

Simulation of germanium crystal growth by Czochralski technique

Mehdi Jamehbozorgi, Mohammad Hossein Tavakoli*

Department of Physics, Faculty of Science, Bu-Ali Sina University, Hamedan, Iran

Received: 25.02.2021 Final revised: 15.03.2021 Accepted: 03.08.2021

Doi link: [10.22055/JRMBS.2021.16988](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2021.16988)

Abstract

In this article, a set of 2D numerical simulations were performed for different stages of a real Czochralski (Cz) growth of germanium crystal using Finite Element Method. The results of temperature distribution, melt and gas flow field, and crystal-melt interface were obtained numerically using the Reynolds-averaged turbulence modelling approach. The obtained results show that, as the crystal length is increased (i.e., the melt depth is decreased), the constant rotation rates of crystal and crucible increase both the melt Reynolds number and its turbulent kinetic energy, because of transferring constant momentum and energy to the remaining Ge melt. In addition, it was observed that the computed crystal-melt interface shape for germanium crystal having 9 cm height was in a good agreement with the experimental data and observations in the crystal growth lab.

Keywords: Computer simulation, Turbulence modelling, germanium crystal, Heat transfer, Fluid flow, Czochralski method.

* Corresponding Author: mht@basu.ac.ir



شبیه‌سازی رشد بلور ژرمانیوم با استفاده از تکنیک چکرالسکی

مهدی جامه‌بزرگی، محمد حسین توکلی *

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه بوعلی سینا، همدان، ایران

دریافت: 1399/12/07 ویرایش نهایی: 1399/12/25 پذیرش: 1400/05/12

Doi link: [10.22055/JRMBS.2021.16988](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2021.16988)

چکیده

در این مقاله، مجموعه‌ای از شبیه‌سازی‌های عددی دو بُعدی برای مراحل مختلف رشد واقعی تکنیک چکرالسکی بلور ژرمانیوم با استفاده از روش عناصر متناهی انجام شد. نتایج توزیع دما و میدان جریان مذاب و گاز و فصل مشترک بلور-مذاب با استفاده از رهیافت مدل سازی تلاطمی میانگین-رینولدز به صورت عددی به دست آمد. نتایج به دست آمده نشان می‌دهند که با افزایش طول بلور (یعنی، کاهش عمق مذاب)، سرعت پرخش ثابت بلور و بوته، باعث افزایش عدد رینولدز و انرژی جنبشی تلاطمی مذاب ژرمانیوم می‌شود، که علت آن انتقال حرکت و انرژی ثابت به باقی مانده مذاب است. علاوه بر این، مشاهده شد که شکل محاسبه شده فصل مشترک بلور-مذاب برای بلور ژرمانیم با ارتفاع 9 سانتی‌متر با داده‌های تجربی و مشاهدات در آزمایشگاه رشد بلور مطابقت خوبی دارد.

کلیدواژه‌گان: شبیه‌سازی رایانه‌ای، مدل سازی تلاطم، بلور ژرمانیوم، انتقال گرما، جریان شاره، تکنیک چکرالسکی

مقدمه

دلوس² نظریه پایداری فصل مشترک را در خلال رشد بلور از مذاب ژرمانیم تجزیه و تحلیل کرد. در سال 1983م، کرولی³ جریان گرما را در تکنیک چکرالسکی با استفاده از یک مدل ریاضی بررسی کرد. در نهایت، مسأله با استفاده از تکنیک‌های ریاضی به صورت عددی حل شد [3]. در سال 1977م، بلورهای نیمه‌هادی با استفاده از روش وابسته به زمان تکنیک چکرالسکی رشد داده شدند [4]. پدیده رشد بلور ماهیتی بین رشته‌ای دارد و لازم است از مبانی شیمی، فیزیک حالت جامد، ترمودینامیک و مکانیک شاره‌ها استفاده کرد [5].

امروزه ژرمانیوم به عنوان یک ماده مهم با کاربردهای فراوان مورد استفاده قرار می‌گیرد. تحرک بالا برای الکترون‌ها و حفره‌ها و ضریب جذب بالای ژرمانیوم در مقایسه با سیلیکون، این ماده را برای ساخت مدارهای الکترونیکی با سرعت بالا مناسب می‌کند. در حالی که روش‌های رشد مختلفی برای بلور ژرمانیوم وجود دارد، رایج‌ترین روش، کشیدن بلور (چکرالسکی¹) است [1]. اولین تک‌بلور ژرمانیوم در سال 1950 میلادی با استفاده از روش چکرالسکی رشد داده شد [2]. در سال 1968م،

