiten.

Die in dieser Arbeit berechneten instationären Strömungen lassen sich am besten der Klasse der Trägheitswellen zuordnen. Die Trägheitswellen im klassischen Sinne werden als sehr kleine oszillatorische Störungen in rotationsdominierten Strömungen betrachtet, wo die azimuthale Geschwindigkeit viel größer ist als die meridionale Geschwindigkeit. Eine solche Flüssigkeit rotiert praktisch als ein fester Körper. Eine linearisierte Theorie gibt für einen Zylinder die Periode der Oszillationen mit

$$T_{osc} = \frac{\pi}{\Omega} \left[ 1 + \left( \frac{3.83l}{\pi R} \right)^2 \right]^{-1/2}$$

an, wobei  $l$  die Höhe und  $R$  der Radius des Zylinders sind. Die Periode ist nur von der Rotationsgeschwindigkeit und den geometrischen Verhältnissen des Systems abhängig. Trägheitswellen ähnliche Effekte mit starken meridionalen Strömungen sind in der Literatur weniger beschrieben und theoretisch analysiert. *Davidson* [62] untersuchte rotierende Flüssigkeiten mit starker meridionaler Strömung. In diesem Fall ist die Amplitude der Oszillationen viel größer und sie müssen als nichtlinear betrachtet werden. Nach [62] ist die Periode der Oszillationen mit großer Amplitude

$$T_{osc} \sim \frac{R}{u} \ln \left( \frac{u}{\Omega R} \right),$$

wobei  $u$  die Strömungsgeschwindigkeit in meridionalen Ebene ist. Man sieht, daß die Periode stark von der meridionalen Geschwindigkeit und den Abmessungen des Systems abhängig ist. Die Abhängigkeit von der Rotationsfrequenz ist untergeordnet, da sie unter dem Logarithmus steht.

Um die numerischen Stabilitätsberechnungen mit beiden Theorien zu vergleichen, wurden die Perioden der Oszillationen bei allen 16 Berechnungsvarianten bestimmt. Die Berechnungen, bei denen die Amplitude der Oszillationen sehr klein war und nach einiger Zeit sogar verschwand, wurden auch berücksichtigt und speziell vermerkt. Die dimensionslose Form der Gleichung für lineare Theorie lautet

$$T_{osc} = 4.68/Re_C,$$

wenn  $l=R$  angenommen wird. Diese Formel und die berechneten Oszillationsperiode sind im Bild 4.41 dargestellt. Die Periode der Schwankungen mit kleiner Amplitude (schwarze Rechtecke) stimmen sehr gut mit der theoretischen Abhängigkeit überein.

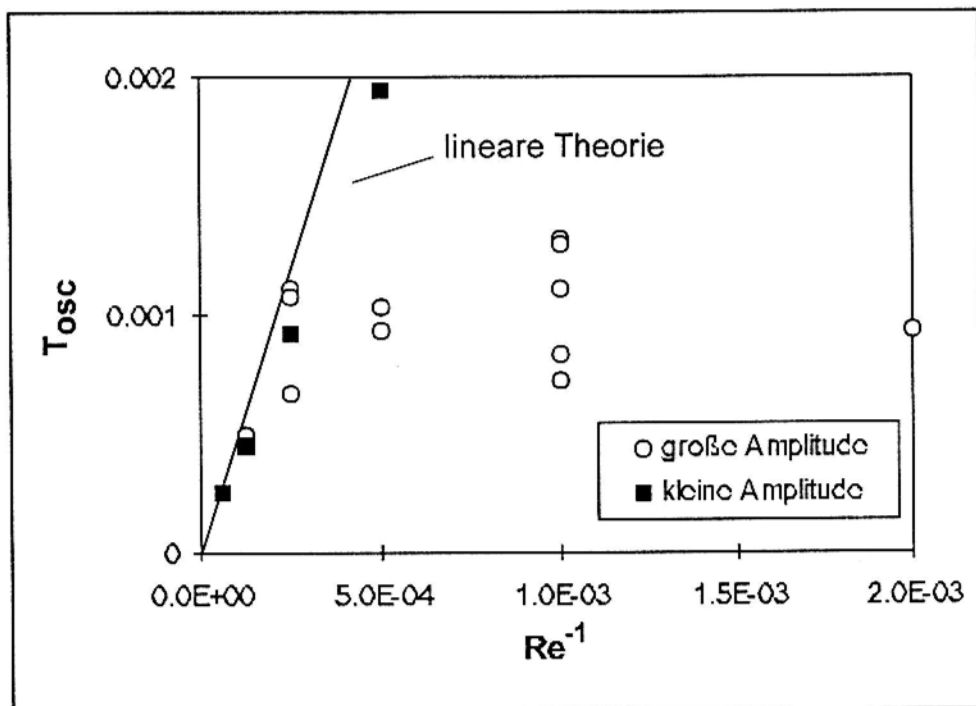


Bild 4.41: Periode der Oszillationen abhängig von  $Re_c$ : Numerische Berechnungen (Punkte) und lineare Theorie der Trägheitswellen nach [61] (Linie)

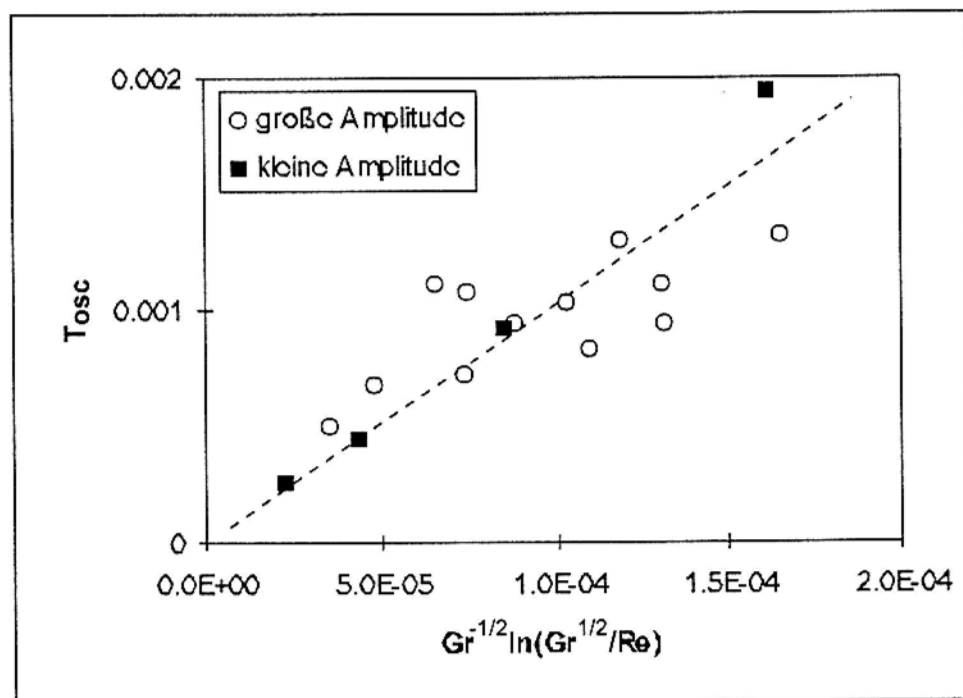


Bild 4.42: Periode der Oszillationen: Numerische Berechnungen (Punkte) und nichtlineare Theorie nach [62] (Linie)

Die Schwankungen mit großer Amplitude liegen sehr weit weg von der theoretischen Verteilung.

