

Neue dimensionslose Kennzahl in der Strömungsmechanik

Dr.-Ing. Jelena Aleksic*, Prof. Dr.-Ing. Janusz A. Szymczyk*,
Prof. Dr.-Ing. Alfred Leder**

Fachhochschule Stralsund*, *Universität Rostock*

Abstract. Während der experimentellen Simulation des Czochralski-Kristallzüchtungsprozesses wurde festgestellt, dass die existierenden dimensionslosen Kennzahlen nicht ausreichend sind um die thermokapillare Konvektion unter dem Einfluss der Rotation zu beschreiben. Aus diesem Grund wurde eine neue dimensionslose Kennzahl definiert und zu Ehren des Erfinders der Kristallzüchtungsmethode „Czochralski-Zahl“ (Cz-Zahl) genannt. Die Cz-Zahl wurde erfolgreich zum Verständnis der Instabilitäten des laminar-oszillatorischen Überganges in der Versuchsflüssigkeit eingesetzt.

1 Einführung

In den letzten Dekaden hat die Nutzung der Halbleitereinkristalle gewaltig zugenommen. Der größte Teil von etwa 80 % aller Halbleiterkristalle werden mit dem Czochralski-Verfahren [1] hergestellt. Bei der Züchtung dieser Kristalle gilt ganz allgemein die Feststellung, dass die technisch erforderliche Qualität der Einkristalle nur dann erreicht wird, wenn die "Grenzflächen- und Transportphänomene", die während der Kristallherstellung die dominierende Rolle spielen, technisch und wissenschaftlich beherrscht werden.

Um das Czochralski-Prozess zu simulieren werden drei unabhängige thermische Systeme benutzt: eine Wandheizung der Messzelle, eine Bodenkühlung der Messzelle sowie eine Kühlung des Stabes, der den wachsenden Kristall simuliert. Zusätzlich kann auf die Flüssigkeitsoberfläche ein Heizring eingesetzt werden um die thermokapillare Konvektion zu beeinflussen. Mit zwei getrennten kinematischen Systemen können die Messzelle und der Stab rotiert werden. Alle diese Systeme erzeugen verschiedene Randbedingungen die eine komplizierte Strömungstopologie verursachen und auf diese Weise einen entscheidenden Einfluss auf die Homogenität des gezüchteten Kristalls haben. Mit der Versuchsanlage ist es möglich alle in dem realen Czochralski-Prozess vorkommenden Parameter zu simulieren und deren Einfluss auf die Konvektion in der Schmelze zu bestimmen.

2 Problemstellung und Zielsetzung

Die Konvektion ist eine Form des thermischen Energietransportes, bei der die Energie durch Wärmeleitung und durch Bewegungen eines Fluids transportiert

wird. Es findet damit eine Überlagerung von interatomarem oder intermolekularem Impulsaustausch und makroskopischem Transport von an Masse gebundener Energie statt.

Welche Strömung in einer der vielen in dieser Arbeit betrachteten Konfigurationen vorliegt, hängt von zahlreichen Parametern ab, im Allgemeinen von den thermischen und kinematischen Randbedingungen. Die Randbedingungen bestimmen wiederum die Existenz und Größe der dimensionslosen Kennzahlen und diese wiederum charakterisieren die Strömungsvorgänge in der Schmelze und legen die Grenzen des laminar - turbulenten Umschlages fest.

Nach den dominierenden Einflussgrößen, bzw. dominierenden Konvektionsarten, kann man die Messzelle geometrisch in vier Bereiche aufteilen (siehe Abb. 1):

1. den thermokapillar beeinflussten Bereich (Oberflächenbereich mit dominierender thermokapillarer tangentialer Kraft in der Grenzschicht),
2. den durch Gravitation beeinflussten Bereich (Jetbereich mit dominierender Gravitationskraft),
3. den thermisch beeinflussten Bereich (Wandbereich mit dominierender thermischer Auftriebskraft) und
4. den inneren Bereich der Zelle zwischen der Außenwand und dem Jet (mit dominierender Reibungskraft). Im inneren Bereich der Zelle entwickelt sich eine Konvektionsrolle als Konsequenz des Einflusses der ersten drei Bereiche.