* نویسنده مسئول: mht@basu.ac.ir

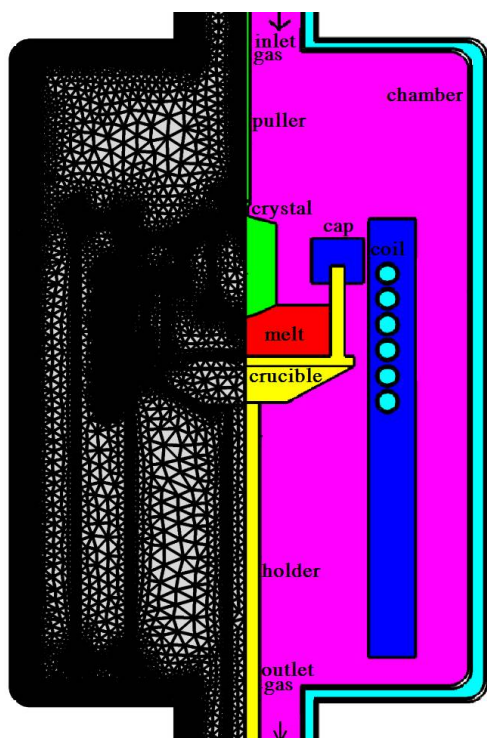
¹ Czochralski

² R.T. Deleves

³ A.B. Crowley



ایجاد کرده که به‌نوبه خود باعث تولید یک میدان الکتریکی نوسانی افقی در فضای اطراف می‌شود.



شکل 1. هندسه، اجزاء و شبکه محاسباتی دستگاه رشد بلور ژرمانیوم به روش چکرالسکی.

میدان الکتریکی درون بدنه بوتله یک جریان الکتریکی افقی (سمتی) در دیواره بوتله ایجاد می‌کند. در نهایت، حاصل ضرب میدان الکتریکی با چگالی جریان، میزان اتلاف انرژی در بوتله را نشان می‌دهد. این گرمای داخلی از طریق دیواره داخلی و کف بوتله به مذاب منتقل شده و تا حدی هم از طریق تابش و همرفت (جریان گاز آرگون) به خارج از سیستم رشد انتقال می‌یابد [7]. برای محاسبه میدان‌های الکترومغناطیسی، حل معادلات ماکسول ضروری است. برای حل این معادلات برای هدف خود، باید ابتدا چند فرضیه داشته باشیم: الف: سیستم مقارن محوری است، یعنی همه کمیت‌ها مستقل از مختصات سمتی هستند، ب: همه رساناها

در این مقاله با استفاده از گرمای القایی در سیستم رشد که باعث ایجاد جریان همرفت در مذاب و گاز، رسانایی گرمایی در قسمت‌های مختلف و تبادل انرژی تابشی بین سطوح داخلی محفظه می‌شود، می‌توانیم میدان‌های دما و سرعت را در سیستم پیش‌بینی کنیم. این مسأله پیچیده شامل مجموعه‌ای از معادلات دیفرانسیل جزئی جفت شده (معادلات انتقال گرما و مکانیک شاره‌ها) است. از آنجایی که جریان مذاب در حالت انتقال به‌حالت تلاطم است، از مدل تلاطمی رینولدز پایین برای مطالعه همرفت مذاب استفاده می‌شود [6].

توصیف مسأله

یک سیستم رشد بلور ژرمانیوم شامل یک پیچ‌ه القایی از جنس مس شامل شش حلقه، بوتله‌ای از جنس گرافیت، نگه‌دارنده بوتله، میله نگه‌دارنده بذر از جنس کوارتز، اتاقک محفظه از جنس استیل، درپوش بوتله از جنس آلومینا¹ و لوله شامل جریان آب در گردش که از بدنه داخلی اتاقک محفظه گذشته و وارد پیچ‌ه می‌شود، است (شکل 1). اتاقک محفظه با گاز آرگون پر شده است. بلور ژرمانیوم به‌دست آمده در جهت $\langle 100 \rangle$ رشد داده شده و قطر آن 7 سانتی‌متر است. زمان لازم برای کل فرایند رشد 2 روز و سرعت کشیدن بلور از مذاب 10 میلی‌متر در ساعت می‌باشد.

گرمای القایی

تکنیک رشد بلور چکرالسکی اغلب از اصل گرمای القایی برای تأمین انرژی گرمایی مورد نیاز مذاب استفاده می‌کند. این انرژی گرمایی توسط پیچ‌ه القایی که بوتله گرافیتی را احاطه کرده است، تولید می‌شود. یک جریان متغیر الکتریکی با فرکانس بالا (23 کیلوهرتز) از پیچ‌ه القایی عبور می‌کند. این جریان افقی یک میدان مغناطیسی متغیر با زمان را در خارج از پیچ‌ه

¹ alumina

$$Gr = \frac{\rho^2 g \beta \Delta T L^3}{\mu^3} \quad 3$$

که ρ چگالی سیال (مذاب ژرمانیوم)، $\beta = 5/9 \times 10^6 K^{-1}$ ، شتاب ضریب انبساط گرمایی، $\Delta T = 50 K$ ، g گرانش و μ چسبندگی دینامیکی ژرمانیوم برابر $73 \times 10^{-5} Pa.s$ می‌باشند. بنابراین جریان مذاب ژرمانیوم به‌عنوان جریان تلاطمی در نظر گرفته می‌شود [9]. برای حل مسأله، از مدل تلاطمی رینولدز پایین- k ε استفاده می‌کنیم. تجزیه میدان سرعت، فشار و دما را به‌صورت زیر انجام می‌شود [10، 11]:

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= \bar{\mathbf{V}} + \mathbf{v}' \\ T &= \bar{T} + T' \\ P &= \bar{P} + P' \end{aligned}$$

با جایگذاری \mathbf{v} ، P و T در معادله‌های تراکم‌ناپذیر ناویر استوکس¹ و انرژی، شکل معادله‌های میانگین‌گیری شده زمانی به‌صورت زیر نوشته می‌شود [10، 11]:

$$\rho \bar{\mathbf{V}} \cdot \nabla \bar{\mathbf{V}} = -\nabla \bar{P} + \nabla \cdot [-\rho \bar{\mathbf{v}} \bar{\mathbf{v}}' + \mu (\nabla \bar{\mathbf{V}} + (\nabla \bar{\mathbf{V}})^T)] + \rho \mathbf{g} \beta (\bar{T} - T_0), \quad 4$$

$$\nabla \cdot \bar{\mathbf{V}} = 0, \quad 5$$

$$\rho C_p \bar{\mathbf{V}} \cdot \nabla \bar{T} = \nabla \cdot (-\rho C_p \bar{\mathbf{v}} \bar{T}') + k \nabla^2 \bar{T} + q, \quad 6$$

که k رسانایی گرمایی، C_p ظرفیت گرمایی مذاب ژرمانیوم، q گرمای تولید شده توسط القای الکترومغناطیسی، و T_0 دمای مرجع است که 293 کلوین است. علاوه بر این، $-\rho \bar{\mathbf{v}} \bar{\mathbf{v}}'$ و $-\rho C_p \bar{\mathbf{v}} \bar{T}'$ را به ترتیب برابر متوسط زمانی تانسور تنش رینولدز، τ^R ، و شار گرمایی تلاطمی، \mathbf{q}^R ، در نظر می‌گیریم.

خطی و همسانگرد هستند، ج: همه مواد غیرمغناطیسی هستند و بار الکتریکی خالص ندارند، د: جریان جابه‌جایی نادیده گرفته می‌شود، ه: توزیع جریان الکتریکی محرک (همچنین ولتاژ) در پیچه یکنواخت است. با فرض چگالی جریان محرک در پیچه به‌صورت $J_d = J_0 \cos \omega t$ ، می‌توان معادلات ماکسول را به یک معادله اسکالر ساده به‌صورت زیر تبدیل کرد [8].

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

که در آن ψ تابع جریان مغناطیسی، μ نفوذپذیری مغناطیسی است و J نیز به‌صورت زیر به‌دست می‌آید:

$$J = \begin{cases} J_d + J_e = J_0 \cos(\omega t) - \frac{\sigma_{coil}}{r} \frac{\partial \psi}{\partial t} & \text{coil} \\ J_e = -\frac{\sigma_e}{r} \frac{\partial \psi}{\partial t} & \text{conductors and} \\ 0 & \text{semiconductor} \\ & \text{elsewhere} \end{cases} \quad 2$$

که J_e جریان تولید شده ناشی از اثر خودالقایی در پیچه، σ رسانایی الکتریکی و ω فرکانس جریان الکتریکی متناوب در پیچه القایی است.

میدان دما و سرعت

انتقال از جریان آرام به جریان تلاطمی، در این مورد، زمانی رخ می‌دهد که عدد گراشف در محدوده $10^8 < Gr < 10^9$ از همرفت طبیعی از صفحه عمودی دیواره بوته باشد. عدد گراشف مذاب ژرمانیوم بر اساس هندسه سیستم و گرادیان دمایی 50 کلوین به‌صورت تقریبی از مرتبه 10^8 به‌صورت زیر به‌دست می‌آید:

¹ Navier-Stokes

فرمول‌بندی تانسور تنش رینولدز بر اساس فرض بوزینسک می‌باشد، طوری که در مقایسه با جریان شماره نیوتنی، تنش رینولدز به‌عنوان یک تابع خطی از گرادیان متوسط سرعت فرض می‌شود، به‌گونه‌ای که

$$\tau^R = -\rho \overline{\mathbf{v}'\mathbf{v}'} = \mu_t (\nabla \overline{\mathbf{V}} + (\nabla \overline{\mathbf{V}})^T) - \frac{2}{3} \rho K \mathbf{I} \quad 7$$

\mathbf{I} تانسور همانی و $\mu_t \sim \frac{l_t^2}{t_t}$ چسبندگی تلاطمی است، و l_t و t_t به‌ترتیب برابر با مقیاس‌های طولی و زمانی افت و خیزهای تلاطمی هستند. بنابراین چسبندگی تلاطمی به‌عنوان خاصیتی از جریان در نظر گرفته می‌شود [12]. K انرژی جنبشی تلاطمی بوده و

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho K) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} K) = \nabla \cdot (\mu_{eff,K} \nabla K) + P_K - \rho \varepsilon \quad 8$$

به‌صورت $K = \frac{1}{2} \overline{\mathbf{v}'\mathbf{v}'}$ به‌دست می‌آید. با این تقریب، مسأله محاسبه تانسور تنش رینولدز تبدیل به محاسبه انرژی جنبشی تلاطمی و چسبندگی تلاطمی می‌شود. به‌صورت مشابه، شار گرمایی در مقایسه با

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \varepsilon) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \varepsilon) = \nabla \cdot (\mu_{eff,\varepsilon} \nabla \varepsilon) + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{K} P_k - f_{\varepsilon} C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{K} \quad 9$$

که جمله چشمه تولید انرژی تلاطمی به‌صورت $\mu_{eff,K} = \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}$ و $P_K = \tau^R : \nabla \mathbf{v}$ و $f_{\varepsilon} = (1 - e^{-\frac{t^*}{3T}})^2 (1 - 0.3 e^{-\frac{R_t}{6/5}})$ ، $\mu_{eff,\varepsilon} = \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\varepsilon}}$ و $\sigma_K = 1/4$ است.

