

# OpenFOAMによる 結晶成長融液内熱対流解析

---

静岡大学工学部物質工学科  
高木洋平

2009年11月7日(土)

オープンソースCAEワークショップ@東京大学本郷キャンパス

# 結晶成長

- 半導体結晶
  - シリコン(Si)
  - 化合物
    - SiGe, InGaAs, ZnTe

高性能・高品質なバルク  
単結晶の作製

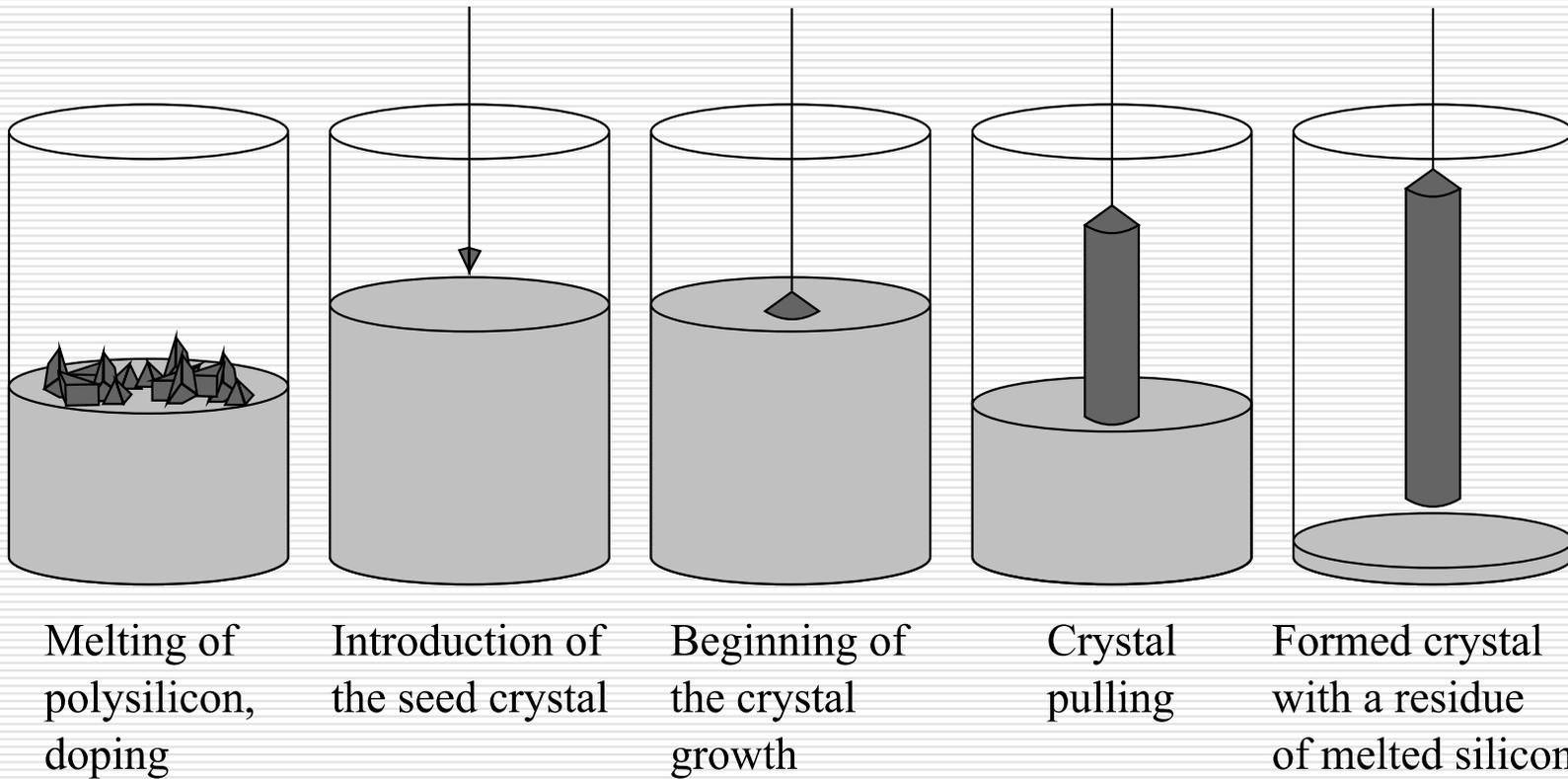
- ✓ 融液・溶液内に半導体結晶  
を入れて成長させる



Siバルク単結晶

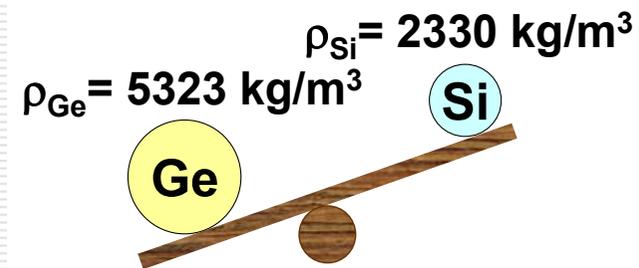
# 結晶成長法(シリコン)