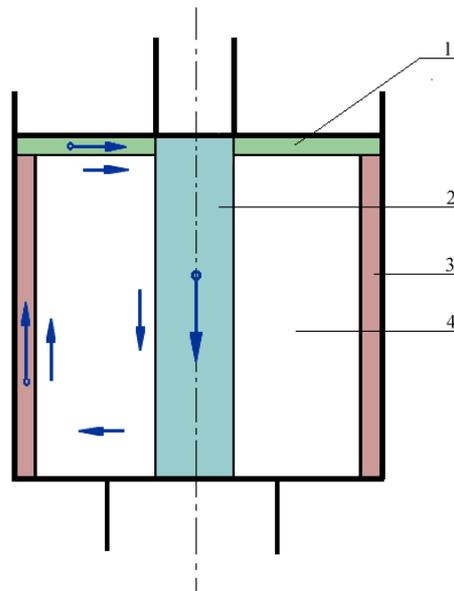


Abbildung 1: Geometrische Aufteilung der Strömungsbereiche in der Messzelle

Das Ziel ist die Festlegung der Randbedingungen, die eine stabile bzw. rotationssymmetrische Strömung in der Schmelze mit nur einer Konvektionsrolle (siehe Abb. 2) und ohne Oszillationen der freien Oberfläche

ermöglichen. Die Konvektionsrolle soll den Materialnachschub zu dem wachsenden Kristall sichern, um ein zur Schmelze konvexes Wachstum zu ermöglichen ohne jegliche Gitterfehler in der Kristallstruktur.

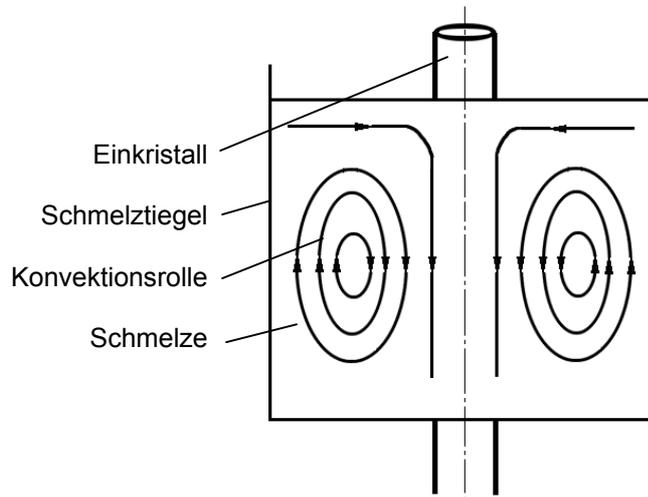


Abbildung 2: Ideale Strömungstopographie

Rotationssymmetrische Temperaturfelder sind ebenso erforderlich. Gleichzeitig ist es notwendig, eine ideale Form des vertikalen Geschwindigkeitsprofils sowie der Eindringtiefe der Grenzschichtströmung zu erreichen.

3 Ähnlichkeits-Kennzahlen

Nachfolgend werden für die Czochralski-Konfiguration relevante Ähnlichkeits-Kennzahlen definiert und den Konvektionsarten, für die sie charakteristisch sind, zugeordnet.

3.1. Thermokapillare Konvektion

Das Verhältnis von Trägheits- zu Reibungskräften stellt die Reynolds-Zahl dar und charakterisiert damit Strömungen unter Reibungseinfluss. Damit ist die Reynolds-Zahl ein entscheidendes Kriterium für laminare oder turbulente Strömungen.

$$\text{Re} = \frac{\text{Trägheitskraft}}{\text{Reibungskraft}} \quad (1)$$

$$\text{Re} = \frac{v_0 \cdot R}{\nu} \quad (2)$$

ν stellt die kinematische Viskosität der Schmelze dar.

Mit dem Newtonschen Ansatz für die Reibungskräfte zweier Fluidschichten, die sich parallel mit der Geschwindigkeit v im Abstand H zueinander verschieben,

ergibt sich nach Gleichsetzen und Skalierung der Tangentialspannung und des Grenzflächenspannungsgradienten tangential zur ebenen Grenzfläche

$$\tau_N = \eta \cdot \frac{dv}{dh} \quad (3)$$

$$\tau_{Mg} = \frac{d\sigma}{dr} = \frac{d\sigma}{dT} \cdot \frac{dT}{dr} \quad (4)$$

$$\eta \cdot \frac{dv}{dh} = \frac{d\sigma}{dT} \cdot \frac{dT}{dr} \quad (5)$$

$$\eta \cdot \frac{v_0}{H} = \frac{d\sigma}{dT_R} \cdot \frac{\Delta T_R}{R} \quad (6)$$

die charakteristische thermokapillare Geschwindigkeit v_0

$$v_0 = \left| \frac{d\sigma}{dT_R} \right| \cdot \frac{\Delta T_R}{R} \cdot \frac{H}{\eta} \quad (7)$$