قانون فوریه، به‌صورت $\mathbf{q}^R = -\rho C_p \overline{\mathbf{v}'T'} = k_t \nabla T$ نوشته می‌شود که در آن k_t رسانندگی گرمایی تلاطمی است. مدل تلاطمی رینولدز پایین $k - \varepsilon$ مربوط به جاهایی که نزدیک به دیواره بوده و اثر چسبندگی چشم‌گیر است، مورد استفاده قرار می‌گیرد [13]. این مدل، معادله‌های ترابرد تلاطمی را با معرفی توابع میرایی f_{ε} و f_{μ} مورد استفاده قرار می‌دهد. با استفاده از انرژی جنبشی تلاطمی K و آهنگ اتلاف انرژی جنبشی در واحد جرم،

$$\varepsilon = \frac{1}{2} \frac{\mu}{\rho} \overline{\{\nabla \mathbf{v}' + (\nabla \mathbf{v}')^T\} : \{\nabla \mathbf{v}' + (\nabla \mathbf{v}')^T\}}$$

ناشی از تنش‌های چسبندگی است، می‌توان برای

$$\mu_t = \frac{\rho f_{\mu} C_{\mu} K^2}{\varepsilon}$$

استفاده کرد. $f_{\mu} = (1 - e^{-\frac{t^*}{14}})^2 (1 + \frac{5}{R_t^{0.75}} e^{-\frac{R_t}{200}})$

شرایط مرزی

بیشترین ارتفاع مذاب ژرمانیوم 7 سانتی‌متر و قطر بوته 18 سانتی‌متر می‌باشد. بوته و بلور به‌ترتیب در حال چرخش با آهنگ 2 rpm- و 15 rpm در خلاف جهت یکدیگر می‌باشند. رشد بلور تحت تأثیر چرخش بلور و بوته برای رسیدن به کنترل فرایند رشد با کم کردن انتقال گرما و افزایش اختلاف دما بین بلور و دیواره بوته صورت می‌گیرد. تأثیر چرخش بلور و بوته روی همرفت مذاب با ثابت گرفتن سرعت زاویه‌ای روی مرزهای بلور-گاز و میله کشنده-گاز به‌صورت $v_s = r \omega_s$ برای چرخش بلور و برای مرزهای مذاب-بوته و گاز-بوته به‌صورت $v_c = r \omega_c$ در نظر گرفته می‌شود. فصل مشترک گاز-مذاب تخت و عمود بر دیواره بوته در نظر گرفته شده است. مابقی مرزها دارای

و فصل مشترک بلور-مذاب از روش گسسته‌سازی اجزاء محدود استفاده می‌شود. هندسه دو بُعدی و توزیع شبکه محاسباتی در شکل 1 نشان داده شده و خواص فیزیکی مواد در جدول 1 آورده شده است.

جدول 1. خصوصیات فیزیکی مواد

چگالی (g/cm ³)	رسانش الکتریکی (S/m)	تابندگی	رسانش گرمایی (W/MK)	ظرفیت گرمایی (J/kgK)	
-	5,9×10 ⁷	-	400	385	پیچیده
-	7×10 ⁴	0,98	150	710	بوته و نگهدارنده
-	-	0,90	27	900	سپریش بوته
5,3	2×10 ⁶	0,2	75	310	مذاب ژرمانیوم
5,4	2×10 ⁶	0,5	75	322	بلور ژرمانیوم
-	-	0,4	1,4	730	کننده از جنس کوارتز
-	4,03×10 ⁶	0,55	44,5	745	اتاقک محافظ از جنس استیل

شرط مرزی بدون لغزش است. دما روی سطح پیچه و دیواره داخلی اتاقک محفظه به خاطر گردش آب در داخل آن برابر دمای اتاق است. در روی سطح آزاد مذاب مؤلفه قائم سرعت، یعنی $w = 0$. دما روی سطح در حال متبلور شدن بلور با دمای ذوب ژرمانیوم، 1210 کلوین، برابر است. آهنگ تبلور ژرمانیوم توسط توازن شار گرمایی در سطح تبلور، به وسیله معادله زیر داده می‌شود [15]:

$$-\rho_{crystal} \Delta H V_n = (k \nabla_n T)_{melt} - (k \nabla_n T)_{crystal} \quad 10$$