## □ Czochralski法

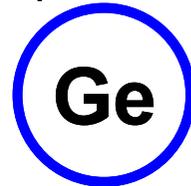


# 化合物半導体の結晶成長

## □ SiGeの性質



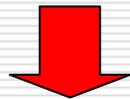
$T_{\text{mp}} = 1211\text{K}$



$T_{\text{mp}} = 1687\text{K}$



重力偏析

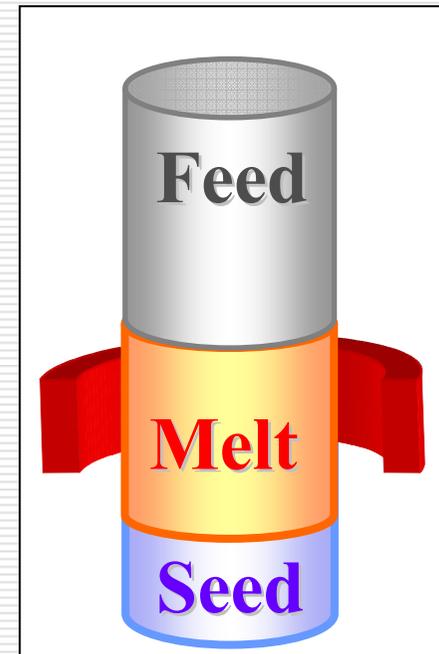
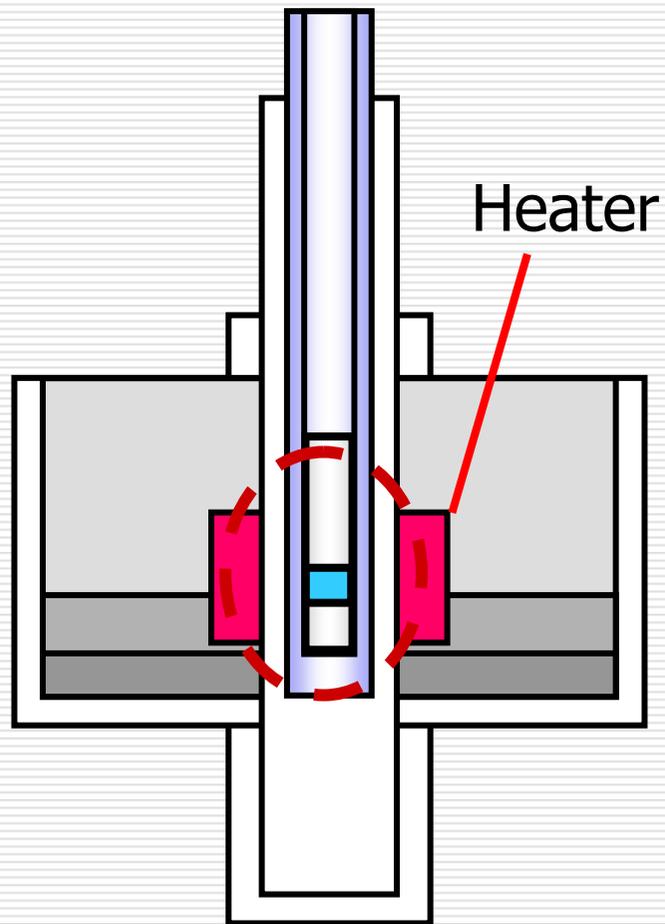