Die Marangoni-Zahl gibt das Verhältnis des Wärmetransports durch Grenzflächenkonvektion zum dissipativen Wärmetransport durch Wärmeleitung wieder und berücksichtigt damit auftretende Oberflächeneffekte.

$$Mg = \frac{\text{Wärmetransport durch Grenzflächenkonvektion}}{\text{dissipativer Wärmetransport durch Wärmeleitung}} \quad (8)$$

$$Mg = \frac{v_0 \cdot R}{a} \quad (9)$$

Die Prandtl-Zahl stellt eine reine Stoffgröße dar und vergleicht zwei molekulare Transportgrößen:

$$Pr = \frac{\text{durch Reibung erzeugte Wärmemenge}}{\text{fortgeleitete Wärmemenge}} \quad (10)$$

$$Pr = \frac{Mg}{Re} = \frac{\frac{v_0 \cdot R}{a}}{\frac{v_0 \cdot R}{\nu}} = \frac{\nu}{a} \quad (11)$$

Dabei bedeutet ν die kinematische Viskosität und charakterisiert die durch Reibung erzeugte Wärmemenge und die Temperaturleitfähigkeit a charakterisiert den Transport von Wärmeenergie durch Wärmeleitung.

3.1. Erzwungene Konvektion

Bei der Rotation um die vertikale Achse mit der Winkelgeschwindigkeit ω ist die rotatorische Froude-Zahl, die den Quotienten aus Zentrifugalkraft und Schwerkraft darstellt, eine den Einfluss der Rotation kennzeichnende Größe.

$$(Fr)_{\omega} = \frac{\text{Zentrifugalkraft}}{\text{Schwerkraft}} \quad (12)$$

$$(Fr)_{\omega} = \frac{\omega^2 \cdot R}{g} \quad (13)$$

Bei den Versuchen in denen die Messzelle rotiert, unabhängig davon ob der Stab rotiert, werden für den ω - und den R-Wert die Winkelgeschwindigkeit (ω_{Zelle}) und der entsprechende Radius der Messzellen (R) eingesetzt. Bei den Experimenten, in denen nur der Stab rotiert, werden für den ω - und den R-Wert die Winkelgeschwindigkeit (ω_{Stab}) und der Radius des Stabes (r_s) eingesetzt. Diese Vorgehensweise wird für alle rotatorischen Kennzahlen angewendet.

Die rotatorische Re-Zahl stellt das Verhältnis von Trägheitskraft im Zentrifugalfeld zur Reibungskraft dar.

$$(Re)_{\omega} = \frac{\text{Trägheitskraft im Zentrifugalfeld}}{\text{Reibungskraft}} \quad (14)$$

$$(Re)_{\omega} = \frac{\omega \cdot R^2}{\nu} \quad (15)$$

Die existierenden Kennzahlen sind nicht ausreichend, um die thermokapillare Konvektion unter dem Rotationseinfluss beschreiben zu können. Aus diesem Grund wird in dieser Arbeit eine neue dimensionslose Kennzahl definiert und eingeführt. Sie wird „Czochralski-Zahl“ genannt und stellt das Verhältnis von thermokapillarer Kraft zur Zentrifugalkraft dar.

$$Cz = \frac{\text{thermokapillare Kraft}}{\text{Zentrifugalkraft}} \quad (16)$$

$$Cz = \frac{R \cdot \nu_0}{\omega \cdot R^2} = \frac{\nu_0}{\omega \cdot R} \quad (17)$$

Die Cz-Zahl setzt sich aus folgenden dimensionslosen Zahlen zusammen:

$$Cz = \frac{Mg}{Pr \cdot (Re)_{\omega}} = \frac{Re}{(Re)_{\omega}} \quad (18)$$

4 Messtechnik

Es wurden zwei optische Messverfahren gleichzeitig benutzt. Eine neuartige Messmethode (Particle Image Thermometry PIV) und die Software zur quantitativen Bestimmung von Temperaturfeldern wurden entwickelt [3-5]. Die Methode basiert auf der selektiven Lichtreflexion von Flüssigkristallen aufgrund der Temperatur. Bei der Particle Image Velocimetry (PIV) fungieren die Flüssigkristalle indessen als Tracer. Diese Messtechnik ermöglicht eine berührungslose Messung der Strömungsgeschwindigkeit des ganzen Feldes.