ΔH گرمای تبلور که برابر 478 J/g است، $\rho_{crystal}$ چگالی بلور ژرمانیوم که برابر 4,5 g/cm³ بوده، k_{melt} و $k_{crystal}$ به ترتیب رسانایی گرمایی مذاب و بلور ژرمانیوم و V_n آهنگ تبلور، عمود بر فصل مشترک مذاب-بلور بوده که به عنوان آهنگ کشش بلور در امتداد محور تقارن، در نظر گرفته می‌شود. انتقال گرمای تابشی به صورت فرایند پخش بین سطوح ایده‌آل از مواد ناشفاف (مات) مطابق با شرایط مرزی با توازن بین انتقال گرمای تابشی و رسانشی بین سطوح داخلی کوره و سطح بلور صورت می‌گیرد. شرایط مرزی در مرزهای گاز-جامد و گاز-مذاب، به ترتیب به صورت زیر است:

$$-k_s \nabla_n T = -k_g \nabla_n T + \sigma \epsilon_s (T_s^4 - T_a^4) \quad 11$$

$$-k_m \nabla_n T = -k_g \nabla_n T + \sigma \epsilon_m (T_m^4 - T_a^4) \quad 12$$

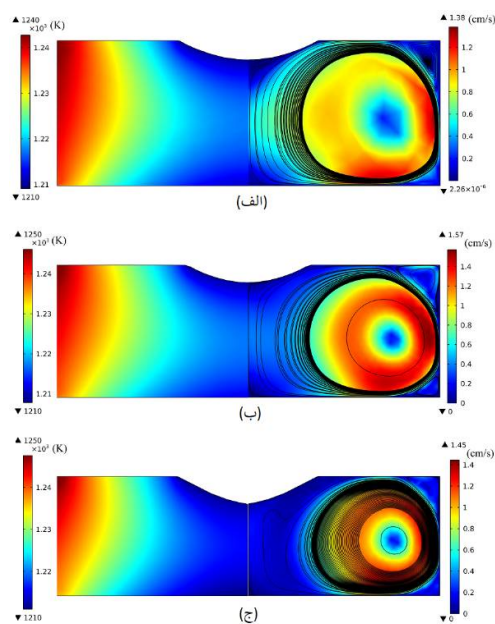
T_s ، T_m و ϵ_s به ترتیب رسانش گرمایی، دما و تابندگی سطوح جامد، و نیز T_m ، ϵ_m و k_m به ترتیب رسانندگی گرمایی، دما و تابندگی سطح مذاب و T_a دمای گاز آرگون می‌باشد. برای به دست آوردن میدان دما، سرعت

نتایج و بحث

مدل ارائه شده در بخش قبل برای محاسبه توزیع میدان سرعت و برخی از پارامترهای به دست آمده در کوره چکرالسکی ژرمانیوم برای رشد بلوری به ارتفاع 9 سانتی‌متر و قطر 7 سانتی‌متر با بوته‌ای به قطر

جریان ورودی پیچیده مطابق با مشخصه‌های فصل مشترک بلور-مذاب تنظیم می‌شود. این تنظیم به صورت تکراری تا وقتی ادامه دارد که دما نقطه مرزی بین سه حالت (نقطه‌ای که مرز مشترک بین بلور، مذاب و گاز آرگون است) به دمای نقطه ذوب ژرمانیوم برسد. میدان دما و سرعت مذاب برای بلورهای در حال رشد به ارتفاع‌های 1، 5 و 9 سانتی‌متر در شکل 3 نشان داده شده است. همان‌طور که دیده می‌شود فصل مشترک دارای فرورفتگی به سمت مذاب در حدود 5-10 میلی‌متر برای سه ارتفاع می‌باشد.

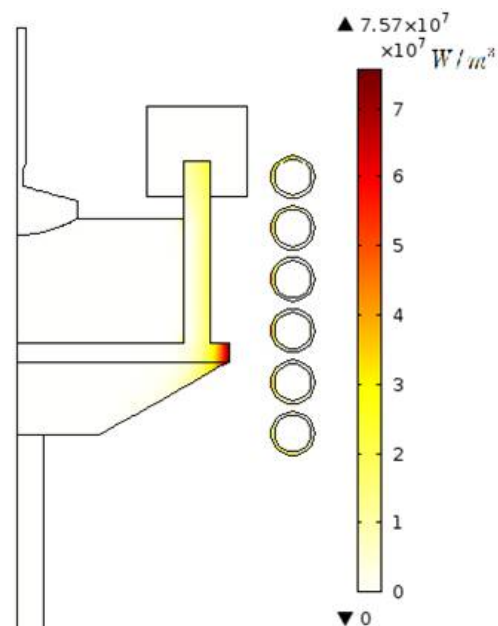
تحدب فصل مشترک بلور-مذاب با افزایش ارتفاع بلور، به سمت مذاب افزایش می‌یابد. علت فیزیکی این پدیده سرعت آهسته کشیدن بلور به سمت بالا و نیز انتقال گرمای تابشی سطح به سطح از سطوح بلور می‌باشد.



شکل 3. توزیع میدان دما (چپ) و سرعت شاره به همراه خطوط جریان (راست) برای بلور به ارتفاع‌های الف: 1 سانتی‌متر، ب: 5 سانتی‌متر و ج: 9 سانتی‌متر.