溶液成長法の利用



# Traveling Heater Method (THM)

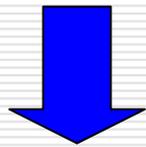
---



# 研究目的

## □ THMにおける対流制御

- 磁場の印加
- るつぼの回転

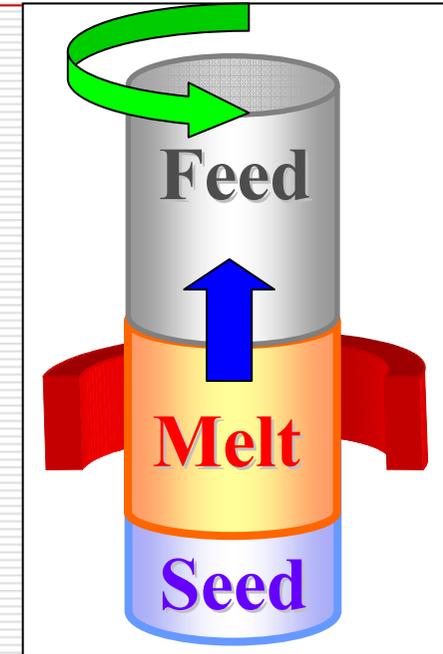


OpenFOAM

## □ 外力の対流抑制効果

## □ 均質な結晶作製のための操作条件

- 界面付近でのSi濃度分布



# 基礎方程式

---

## □ Navier-Stokes方程式

$$\frac{\partial U}{\partial \tau} + U \cdot \nabla U = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \nu \nabla^2 U + \underline{S} + \underline{F}$$

$$\underline{S} = (\beta_T g(T - T_0) + \beta_C g(C - C_0)) e_z$$

$$\underline{F} = J \times B_0$$

## □ 誘導方程式

$$\frac{\partial B}{\partial \tau} + \nabla \cdot (U \times B - B \times U) - \nabla \cdot \frac{1}{\sigma \mu} \nabla B = 0$$

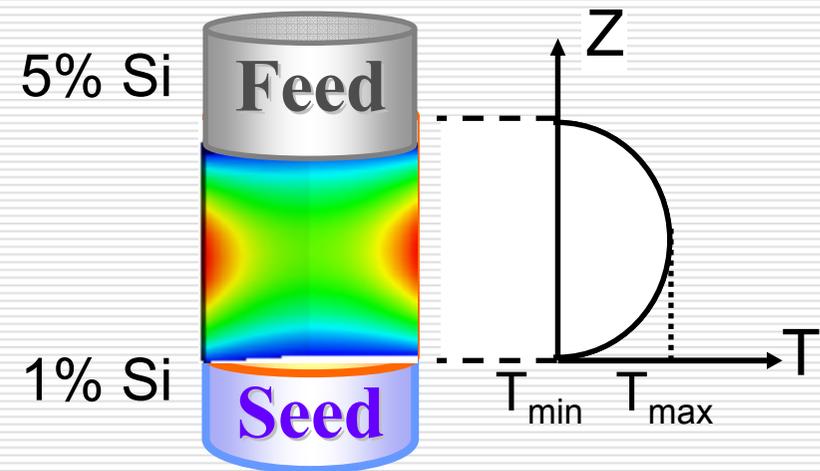
## □ エネルギー方程式

## □ 拡散方程式

---

# 使用ソルバー・境界条件

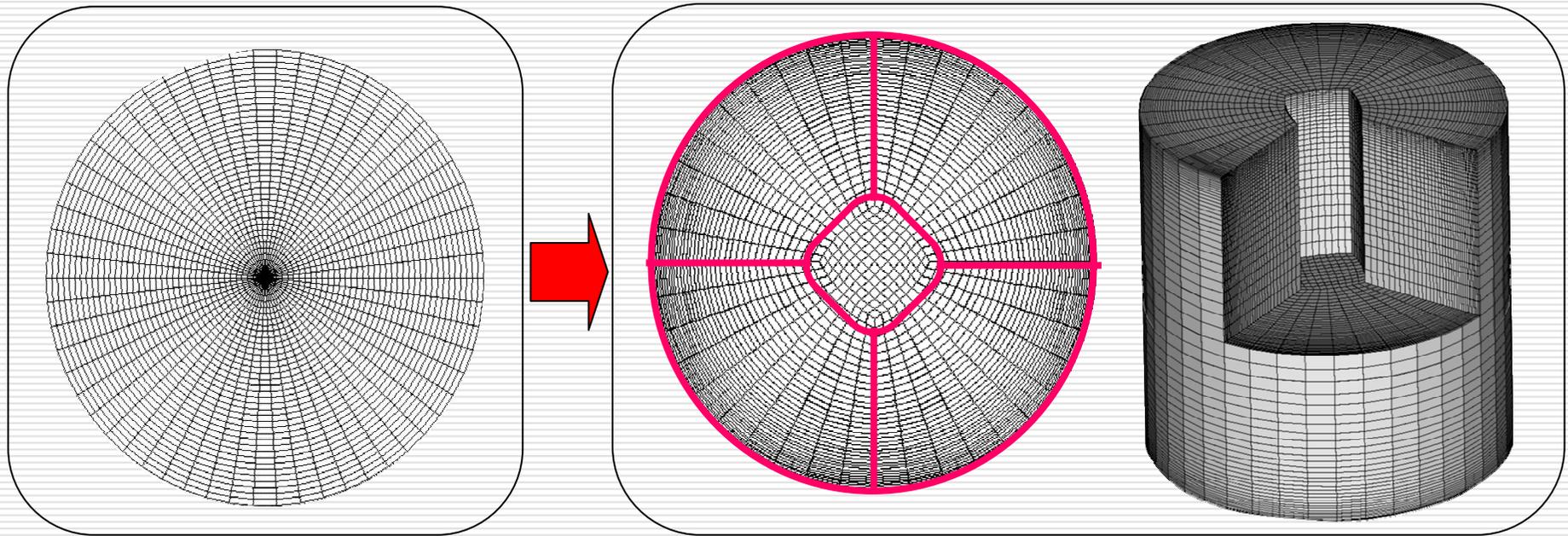
- ソルバー:  
boussinesqBuoyantFoam+mhdFoam
- 境界条件;
  - 回転: uniformAxialRoation
  - 磁場: 一様縦磁場
  - 温度
  - 濃度