Die Formel für die nichtlineare Theorie in dimensionsloser Form ist

$$T_{OSC} \sim Gr^{-1/2} \ln(Gr^{1/2} / Re_C),$$

wenn  $u = Gr^{1/2}$  angenommen wird. Im Bild 4.42 sind die Achsen so gewählt, daß eine durch den Nullpunkt gezogene Gerade der theoretischen Abhängigkeit entspricht. Man sieht, daß die berechneten Perioden der Oszillationen mit großer Amplitude viel besser mit der nichtlinearen Theorie übereinstimmen.

#### 4.4.5 Ungleichmäßige Rotation des Kristalls

Eine der Methoden, mit der man die Strömung beeinflussen kann, ist die periodische Änderung der Rotationsgeschwindigkeit des Kristalls [65]. Dabei entstehen starke Gradienten der azimuthalen Geschwindigkeit, die als Bewegungsquellen für die Konvektion in der meridionalen Ebene dienen.

Die Strömung im Zentrum ist in allen bisher berechneten Varianten nach unten gerichtet. Es könnte sein, daß vom Vorratsstab abgelöste undotierte oder überdotierte Volumen mit großer Geschwindigkeit nach unten fließen und so die Konzentration von Dotierstoffen an der Kristallisationsfront kurzzeitig beeinflussen.

Aufgrund der axialen Symmetrie ist die Strömung im Zentrum sehr empfindlich gegenüber Parameteränderungen. Es können wegen der Massenerhaltung große Geschwindigkeiten auftreten. Andererseits kann im Zentrum eine Stagnationszone ohne Strömung entstehen. Numerische Berechnungen zeigen, daß bei bestimmten Parametern starke Geschwindigkeitsschwankungen im Zentrum auftreten können.

Unter Beachtung der oben genannten Überlegungen sind folgende Maßnahmen für die Verbesserung der Strömungsverhältnisse sinnvoll:

- Änderung der Strömungsrichtung im zentralen Bereich von unten nach oben;

- Periodisierung der Strömung: wenn die Strömung starken Schwankungen mit kleiner Periode unterliegt, werden die Schwankungen mit großer Periode unterdrückt und die Situation nicht so stark beeinflussen;
- Erzeugung eines stark unsymmetrischen Strömungsbildes: Die Schmelze fließt von einem Kristallrand zum anderen, die Symmetrieachse existiert nicht mehr.

Die letzte Variante wird hier nicht weiter behandelt, weil nur symmetrische Anordnungen mit dem Programm berechnet werden können. Im weiteren werden die Einflußmöglichkeiten auf die Schmelzenströmung an der Kristalloberfläche und im Schmelzenvolumen analytisch und numerisch untersucht.

### In der Schmelze wirkende Kräfte

Die Berechnungen zeigen, daß bei großer Rotationsgeschwindigkeit die Rotationskräfte eine entscheidende Rolle spielen. Deswegen werden in analytischen Modellen nur diese Kräfte betrachtet.

Wenn der Kristall mit großer konstanten Geschwindigkeit rotiert, wird die Strömung in der Schmelze unterdrückt. Die Schmelze dreht sich als ein fester Körper mit dem Kristall zusammen. Der Massentransport in der Schmelze und die Durchmischung sind gering.

Wenn sich die Rotationsgeschwindigkeit des Kristalls periodisch ändert, wird die Situation komplizierter. Die Rotationsgeschwindigkeit in der Flüssigkeit hat eine bestimmte Eindringtiefe (ähnlich dem elektromagnetischen Wechselfeld im Leiter), die von der Periode der Geschwindigkeitsschwankungen abhängig ist. So kann man die Schmelze in zwei Gebiete unterteilen: Die Randschicht, die starken Geschwindigkeitsschwankungen unterliegt und in den inneren Bereich, in dem die Rotationsgeschwindigkeit von der Zeit unabhängig ist. Dies gilt insbesondere für kleinere Geschwindigkeiten. Bei größeren Rotationsgeschwindigkeiten erzeugen die Gradienten in der Grenzschicht eine starke meridionale Konvektion im ganzen Volumen, die die Verteilung der azimuthalen Geschwindigkeit wesentlich beeinflusst.

So entsteht in der Schmelze eine intensive instationäre Strömung mit guter Durchmischung.

### Analytische Lösung

Zunächst wird die vereinfachte Gleichung der azimuthalen Geschwindigkeit  $u_\phi$ , die im folgenden mit  $u$  bezeichnet wird, betrachtet (Bild 4.43). Wenn die Gradienten der Geschwindigkeit in normaler Richtung viel größer als in tangentialer Richtung sind, ist

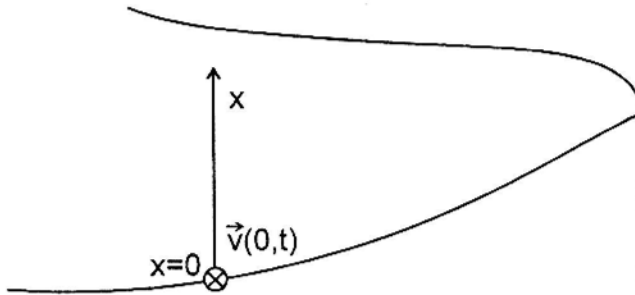


Bild 4.43: Koordinatensystem für das analytische Modell

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (4.14)$$

Die periodische Randbedingung an der Kristallisationsfront wird der Einfachheit halber zunächst mit

$$u(0,t) = A \cos(t) + B \quad (4.15)$$

angenommen.