سرعت آهسته بالا کشیدن بلور باعث کاهش شار گرمایی از طریق هدایت به خاطر کم شدن گرادیان

18 سانتی‌متر به کار رفته است. همه محاسبات با آهنگ کشش بلور 10 میلی‌متر در ساعت و جریان آرگون 1 لیتر در دقیقه انجام شده است. مقدار گرمای القایی در قسمت‌های مختلف کوره در جدول 2، برای ارتفاع‌های متفاوت از بلور در حال رشد، نشان داده شده است. شکل 2 نشان دهنده توزیع گرمای القایی در قسمت‌های مختلف کوره است که بیانگر این نکته است که مقدار گرمای تولید شده در بوت‌ها بیشتر از جاهای دیگر می‌باشد.

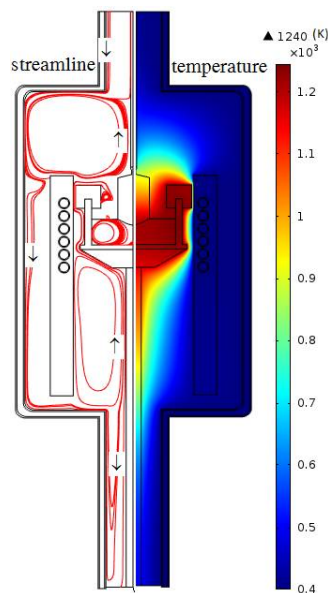


شکل 2. توزیع گرمای القاء شده در قسمت‌های رسانای کوره برای بلور ژرمانیوم به ارتفاع 1 سانتی‌متر. جدول 2. آهنگ گرمای الکترومغناطیسی ایجاد شده بر حسب وات در قسمت‌های مختلف کوره.

بلور	مذاب	بوت	بوت	اتاقک محفظه	ارتفاع بلور (سانتی‌متر)
1	469	17510	1825	1395	1
4	411	17253	1776	1360	5
8	375	17193	1762	1345	9

دو جریان چرخشی گاز آرگون در سمت راست بالا و پایین بوته وجود دارد. گاز پایین کوره گرمتر از قسمت‌های دیگر است و باعث کاهش چگالی گاز در این قسمت و ایجاد جریان همرفتی در خلاف جهت عقربه‌های ساعت می‌شود. کاهش چگالی گاز در نزدیکی سطح آزاد مذاب ژرمانیوم به دلیل دمای بالا، باعث ایجاد چرخش گازی در جهت خلاف جهت عقربه‌های ساعت می‌شود. جریان گاز آرگون گرما را از سمت بالا به پایین کوره برده و گرادیان دما را در امتداد محور بلور کاهش می‌دهد. در طول رشد بلورهای بزرگ از مذاب، جابه‌جایی در مواد مذاب نقش مهمی در کیفیت بلور رشد یافته دارد. همرفت طبیعی (آزاد) ناشی از نیروهای شناوری و مویینه (جریان مارانگونی) درون مذاب و سطح آن که شامل فصل مشترک مذاب-بلور و سطح آزاد است، می‌باشد. منشاء این دو نوع نیرو به خاطر وابستگی چگالی مذاب و کشش سطحی به دما است. الگوی جریان مذاب در داخل بوته به گونه‌ای است که شاره گرم در امتداد دیواره، به خاطر تغییر چگالی، به سمت بالا حرکت کرده (قانون ارشمیدس) و شاره سرد در امتداد محور تقارن سیستم به سمت پایین حرکت می‌کند [17]. به دلیل چرخش همزمان بلور و بوته در جهت مخالف، رشد بلور به شکل استوانه‌ای و متقارن انجام می‌شود. چرخش بوته با ایجاد نیروی کوریولیس¹ با ضعیف کردن همرفت قائم ناشی از نیروی شناوری، باعث متعادل کردن جریان شاره مذاب شده و در نتیجه منجر به کم شدن اختلاف دما بین دیواره بوته و سطح بلور می‌شود [18]. تنش برشی وارد شده روی فصل مشترک مذاب-گاز ناشی از همرفت گاز آرگون بوده و نوعی همرفت اجباری محسوب شده و منجر به میرا شدن جریان‌های شناوری و مارانگونی می‌شود. ترکیب همه مدهای بالا باعث تشکیل جریان چرخشی پیچیده و مرکب در مذاب می‌گردد. شواهد