# 計算格子

---

- blockMeshを使用
- 円筒座標系→マルチブロック格子



# 計算条件

---

## □ 2cm径結晶

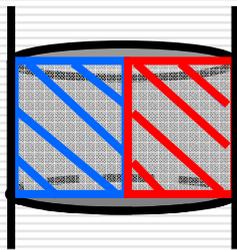
	回轉(10rpm)	磁場(1.5kG)
Case1	×	×
Case2	○	×
Case3	×	○
Case4	○	○

## □ 6cm径結晶

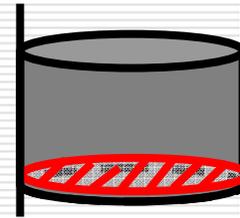
---

---

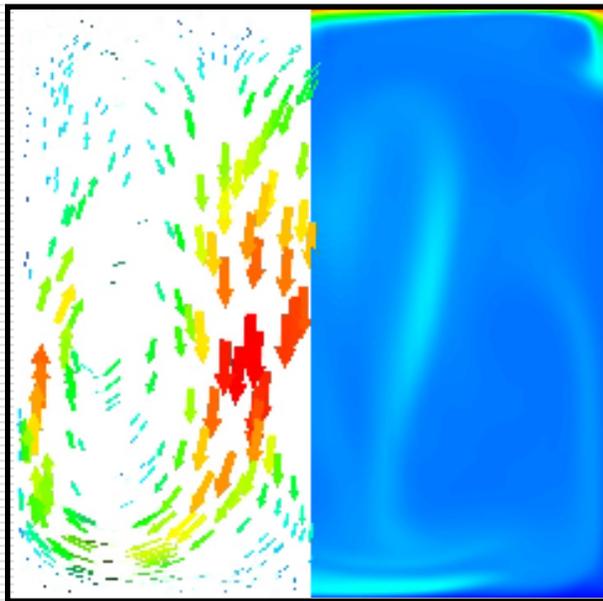
# 計算結果(Case1:外力なし)