5 Präsentation der Ergebnisse

Es wurden Versuche mit $Pr = 331$ und 1 U/min gegensinniger Stab- und Messzellenrotation durchgeführt, um die Veränderung der Strömungstopographie bei größer werdender Temperaturdifferenz an der Flüssigkeitsoberfläche bzw. größer werdender Mg - und Cz -Zahl zu erkennen. Zu diesem Zweck wurde die Temperatur der Messzellenwand vergrößert und die restlichen Versuchsparameter konstant gehalten (Höhe des Flüssigkeitsspiegels $H = 72 \text{ mm}$, $R = 40 \text{ mm}$, $r_S = 15 \text{ mm}$, Stabtemperatur $19,5^\circ\text{C}$, Messzellenboden-Temperatur $21,3^\circ\text{C}$). Die Messergebnisse sind in der Abb. 3 dargestellt.

Im Gegensatz zu der Aussage von Yi et al. [6], dass eine Aufhebung der Rotationssymmetrie mit einer langsameren Drehung der Messzelle und einen großen Temperaturgradient zwischen der Wand und dem Kristall verhindert werden kann, wird hier die Rotationssymmetrie und die thermokapillare Konvektionsrolle bei kleiner Rotationsraten von 1 U/min und bei Erhöhung der Temperaturdifferenz von 5°C auf 30°C weiterhin zerstört. Eine extreme Erhöhung der Mg -Zahl (von $6,5 \cdot 10^3$ auf $3,9 \cdot 10^4$) wirkt destabilisierend auf die Strömung (siehe Abb. 3). Die zusätzliche Rotation zerstört die symmetrische Strömungstopographie weiter und es ist kein stabilisierender Effekt auch bei den höchsten Mg -Zahlen erkennbar.

Die neu eingeführte Cz -Zahl zeigt, dass die Konvektionsrollen erhalten bleiben, sofern die thermokapillare und zentrifugale Kraft einen vergleichbaren Wert besitzen (bei $Cz \sim 1$) (Abb. 3A, B). Bei einer weiteren Erhöhung der Cz -Zahl ($Cz \geq 3$) übernimmt die thermokapillare Konvektion die Dominanz über die erzwungene Konvektion. Die thermokapillare Konvektionsrolle ist aber nicht zu erkennen, da es bei der extrem erhöhten Mg -Zahl ($Mg \geq 2,6 \cdot 10^4$) auch ohne Rotation zur Zerstörung der Strömungsstabilität kommt (Abb. 3C, D).