Eine Lösung der Gleichung (4.14) mit der Randbedingung (4.15) ist

$$u(x,t) = A \cdot e^{-\frac{x}{\delta}} \cdot \cos\left(\omega t - \frac{x}{\delta}\right) + B, \quad (4.16)$$

$$\text{mit } \delta = \sqrt{\frac{2\nu}{\omega}}. \quad (4.17)$$

Man sieht, daß die Amplitude der Geschwindigkeit mit der Entfernung von der Grenze exponentiell abklingt. Dabei ist  $\delta$  die Eindringtiefe des instationären Anteils der Geschwindigkeit. In flüssigem Silizium ( $\nu=3.4\text{e-}7 \text{ m}^2/\text{s}$ ) bei der Periodendauer  $T=10 \text{ s}$  ist die Eindringtiefe  $\delta$  etwa 1 mm. Im Inneren der Flüssigkeit ist die Geschwindigkeit konstant ( $u=B$ ).

Man kann statt sinusförmiger Impulse auch andere Impulsformen verwenden, z.B. rechteckige Impulse. Solche Impulse kann man als Fourier-Reihe durch eine unendliche Summe von Sinus- und Kosinus-Funktionen ausdrücken. Für die im Bild 4.45 gezeigte Impulsform gilt:

$$u(0,t) = \frac{1}{T}(c(a-b) + Tb) + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{\pi k} (\sin(\omega ck)(a-b) \cos(\omega kt) + (a-b)(1 - \cos(\omega ck)) \sin(\omega kt)). \quad (4.18)$$

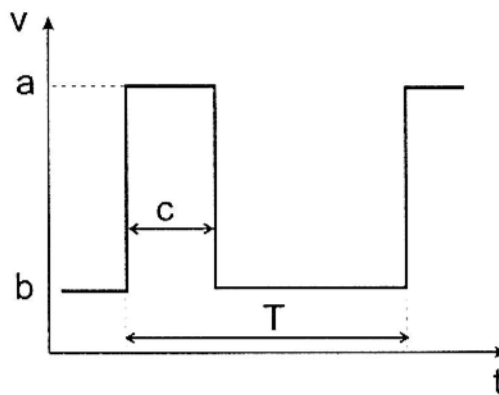


Bild 4.45: Parameter der rechteckigen Impulse

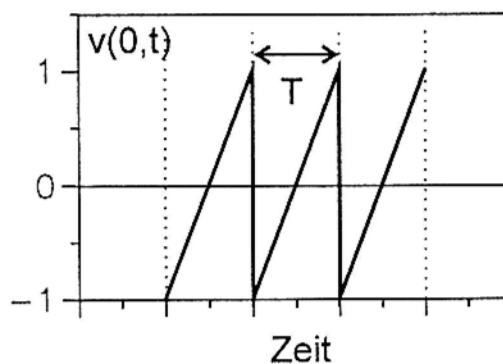


Bild 4.44: Form der Sägezahnimpulse

Für die Analyse werden auch sägezahnförmige Funktion (Bild 4.44) verwendet, die mit folgender Summe beschrieben werden kann:

$$u(0, t) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{4(-1)^{k+1}}{\pi k} \sin(\omega k t) . \quad (4.19)$$

Die Lösungen der Gleichung (4.14) mit den Randbedingungen (4.15) und (4.19) sind Summen der Lösung (4.16). Im Bild 4.46 sind die Lösungen für den Sinusimpuls (a), Rechteckimpuls mit  $c=0.25T$  (b), Rechteckimpuls mit  $c=0.75T$  (c) und sägezahnförmigen Impuls (d) dargestellt.

#### Untersuchung der analytischen Lösung

Im folgenden wird der Einfluß der Impulsform auf die Schmelzenströmung untersucht. Der Einfluß der azimuthalen Geschwindigkeit auf die meridionale Strömung bzw. radiale Geschwindigkeit wird durch den Term

$$\frac{\partial(u_{\varphi})^2}{\partial z} \quad (4.20)$$

aus der Gleichung des Rotors der Geschwindigkeit beschrieben . Im weiteren Textverlauf wird (4.20) mit  $q$  bezeichnet. Wenn  $q$  an der Erstarrungsfront positiv ist, ist die radiale Geschwindigkeit  $u_r$  negativ. Wenn der Kristall sich schneller als die Schmelze dreht, ist die radiale Geschwindigkeit positiv, d.h. nach außen gerichtet.

Bei sinusförmiger Randbedingung (4.15) gilt:

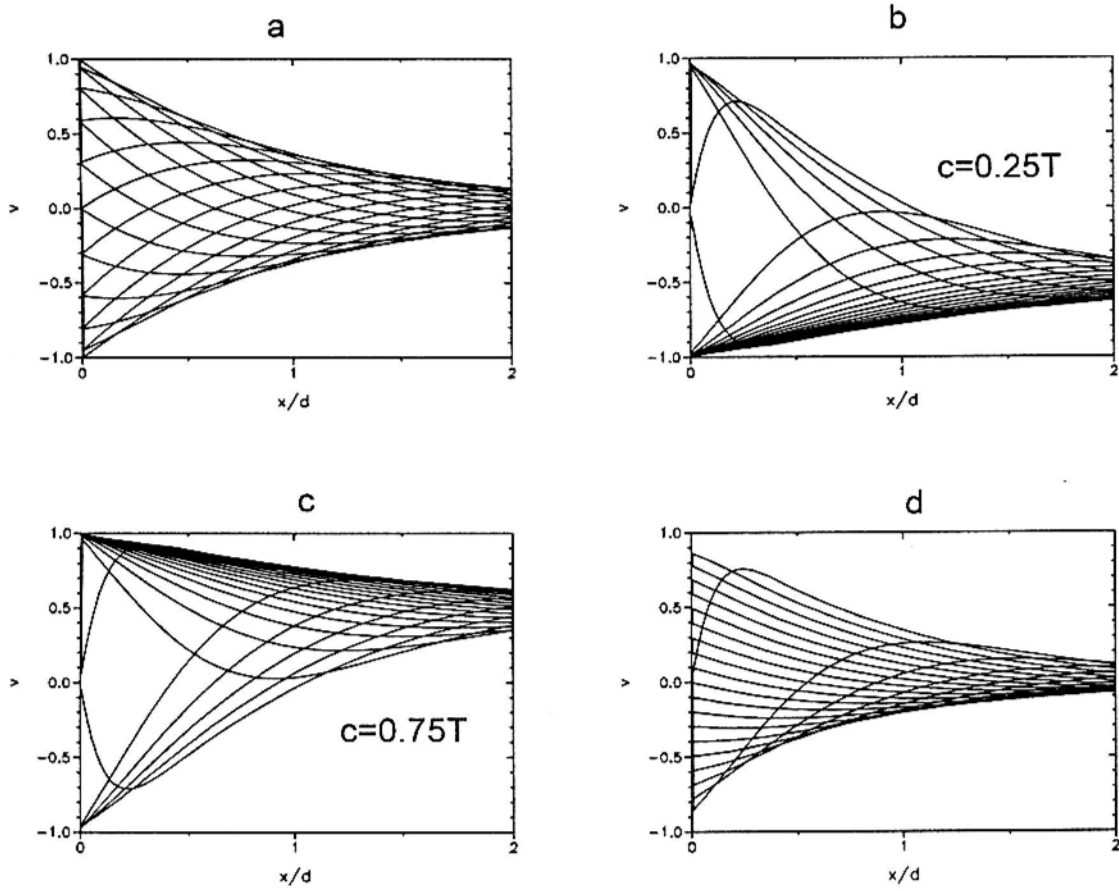


Bild 4.46: Lösungen der Gleichung (4.14) für unterschiedliche Impulsformen: a) Sinus, b) Rechteck mit  $c=0.25T$ , c) Rechteck mit  $c=0.75T$ , d) sägezahnförmiger Impuls

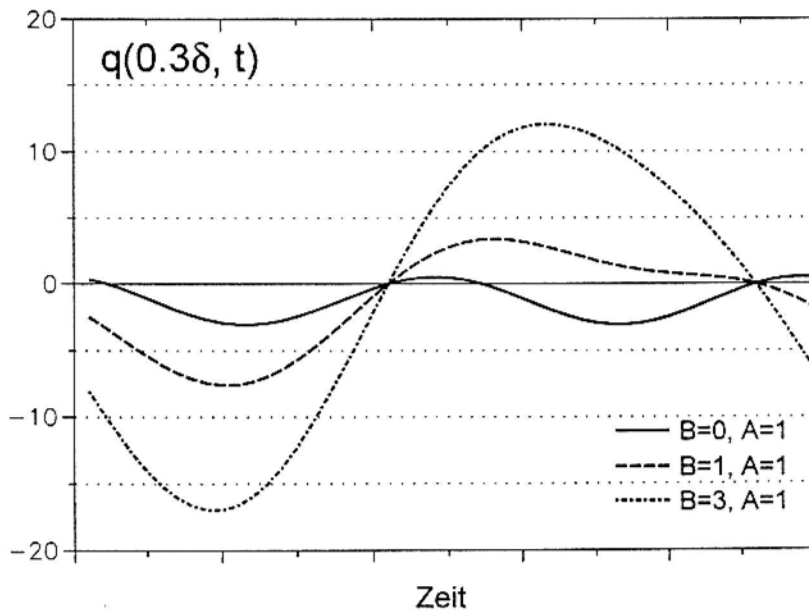


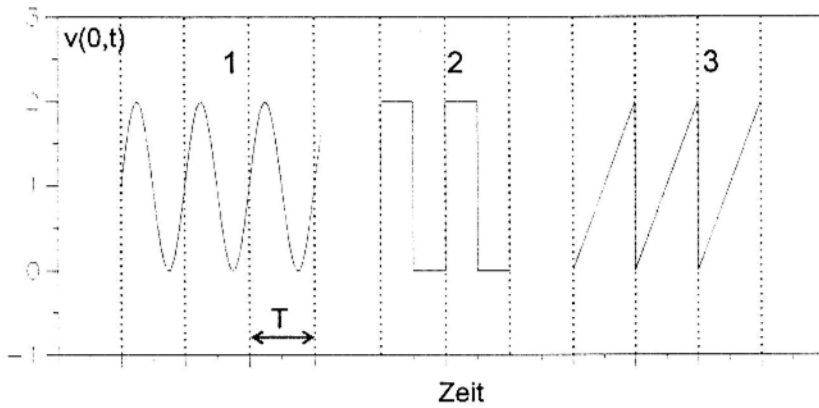
Bild 4.47:  $q(t)$  für unterschiedliche Parameter  $A$  und  $B$

$$q(x,t) = -\frac{AB}{\sqrt{2}\delta} \cdot e^{-x/\delta} \sin\left(\frac{\pi}{4} + \frac{x}{\delta} - \omega t\right) - \frac{A^2}{\delta} e^{-2x/\delta} (\sqrt{2} \sin\left(\frac{\pi}{4} + \frac{2x}{\delta} - 2\omega t\right) + 1) \quad (4.21)$$

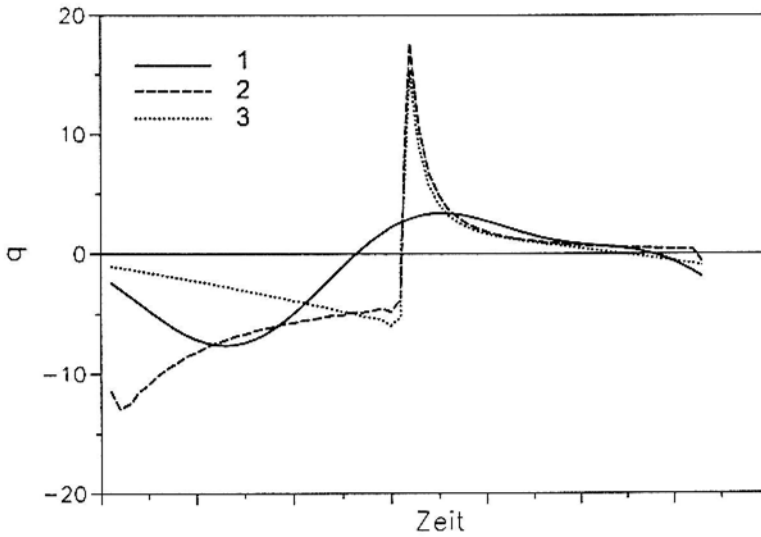
Man kann aus dieser Gleichung mehrere Schlußfolgerungen für die Schmelzenströmung bei der Wechselrotation ziehen. Zunächst ist der zeitliche Mittelwert

$$q(x) = -\frac{A^2}{\delta} e^{-2x/\delta}$$

immer negativ und die Strömung an der Kristallisationsfront meistens nach außen gerichtet. Das bedeutet, man wird nicht eine überwiegend nach innen gerichtete Strömung erreichen können.



a)



b)

Bild 4.48: Vergleich der Größe  $q$  für unterschiedliche Impulsformen: a) Impulsform, b)  $q$

Desweiteren ändert sich  $q$  mit doppelter Impulsfrequenz, wenn  $B=0$  ist, und für  $3/4$  der Periodendauer ist die Strömungsrichtung positiv ( $q$  ist negativ). Das hat eine relativ gleichmäßige, nach innen gerichtete Strömung zur Folge. Für den Fall  $B>A$  ändert sich  $q$  mit der Impulsfrequenz, und die Strömung ist eine halbe Periode nach innen und eine halbe Periode nach außen gerichtet. Mit wachsendem  $B$  wird der zeitliche Mittelwert  $q(x)$  viel kleiner als die Amplitude und die Strömung ist gleichermaßen nach außen und innen gerichtet. Bild 4.47 gibt die eben diskutierten Phänomene grafisch wieder.