鉛直断面

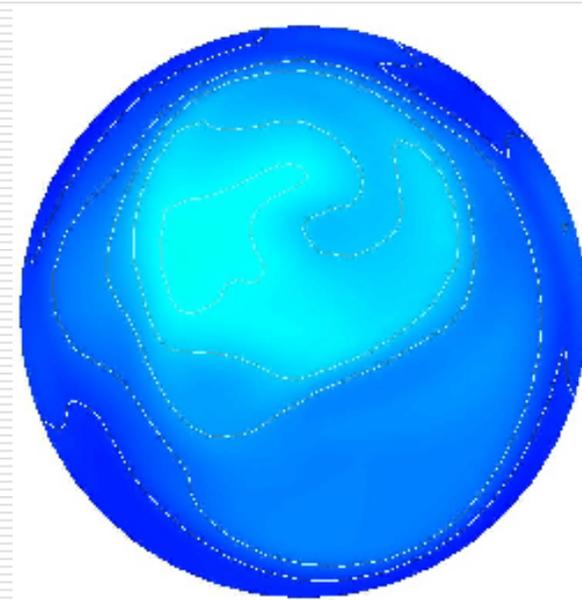


水平断面



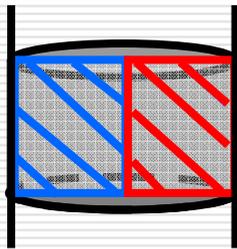
速度

Si濃度

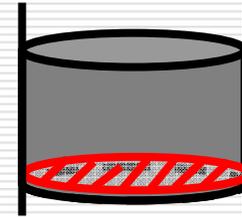


Si濃度

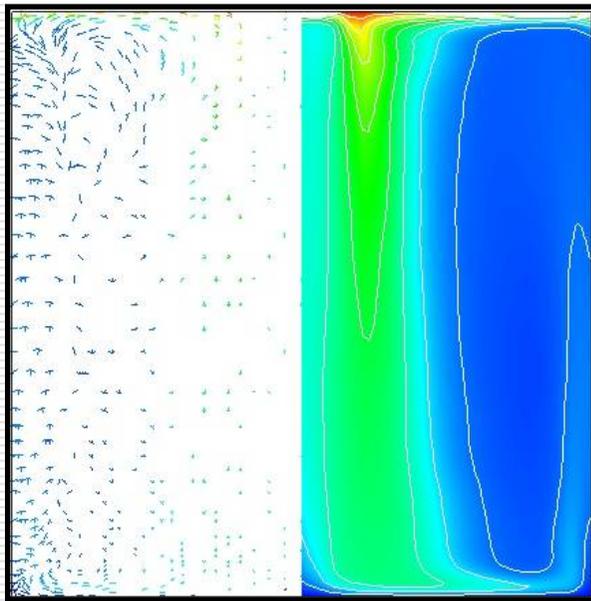
# 計算結果(Case2:回転のみ)



鉛直断面

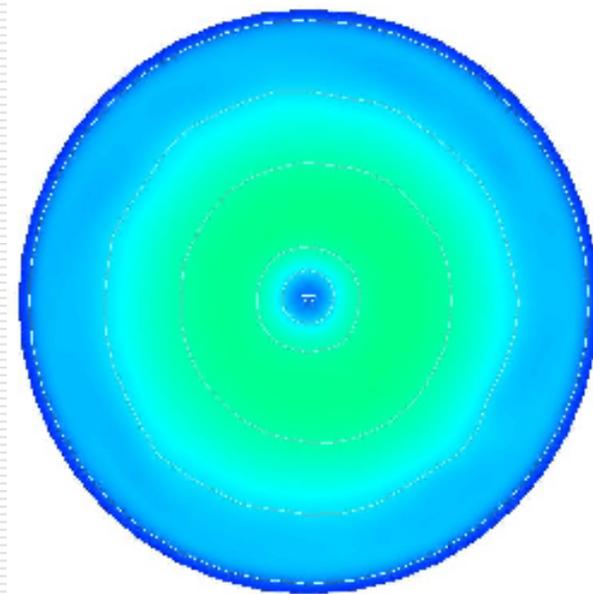


水平断面



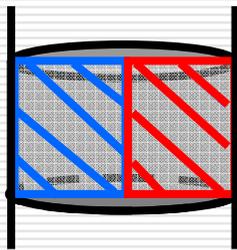
速度

Si濃度

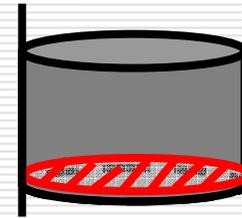


Si濃度

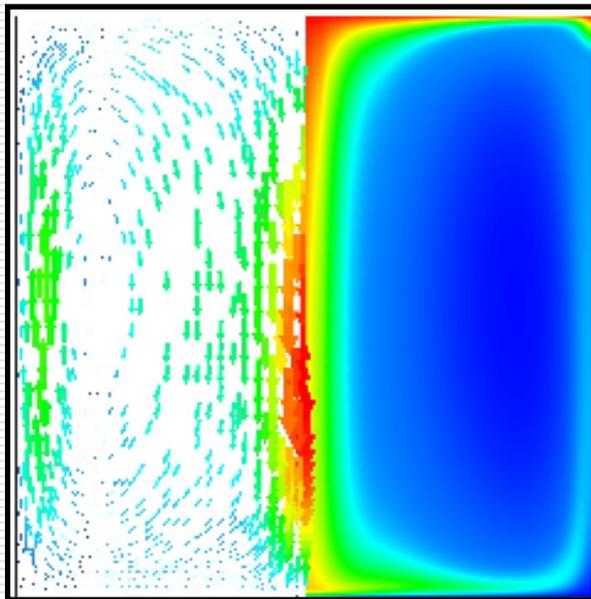
# 計算結果(Case3:磁場のみ)