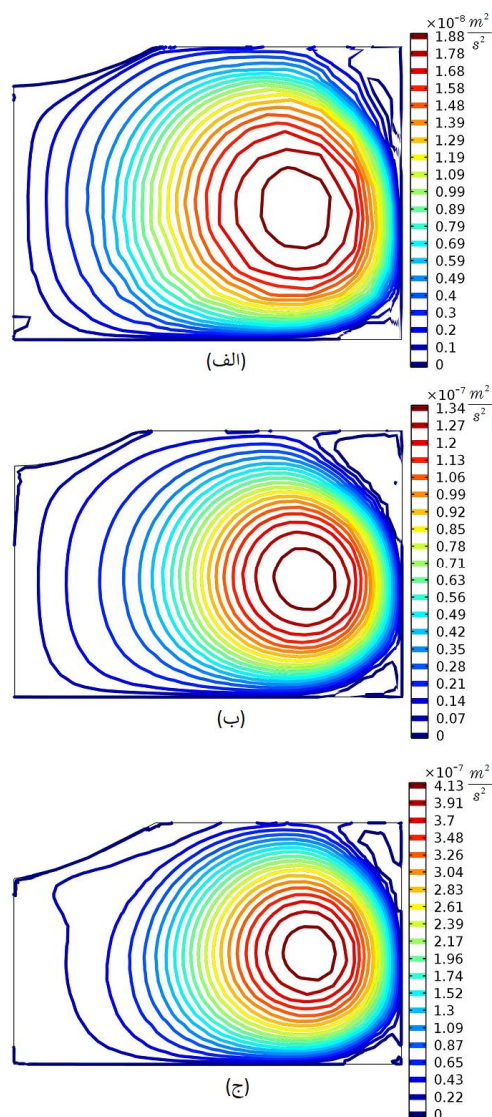
دمایی می‌شود و نیز گرمای تابشی زیادی که از سطح بلور تابش شده به دلیل اینکه با افزایش ارتفاع بلور، سطح بلور نیز افزایش یافته، منجر به یک همرفت ضعیف در مذاب می‌گردد. در نهایت برای ثابت نگه داشتن قطر بلور، لازم است به طور پیوسته دمای بوته را طوری تنظیم کرد که منحنی همدمای نقطه ذوب ژرمانیوم به سمت مذاب تحدب داشته باشد [16 و 15]. همان‌طور که مشاهده می‌شود تفاوت دما در مذاب تقریباً 50-40 کلون است. همان‌طور که ارتفاع بلور افزایش می‌یابد، مذاب در کف بوته منجمد شده و منبع مذاب برای رشد بلور کاهش می‌یابد. بنابراین بلور به ژرمانیوم منجمد شده در کف بوته چسبیده و دیگر ادامه رشد بلور امکان‌پذیر نخواهد بود. در گوشه بالا و سمت راست مذاب دو گردابه وجود دارد که به خاطر اثر همرفت مارانگونی ناشی گرادیان دمایی کشش سطحی، و تنش برشی ناشی از جریان گاز آرگون نزدیک سطح آزاد مذاب ژرمانیوم، می‌باشد (شکل 4).



شکل 4. خطوط جریان (چپ) و میدان دما (راست) در سیستم رشد چکرالسکی.

¹ Coriolis

دارد. علاوه بر این، شکل فصل مشترک به دست آمده برای بلور ژرمانیوم با ارتفاع 9 سانتی‌متر مطابقت خوبی با داده‌های تجربی و مشاهده در آزمایشگاه دارد (شکل 6).



شکل 5. کانتورهای انرژی جنبشی تلاطمی برای بلور در حال رشد برای بلور به ارتفاع‌های الف: 1 سانتی‌متر، ب: 5 سانتی‌متر و ج: 9 سانتی‌متر.

فراوان نشان دهنده این مطلب است که جریان مذاب ایجاد شده توسط نیروهای یاد شده، پیچیده، سه‌بعدی، وابسته به زمان، نوسانی و اغلب متلاطم و تصادفی می‌باشد. در این مقاله ما سیستم چکرالسکی را با مدل تلاطمی رینولدز پایین $k-\varepsilon$ حل کردیم، زیرا نیروهای شناوری در مقایسه با نیروهای چسبندگی بزرگ هستند، به طوری که رژیم مذاب نزدیک به گذار بین جریان آرام و تلاطمی است. انرژی جنبشی تلاطمی برای ارتفاع‌های مختلف بلور در شکل 5 نشان داده شده است. همان‌طور که ارتفاع بلور افزایش می‌یابد، ارتفاع مذاب داخل بوته کاهش یافته و چرخش بلور و بوته به صورت هم‌زمان باعث افزایش عدد رینولدز و انرژی جنبشی تلاطمی مطابق شکل 5 می‌شود، زیرا منجر به انتقال تکانه و انرژی ثابت به مقدار کمی از مذاب ژرمانیوم شده و در نتیجه سرعت افت و خیزهای مربوط به شارژ مذاب افزایش می‌یابد. افزایش مؤلفه افت و خیز با افزایش ارتفاع بلور در جدول 3 نشان داده شده است.

جدول 3. مؤلفه افت و خیز سرعت شارژ مذاب برای ارتفاع‌های مختلف بلور در حال رشد

ارتفاع بلور	1 سانتی‌متر	5 سانتی‌متر	9 سانتی‌متر
مؤلفه افت و خیز سرعت مذاب	0,19	0,52	0,90

خلاصه

به‌طور خلاصه، مجموعه‌ای از شبیه‌سازی‌های عددی متقارن محوری حالت پایا به وسیله مدل تلاطمی رینولدز پایین برای مراحل مختلف رشد بلور ژرمانیوم به روش چکرالسکی برای پیش‌بینی دما و میدان سرعت مذاب انجام شد. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که انرژی جنبشی تلاطمی و عدد رینولدز با افزایش ارتفاع بلور در حال رشد و کاهش مقدار مذاب، افزایش می‌یابد. نتایج نشان می‌دهد که کیفیت بلور به دست آمده به هندسه، انتقال گرما و دینامیک شارژ سیستم بستگی