Für nicht sinusförmige Impulse kann man  $q$  in ähnlicher Weise berechnen. Bild 4.48-b zeigt die zeitliche Abhängigkeit der Größe  $q$  bei  $x=0.3\delta$  für unterschiedliche Impulsformen (Bild 4.48-a). Es wird deutlich, daß sägezahnförmige Impulse mehr Bewegung in Richtung der Symmetrieachse erzeugen als rechteckige und sinusförmige Impulse.

Im Bild 4.49 ist die Situation für rechteckige Impulse dargestellt. Impulse mit  $c=0.75T$  erzeugen größere Geschwindigkeitsmaxima nach innen und kleinere Maxima nach außen als Impulse mit  $c=0.25T$ .

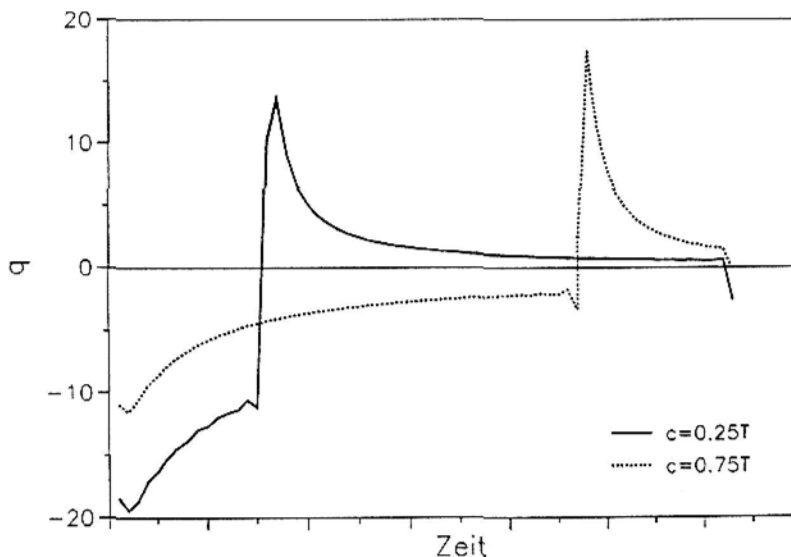
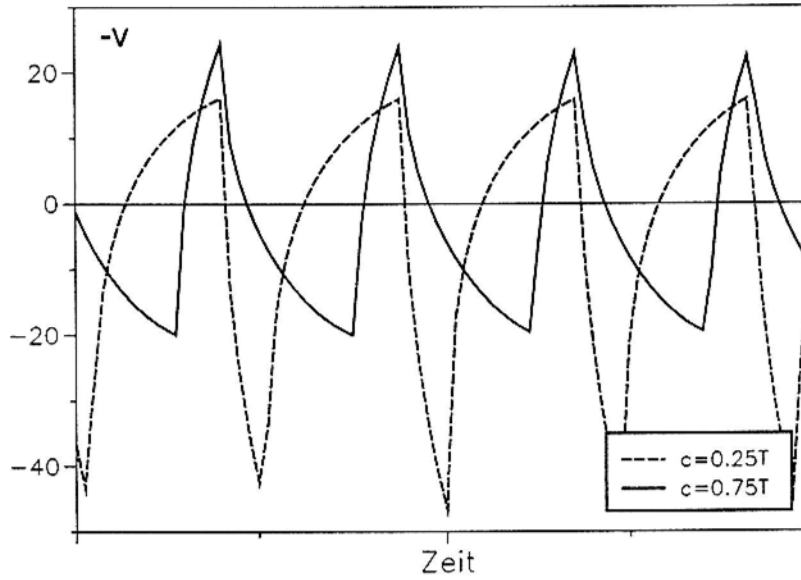


Bild 4.49:  $q$  für zwei rechteckige Impulse mit unterschiedlicher Impulsdauer

### Numerische Berechnungen

Um die analytischen Ergebnisse zu überprüfen, die mit einem vereinfachten Modell berechnet wurden, werden numerische Berechnungen benötigt. In zwei Parameterstudien wird die radiale Geschwindigkeit an der Kristallisationsfront bei unterschiedlichen Impulsformen der Kristallrotation verglichen. Nur die Kristallrotation als Strömungsursache wird berücksichtigt.



*Bild 4.50: Numerisch berechnete radiale Geschwindigkeit an der Kristallisationsfront für unterschiedliche Impulsbreiten*

Die erste Parameterstudie vergleicht zwei Strömungsberechnungen mit rechteckigen Impulsformen und unterschiedlicher Impulsdauer. Die Periode  $T$  ist in beiden Fällen gleich. Bei der Impulsdauer  $c$  von  $0.25T$  ist die maximale Rotationsgeschwindigkeit  $Re_c=3500$  (2.0 U/min), und die minimale Rotationsgeschwindigkeit ist 1500 (0.86 U/min). Bei der Impulsdauer  $c$  von  $0.75T$  beträgt die minimale und maximale Rotationsgeschwindigkeit  $Re_c=500$  (0.29 U/min) bzw. 2500 (1.43 U/min). Die Parameter wurden so gewählt, daß die Amplitude ( $a-b$ ) und der Mittelwert der Rotationsgeschwindigkeit in beiden Fällen gleich bleibt.

