

1. 緒言

近年、半導体や太陽光発電素子の高精度、高性能化に伴い、高品質かつ大型のシリコン単結晶の精製が望まれている。

一般的にシリコン結晶を生成に用いる方法としてチョクラルスキー法があり、生成した結晶の大量生産及び大型化が容易である。チョクラルスキー法はアルゴンガス雰囲気中に結晶を生成することによって、余計な化学反応を抑制することに加えアルゴン流によってシリコンを冷却し単結晶の生成を促している。しかし、石英るつぼなどから発生する一酸化ケイ素等の不純物が、精製中のシリコン単結晶に混入し純度の低いシリコン単結晶が生成せれる原因となっている。そこでチョクラルスキー法の精製炉内でのアルゴン流を数値的に解析することで不純物の発生を防ぐ方法、および除去方法を考える。

2. 基礎方程式および境界条件

有限体積法数値流体解析ソフト ANSYS 社の Fluent を用いて解析を行った、Fluent において使用する基礎式、連続の式及び運動方程式を以下に示す。

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} \tag{2}$$

ここで、 u_i は流速ベクトル、 P は圧力、 ρ は流体の密度、 ν はアルゴンの動粘性係数、 t は時間を表している。乱流モデルは産業界で広く用いられており、初期条件と境界条件だけが必要なもつとも単純な標準型 $k-\epsilon$ モデルを用いる。以下に標準型 $k-\epsilon$ モデルを示す。

乱流エネルギー k の輸送方程式

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k - \epsilon \tag{3}$$

エネルギー離散率 ϵ の輸送方程式

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\epsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + \frac{\epsilon}{k} (C_{1\epsilon} G_k - C_{2\epsilon} \epsilon) \tag{4}$$

$$\mu_t = C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \tag{5}$$

$$G_k = -u'_i u'_j \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \tag{6}$$

レイノルズ応力表現式

$$-\overline{u'_i u'_j} = -\frac{2}{3} k \delta_{ij} + \mu_t \left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \right) \tag{7}$$

ここで、 k は乱流エネルギー (m^2/s^2)、 ϵ はエネルギー散逸 (m^2/s^2)、 μ_t は渦動粘性係数、 G_k は乱れエネルギーの生成項、 $\overline{\quad}$ はレイノルズ分解による平均成分、 $'$ は変域を表している。式内の $C_{1\epsilon}$ 、 $C_{2\epsilon}$ 、 C_μ 、 σ_k 、 σ_ϵ は定数であり以下の通である。

$$C_{1\epsilon} = 1.44, C_{2\epsilon} = 1.92, C_\mu = 0.09, \sigma_k = 1.0, \sigma_\epsilon = 1.3$$

図 1 に解析形状を示す。流入口 2 から周方向に流入させる。

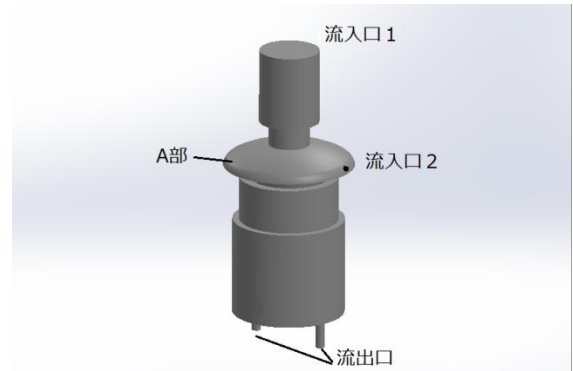


図 1 解析形状

表 1 境界条件

流入口 1 境界条件	一様流速 1.6m/s ゲージ圧力 0
流入口 2 境界条件	一様流速 16.6m/s ゲージ圧力 0
流出口境界条件	速度勾配 0 ゲージ圧力 -2000P
壁面境界条件	すべりなし

3. 実験結果および考察

図 2 の (a) に流入口 1 から下部に向けてアルゴンガスを流入させたとき、(b) に流入口 1, 2 からアルゴンガスを流入させたときの解析結果を示す。図 2(a) では図 1 の A 部で渦が発生していることがわかる。この部分で不純物が排出されず停留していると考えられる。排出されない不純物は炉の壁面に付着し結晶化する。結晶化したものが剥がれ落ちシリコン単結晶に混入していると考えられる。これを改善するため流入口 2 からアルゴンガスを流入させた。流入させることで渦の発生を抑え不純物が壁面に付着する前に炉外へと排出できるためである。流入口 2 の周方向では渦の発生が抑えられたが、A 部より中心側では渦の発生を抑えることができなかった。

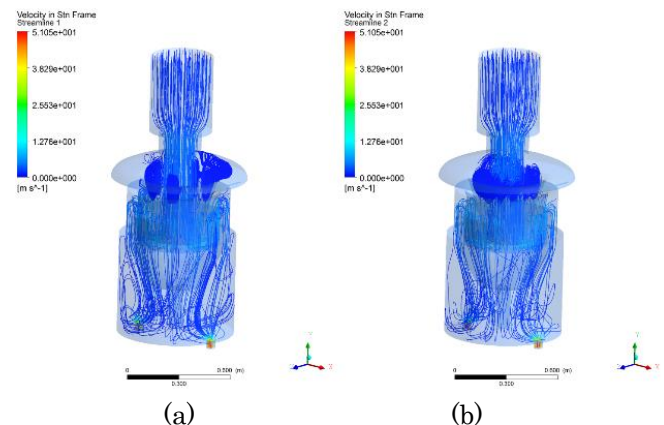


図 2 炉の中央断面における流線