[6] K. Abe, T. Kondoh, Y Nagano, A new turbulence model for predicting fluid flow and heat transfer in separating and reattaching flows-i. flow field calculations, *International journal of heat and mass transfer* **37** (1994) 139–151. [https://doi.org/10.1016/0017-9310\(94\)90168-6](https://doi.org/10.1016/0017-9310(94)90168-6)

[7] K. Abe, T. Kondoh, Y Nagano, A new turbulence model for predicting fluid flow and heat transfer in separating and reattaching flows—ii. Thermal field calculations, *International Journal of Heat and Mass Transfer* **38** (1995) 1467–1481. [https://doi.org/10.1016/0017-9310\(94\)00252-Q](https://doi.org/10.1016/0017-9310(94)00252-Q)

[8] M.H. Tavakoli, H. Karbaschi, F. Samavat, Computational modeling of induction heating process, *Progress in Electromagnetics Research* **11** (2009) 93–102. <https://doi.org/10.2528/PIERL09071509>

[9] Z. Warhaft, *An introduction to thermal-fluid engineering: the engine and the atmosphere*, Cambridge University Press (1997).

[10] F. Moukalled, L. Mangani, M. Darwish, et al, *The finite volume method in computational fluid dynamics*, Springer **113** (2016).

[11] D.C. Wilcox et al, *Turbulence modeling for CFD*, volume 2. DCW industries La Canada, CA (1998).

[12] S. Omid, M.H. Tavakoli, K. Mohammadi, Simulation of BGO Single Crystal Growth by Improved Low Thermal Gradient (LTG) Czochralski, *Journal of Research on Many-body Systems* **10** (2018) 23-33. <https://doi.org/10.22055/jrmb.2018.13962>

[13] V.V. Voronkov, B. Dai, M.S. Kulkarni, Fundamentals and engineering of the



شکل 6. بلور ژرمانیوم رشد داده شده به ارتفاع 9 سانتی‌متر و قطر 7 سانتی‌متر به روش چکرالسکی.

مرجع‌ها

[1] H. Wu, N. Conrad, W. Luo, D.Y. Peide, First experimental demonstration of ge cmos circuits, In *2014 IEEE International Electron Devices Meeting*, pages 9–3. IEEE (2014).

<https://doi.org/10.1109/IEDM.2014.7047016>

[2] G.K. Teal, J.B. Little, Growth of germanium single crystals, *Physical review* **78**, American Physical Soc one Physics Ellipse, College Pk, MD 20740-3844 USA (1950) 647–647.

[3] A. Crowley, Mathematical modelling of heat flow in czochralski crystal pulling, *IMA Journal of Applied Mathematics* **30** (1983) 173–189.

<https://doi.org/10.1093/imamat/30.2.173>

[4] N.V. Bogaert, F. Dupret, Dynamic global simulation of the czochralski process ii. Analysis of the growth of a germanium crystal, *Journal of crystal growth* **171** (1997) 77–93.

[https://doi.org/10.1016/S0022-0248\(96\)00489-7](https://doi.org/10.1016/S0022-0248(96)00489-7)

[5] J.J. Derby, Theoretical modeling of czochralski crystal growth, *MRS Bulletin* **13** (1988) 29–35.

<https://doi.org/10.1557/S0883769400064162>

- single crystal, *Journal of Crystal Growth* **483** (2018) 125–133. <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2017.11.021>
- [17] C.W. Lu, J.C. Chen, Numerical simulation of thermal and mass transport during czochralski crystal growth of sapphire, *Crystal Research and Technology: Journal of Experimental and Industrial Crystallography* **45** (2010) 371–379. <https://doi.org/10.1002/crat.200900528>
- [18] D.T.J. Hurle, *Handbook of crystal growth*, Elsevier Science & Technology, (1993).
- [19] Y. Kishida, K. Okazawa, Geostrophic turbulence in cz silicon crucible, *Journal of crystal growth* **198** (1999) 135–140. [https://doi.org/10.1016/S0022-0248\(98\)01123-3](https://doi.org/10.1016/S0022-0248(98)01123-3)
- czochralski growth of semiconductor silicon crystals. *Comprehensive Semiconductor Science and Technology* (2011) 81–169. <https://doi.org/10.1016/B978-0-44-453153-7.00089-4>
- [14] L. Davidson, *An introduction to turbulence models* (2015).
- [15] V.V. Kalaev, I.Y. Evstratov, Y.N. Makarov, Gas flow effect on global heat transport and melt convection in czochralski silicon growth, *Journal of Crystal Growth* **249** (2003) 87–99. [https://doi.org/10.1016/S0022-0248\(02\)02109-7](https://doi.org/10.1016/S0022-0248(02)02109-7)
- [16] M.H. Tavakoli, E. Kabiri Renani, M. Honarmandnia, M. Ezheiyan, Computational analysis of heat transfer, thermal stress and dislocation density during resistively czochralski growth of germanium