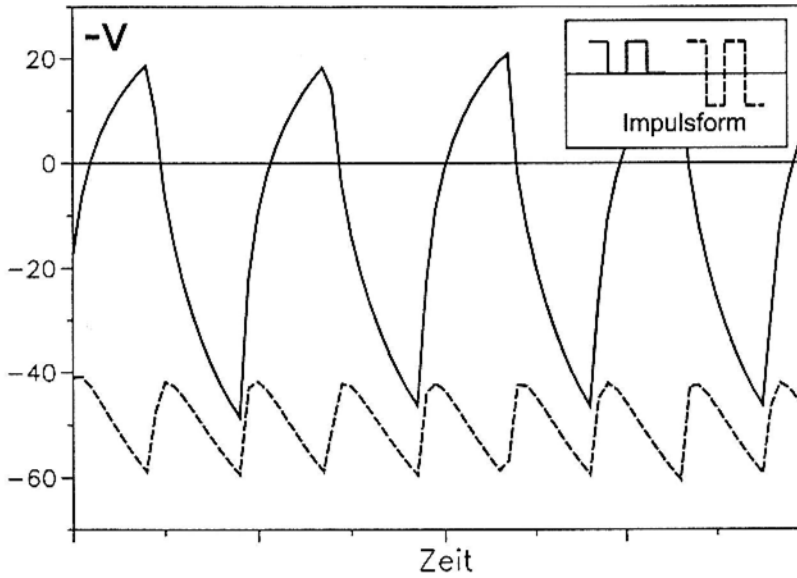


Bild 4.51: Radiale Geschwindigkeit an der Kristallisationsfront bei unterschiedlicher Amplitude der Rotationsimpulse

Im Bild 4.50 ist die radiale Komponente der Geschwindigkeit an der Kristallisationsfront bei  $r=0.5$  dargestellt. Um das Ergebnis besser mit den analytischen Berechnungen vergleichen zu können, entsprechen die positiven Werte einer nach innen gerichteten Geschwindigkeit ( $-u_r$  ist dargestellt). Die Geschwindigkeit ist für  $c=0.25T$  stärker nach außen gerichtet als für  $c=0.75T$ , wie auch die Analyse von  $q$  vorhersagte (Bild 4.48).

Der Ausdruck (4.16) zeigt, daß sich mit den Konstanten  $A$  und  $B$  das Strömungsbild stark ändern kann. Es wurden zwei Berechnungen mit rechteckiger Impulsform durchgeführt, wobei sich in der einen Berechnung die Rotation von  $Re_c=-3000$  bis  $Re_c=3000$  ( $B=0$ ) ändert, in der anderen von 0 bis 3000 ( $A=B$ ). Im Bild 4.51 ist die radiale Geschwindigkeit bei  $r=0.5$  dargestellt. Im ersten Fall sind große Schwankungen der radialen Geschwindigkeit mit Impulsfrequenz zu beobachten. Im zweiten Fall ändert sich die Geschwindigkeit mit doppelter Frequenz und hat eine viel kleinere Amplitude, obwohl die Amplitude der Rotationsgeschwindigkeit zweimal so groß ist. Gleiche Erscheinungen wurden auch in analytischen Berechnungen nachgewiesen.

## 5. Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit werden mathematische Modelle einzelner physikalischer Felder und Prozesse, die für die Züchtung von Si-Kristallen mit dem FZ-Verfahren von Bedeutung sind, zu einem globalen Modell verbunden. Dabei sind folgende Neuerungen besonders zu erwähnen:

- die Verwendung unterschiedlicher numerischer Methoden - Methode der Boundary-Elemente und Methode der Finiten Elemente;
- die iterative Kopplung der physikalischen Felder mit starker Wechselwirkung;
- die Algorithmen zur Berechnung der Form der Phasengrenzen.

Es wurde ein spezielles Programmpaket für die Berechnung der Phasengrenzen und der Schmelzenströmung erzeugt. Zahlreiche Testberechnungen für das elektromagnetische Feld und die Konvektion verifizieren die Genauigkeit der Berechnungen und Anwendbarkeit der verwendeten Modelle.

Die Berechnungsergebnisse sind auch experimentell verifiziert. Die berechneten Formen der Phasengrenzen zeigen eine sehr gute Übereinstimmung mit den im Züchtungsexperiment beobachteten Formen. Die berechneten instationären Geschwindigkeitsfelder korrelieren mit der Widerstandsverteilung im gezüchteten Kristall.

Um die physikalischen Prozesse in der FZ-Anlage besser zu verstehen, wurden die Phasengrenzen mit vereinfachten analytischen Modellen beschrieben. Es wurden wichtige Größen wie der Winkel der Kristallisationsfront, die Gesamtleistung, das Temperaturfeld im Kristall sowie die Abstände zwischen den Phasengrenzen und dem Induktor analytisch bestimmt, wobei sich eine gute Übereinstimmung mit der numerischen Berechnungen ergab.

Bei der Berechnung der Phasengrenzen wurde beobachtet, daß die Schmelzzone für Kristalle mit großen Durchmessern stabiler (höher) als die für bisher berechnete kleine Durchmesser ist. Die Form der Phasengrenzen ist von der Induktorform, von den

Züchtungsparametern und vom Prozeßstadium abhängig. Der Prozeß ist nur bei ganz bestimmter Induktorform realisierbar. Es wurden Begrenzungen bezüglich der Parameter wie Innenlochdurchmesser und Dicke des Induktors sowie die Ziehgeschwindigkeit gezeigt. Von allen Züchtungsparametern beeinflussen die Ziehgeschwindigkeit und der Induktorstrom die Form der Phasengrenzen am stärksten. Die Frequenz und der Reflektor haben einen geringeren Einfluß auf die Form der Phasengrenzen.

Bei der numerischen Untersuchung der Schmelzenströmung wurde festgestellt:

- der thermische Auftrieb dominiert gegenüber den elektromagnetischen und Marangoni-Kräften;
- aus Prozeßparametern hat die Kristallrotation die größten Einflußmöglichkeiten auf die Konvektion;
- bei niedrigen Kristallrotationen ( $Re_C^2 < Gr^*$ ) hat die Strömung eine Doppelwirbelstruktur;
- bei höheren Kristallrotationen dominieren die Rotationskräfte. Die Intensität der Strömung wird kleiner und die *Eckman*-Grenzschichten entwickeln sich;
- oszillierende instationäre Lösungen der Konvektion sind möglich. Aufgrund der numerischen Berechnungen wurde ein Stabilitätsdiagramm der Schmelzenströmung in den Variablen  $Gr - Re_C$  aufgebaut. Bis einem Wert  $Gr^* < 5 \cdot 10^6$  bleibt die Strömung stationär. Die Ursachen der Oszillationen sind Trägheitswellen mit endlicher Amplitude. Die Oszillationsperiode stimmt gut mit der nichtlinearen Theorie der Trägheitswellen überein;
- die instationäre (variable, beschleunigte) Kristallrotation hat starken Einfluß auf die Konvektion in der Schmelzzone. Analytische und numerische Untersuchungen zeigen eine Abhängigkeit von der Form, der Amplitude und der Frequenz der Drehimpulse.