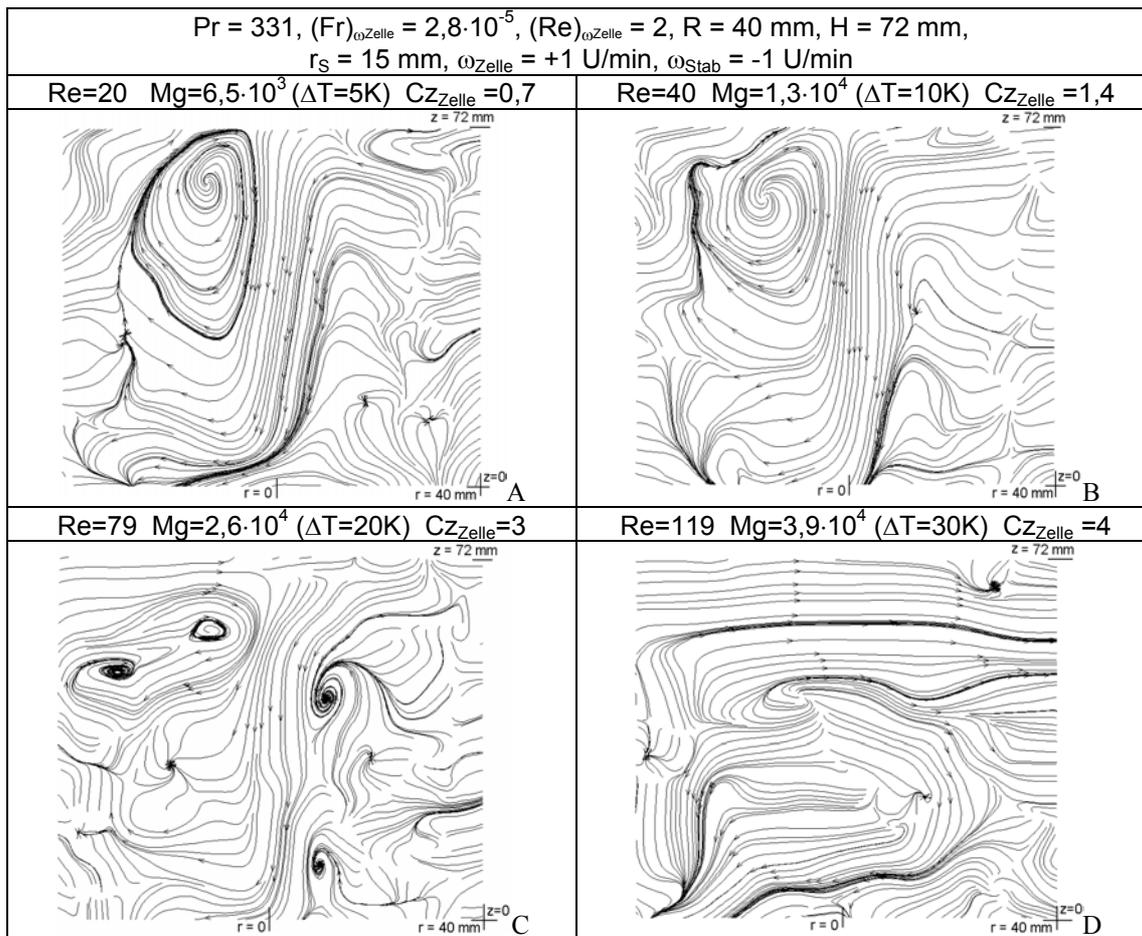


Abbildung 3: Topographie der Strömung unter Rotationseinfluss und bei variablen Temperaturgradienten an der Flüssigkeitsoberfläche

6 Zusammenfassung

Die neu eingeführte Cz-Zahl zeigt, dass die Konvektionsrolle erhalten bleibt, sofern die thermokapillare und zentrifugale Kraft einen vergleichbaren Wert besitzen (bei $Cz \sim 1$). Bei einer weiteren Erhöhung der Cz-Zahl ($Cz \geq 3$) übernimmt die thermokapillare Konvektion die Dominanz über die erzwungene Konvektion. Die thermokapillare Konvektionsrolle ist nicht zu erkennen, da es bei der extrem erhöhten Mg-Zahl auch ohne Rotation zur Zerstörung der Strömungsstabilität kommt.

Literatur

- [1] Czochralski, J.: „Ein neues Verfahren zur Messung der Kristallisationsgeschwindigkeit der Metalle“, Z. Physik. Chem. 92, pp. 219-221, 1918.
- [2] Jischa, M.: „Konvektiver Impuls-, Wärme- und Stoffaustausch“, Vieweg, 1982.
- [3] Aleksic, J., J. A. Szymczyk, A. Leder: “Interaction of the thermocapillary, thermal and forced convection in the Czochralski-configuration of the silicon crystal growth”,

- Developments in Theoretical and Applied Mechanics, Volume XXI, pp. 57-64, Rivercross Publishing, Inc. Orlando, 2002.
- [4] Aleksic, J., P. Zielke, J. A. Szymczyk: "Temperature and Flow Visualization in a Simulation of the Czochralski Process using TLCs", pp. 158-163, Annals of New York Academy of Science Volume 972, 2002.
- [5] Szymczyk, J. A., J. Aleksic, P. Zielke: "Topography of laminar and oscillatory thermal and thermocapillary convection in a Czochralski process", pp. 673-680, WIT Press, 2003.
- [6] Yi, K.-W.; Booker, V. B.; Eguchi, M.; Shyo, T.; Kakimoto, K.: "Structure of Temperature and Velocity Fields in the Si melt of a Czochralski Crystal Growth System", Journal of Crystal Growth 156, pp. 383-392, 1995.
- [7] Aleksic, J.: "Beeinflussung der thermokapillaren Konvektion und ihres oszillatorischen Umschlages durch thermische und kinematische Randbedingungen", Dissertation, Universität Rostock, 2003