## Ausblick

Das in dieser Arbeit erstellte globale Modell des FZ-Prozesses berücksichtigt alle wichtigen Phänomene. Es sind jedoch noch viele Einflüsse näher zu untersuchen, die hier nicht betrachtet werden.

Das 2D-Modell beschreibt nur teilweise den Einfluß des Induktorspaltes auf die Form der Phasengrenzen (insbesondere die freie Schmelzenoberfläche) und auf die EM-Konvektion. Eine 3D-Berechnung könnte wichtige Erkenntnisse über die Konvektion in der Schmelze liefern.

Im Modell werden die Verhältnisse an der freien Abschmelzfront, wo die flüssige und feste Phase nebeneinander existieren, mit einem Koeffizienten beschrieben, der aus dem Vergleich mit dem Experiment bestimmt wurde. Deshalb ist eine genauere Untersuchung der elektromagnetischen, thermischen und hydrodynamischen Prozesse an der freien Abschmelzfront notwendig.

Um die elektrischen Eigenschaften der gezüchteten Kristalle numerisch vorherzusagen zu können, ist eine quantitative Betrachtung des Einflusses der zeitabhängigen Konvektions- und Temperaturschwankungen auf die axiale Variation des Kristallwiderstands notwendig.

## 6. Literatur

- [1] H.C. Theuerer, U.S. Patent No. 3060123 v.17.12. (1952)
- [2] Wolfgang Keller, Alfred Mühlbauer: Floating-Zone Silicon. Marcel Dekker, New York 1981
- [3] J. Bohm, A. Lüdge, W. Schröder: Crystal Growth by Floating Zone Melting. Handbook of Crystal Growth, ed. by D. T. J. Hurle, Ch. 4, 1994
- [4] S. R. Coriell and M. R. Cordes: Theory of Molten Zone Shape and Stability. J. Crystal Growth 42 (1977) p. 466
- [5] D.N. Riahi and J.S. Walker. J. Crystal Growth 94 (1989) p. 635
- [6] N. Kobayashi: Power required to form a floating zone and the zone shape. J. of Crystal Growth 43 (1978) pp. 417-424
- [7] K.P. Gupta, R.O. Gregory, M. Rossnick: Limitations in using kilohertz radio frequencies for float zone silicon crystals. J. Crystal Growth 44 (1978) pp. 526-532
- [8] C.W. Lan and S. Kou: Heat transfer, fluid flow and interface shapes in floating-zone crystal growth. J. Crystal Growth 108 (1991) pp. 351-366
- [9] C.W. Lan and S. Kou: Effects of rotation on heat transfer, fluid flow and interfaces in normal gravity float-zone crystal growth. J. Crystal Growth 114 (1991) pp. 517-535
- [10] C.W. Lan and S. Kou: Shortened floating zone crystal growth under normal gravity. J. Crystal Growth 119 (1992) pp. 281-291

- 
- [11] C.W. Lan and S. Kou: Radial dopant segregation in zero-gravity floating-zone crystal growth. *J. Crystal Growth* 132 (1993) pp. 578-591
- [12] C.W. Lan, Y.J. Kim and S. Kou. *J. Crystal Growth* 104 (1990) p. 801
- [13] B. Xiong and W.R. Hu. *J. Crystal Growth* 133 (1993) p. 155
- [14] Lie K., Walker J., Riahi D.: Buoyancy and surface tension driven flows in float zone crystal growth with a strong axial magnetic field. *Int. J. Heat and Mass Transfer* 32 (1989) No 12. pp.2409-2420
- [15] A. Mühlbauer, A. Muiznieks, A. Jakowitsch, J. Virbulis: Anwendung der Boundary-Element-Methode (BEM) für die Berechnung der Dreidimensionalen Hochfrequenzstromverteilung bei dem Zonenschmelzen des Siliziums. *Archiv für Elektrotechnik* 76 (1993) S. 161
- [16] Mühlbauer A., Muiznieks A. Jakowitsch A., Virbulis J.: The Calculation of the 3D High Frequency Current Distribution During Silicon FZ Growth. *Latvian J. Phys. And Techn. Sc.* 4, 1992 p. 5
- [17] Lie K.H., Walker J.S., Riahi D.N.: Melt motion in the float zone process with an axial magnetic field, *J. Crystal Growth* 109 (1991) pp. 167-173
- [18] A. Mühlbauer, W. Erdmann, W. Keller: Electrodynamic convection in Silicon floating zones. *J. Crystal Growth* 64 (1983), pp. 529-545
- [19] H. Riemann et al. *J. Electrochemical Society*, to be published.
- [20] J. Virbulis: Trīsdimensionāls augstfrekvences elektromagnētiskā lauka aprēķins silīcija zonas kausēšanas iekārtā ar robeželementu metodi. Diplomdarbs, Latvijas Universitāte, Rīga, 1992

- [21] E. Šilters, G. Sermons, J. Miķelsons: Elektrodinamika. Rīga, Zvaigzne, 1986.
- [22] A. C. Eringen, G. A. Maugin: Electrodynamics of continua II - Fluids and Complex Media. Springer Verlag, Berlin, 1989.
- [23] В.В. Бояревич, Я.Ж. Фрейберг, ...: Электровихревые течения. Rīga, Zinātne, 1985
- [24] Mühlbauer A., Muiznieks A., Jakowitsch A.: Modellierung des elektromagnetischen Feldes in Induktionsöfen mit kaltem Tiegel,- Elektrowärme international 49 (1991) B3
- [25] О. Я. Дзенисис, У. А. Бетхерс Асимптотический метод определения электромагнитного поля ... LPSR Zinātņu Akadēmijas Vēstis; Fizikas un tehnisko zinātņu sērija 1889. Nr. 5
- [26] C. A. Brebbia, J. C. F. Telles, L. C. Wrobel: Boundary element techniques. Springer Verlag, Berlin, 1984
- [27] A. Gagnoud, D. Delage, M. Garnier: Elektromagnetic Modelization of Cold Crucibles,- IV Beer-Sheva Seminar on MHD Flows and Turbulence, Beer-Sheva, Israel, 1984
- [28] J. Li, J. Sun, Z. Saghir: Buoyant and thermocapillary flow in liquid encapsulated floating zone. J. Crystal Growth 131 (1993) pp. 83-96
- [29] A. Mühlbauer, A. Muiznieks, J. Virbulis, A. Lüdge, H. Riemann: Interface shape, heat transfer and fluid flow in the floating zone growth of large silicon crystals with the needle-eye technique. J. Crystal Growth 151 (1995) pp. 66-79
- [30] A. Sanz: The crystallisation of a molten sphere. J. Crystal Growth 74 (1986) pp. 642-655

- 
- [31] L.D. Landau, E.M. Lifschitz: Hydrodynamik - Lehrbuch der theoretischen Physik, Band VI, Akademie Verlag, Berlin, 1984
- [32] Fletcher: Computational Techniques for Fluid Dynamics. Vol 2. Springer-Verlag Berlin, 1991
- [33] Zienkiewicz: Methode der finiten Elemente. Carl Hanser Verlag, München, 1984
- [34] Schwarz H.R.: Methode der finiten Elemente. Stuttgart, Teubner 1984
- [35] R.T. Cheng: Numerical Solution of the Navier-Stokes Equations by the Finite Elemente Method. The Physics of Fluids 15 (1972) Nr. 12, pp. 2098-2105
- [36] Fluent User's Guide. Fluent Inc.
- [37] R. Krishnamurti: Some further studies on the transition to turbulent convection. J.Fluid Mechanics. 60,2 (1973) pp. 285-303
- [38] Numerische Simulation der Phasengrenzen und thermischen Spannungen an 6-Zoll FZ-Kristallen. Interner Bericht, Institut für Elektrowärme, Universität Hannover. 1995 S. 41-56
- [39] R. Jakusenok: Numerische Lösung des Problems der Thermoelastizität durch Spannungen in einem krummförmigen Gebiet. Mathematische Modellierung, Angewandte Probleme der mathematischen Physik, Riga, 1990, Vol. 1, S. 182-191 (in russisch)
- [40] A. Mühlbauer, A. Muiznieks, J. Virbulis: Analysis of the Transient Dopant Segregation Effects at the Floating Zone Growth of Large Silicon Crystals. 2<sup>nd</sup> int. workshop Modelling in Crystal Growth, Durbuy, Belgium (1996), Abstracts, and J. Crystal Growth (to be published)

- [41] H.Hirata and K.Hoshikawa: Three-dimensional numerical analyses of the effects of a CUSP magnetic field on the flows, oxygen transport and heat transfer in a Czochralski silicon melt. *J.Crystal Growth* 125 (1992), pp. 181-207
- [42] S.Kobayashi et al.: Turbulent heat transfer through the melt in silicon Czochralski growth. *J. Crystal Growth* 109 (1991), pp. 149-154
- [43] K.Kakimoto et al.: Numerical simulation of molten silicon flow; comparison with experiment. *J. Crystal Growth* 114 (1991), pp. 715-725
- [44] Landolt-Börnstein, Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, New series, Group III, Volumes 17a, 17c, 22a, Springer Berlin, 1984
- [45] H. Sasaki, E. Tokizaki, K. Terashima, S. Kimura: Density measurement of molten silicon by an improved Archimedian method. *J. Crystal Growth* 139 (1994) pp. 225-230.
- [46] S. Kimura, K. Terashima: Measurement of Thermophysical Properties of Silicon Melt and Its Implication. 2<sup>nd</sup> int. workshop Modelling in Crystal Growth, Durbuy, Belgium (1996), Abstracts
- [47] H. Riemann, A. Lüdge, T. Turschner, W. Hensel, J. Virbulis: A Novel Photoelectric Characterisation Method of Growth-Related Striation Pattern and Homogeneity of High-Resistivity Silicon Crystals. 186<sup>th</sup> Electrochemical Society Meeting, Extended Abstracts Vol 94-2 (1994) p. 638
- [48] C.C. Hwang, C.S. Wu, J.Y. Hsieh: The effect of curved interface shape on thermal stress during Czochralski crystal growth. *J. Crystal Growth* 132 (1993) p. 523

- 
- [49] H. Riemann, Institut für Kristallzüchtung, private Mitteilung.
- [50] W. Hensel, Wacker Siltronic AG, private Mitteilung.
- [51] P. Dold: Einflüsse statischer und dynamischer Magnetfelder bei der Kristallzüchtung aus Metall- und Halbleiterschmelzen. Dissertation Universität Freiburg, 1995.
- [52] A. A. Wheeler: Boundary layer models in Czochralski crystal growth. *J. Crystal Growth* 97 (1989) pp. 64-75
- [53] Burton J.A., Prim R.C., Slichter W.P.: The distribution of solute in crystals grown from the melt. *J. Chem. Phys.* 21 (1953) p. 1987
- [54] Hurle D.T.J.: *Crystal pulling from the melt*. Springer-Verlag, 1993
- [55] Wilson L.O.: The effect of fluctuating growth rates on segregation in crystals grown from the melt. *J. Crystal Growth* 48 (1980) pp. 435-450
- [56] A.M.J.G. Van Run: Computation of striated impurity distributions in melt-grown crystals, taking account of periodic remelt. *J. Crystal Growth* 47 (1979) pp. 680-692
- [57] D.T.J. Hurle, E. Jakeman and E.R. Pike: Striated solute distributions produced by temperature oscillations during crystal growth from the melt. *J. Crystal Growth* 3,4 (1968) pp. 633-640
- [58] A. D. Jones: Hydrodynamics of Czochralski growth - a review of the effects of rotation and buoyancy force. *Prog. Crystal Growth and Charact.*, Pergamon Press Ltd. 1984, Vol. 9, pp. 139-168.

- 
- [59] A. Seidl, G. McCord, G. Müller, H.-J. Leister: Experimental observation and numerical simulation of wave patterns in a Czochralski silicon melt. *J. Crystal Growth* 137 (1994) pp. 326-334
- [60] J. H. Spurk: *Strömungslehre. Einführung in die Theorie der Strömungen.* Springer 1989
- [61] P. A. Davidson, F. Boysan: Oscillatory recirculation induced by intermittent, rotary, magnetic stirring. *Ironmaking and Steelmaking* 18 (1991) No. 4 pp. 245-252
- [62] A. Davidson: The interaction between swirling and recirculating velocity components in an unsteady, inviscid flow. *J. Fluid Mech.* 290 (1991) pp. 35-55
- [63] Yu. M. Gelfgat, L.A. Gorbunov: Features of alternating magnetic field effect on melt hydrodynamics in a cylindrical vessel with a free surface. *Magnetohydrodynamics* 30 (1994) pp. 300-311
- [64] F. Köhl, German Patent No. DE-2538854
- [65] W. Keller et al., German Patent No. DE-2626756