鉛直断面

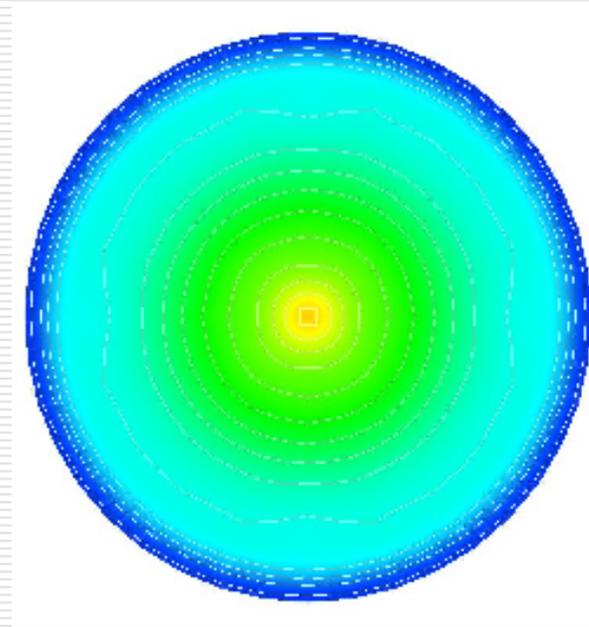


水平断面



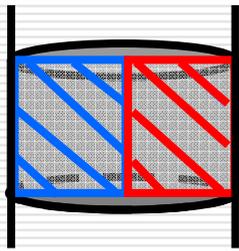
速度

Si濃度

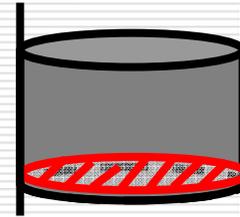


Si濃度

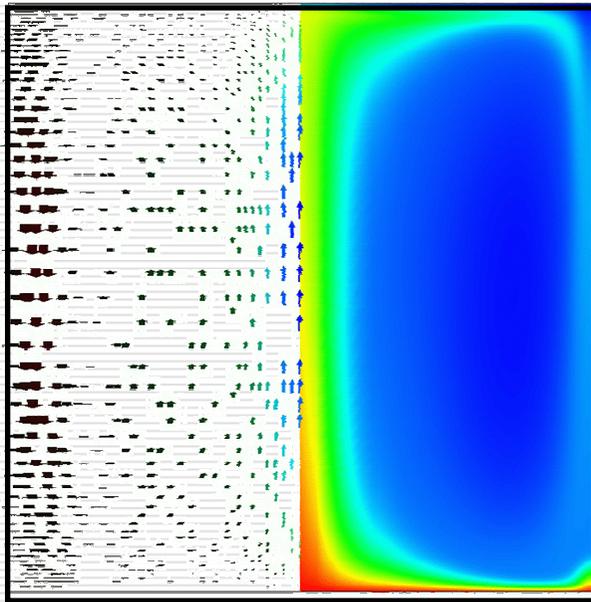
# 計算結果(Case4: 回轉&磁場)



鉛直断面

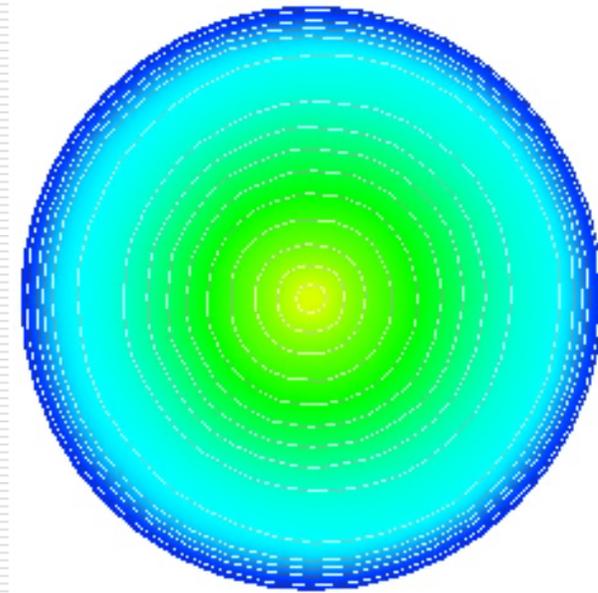


水平断面



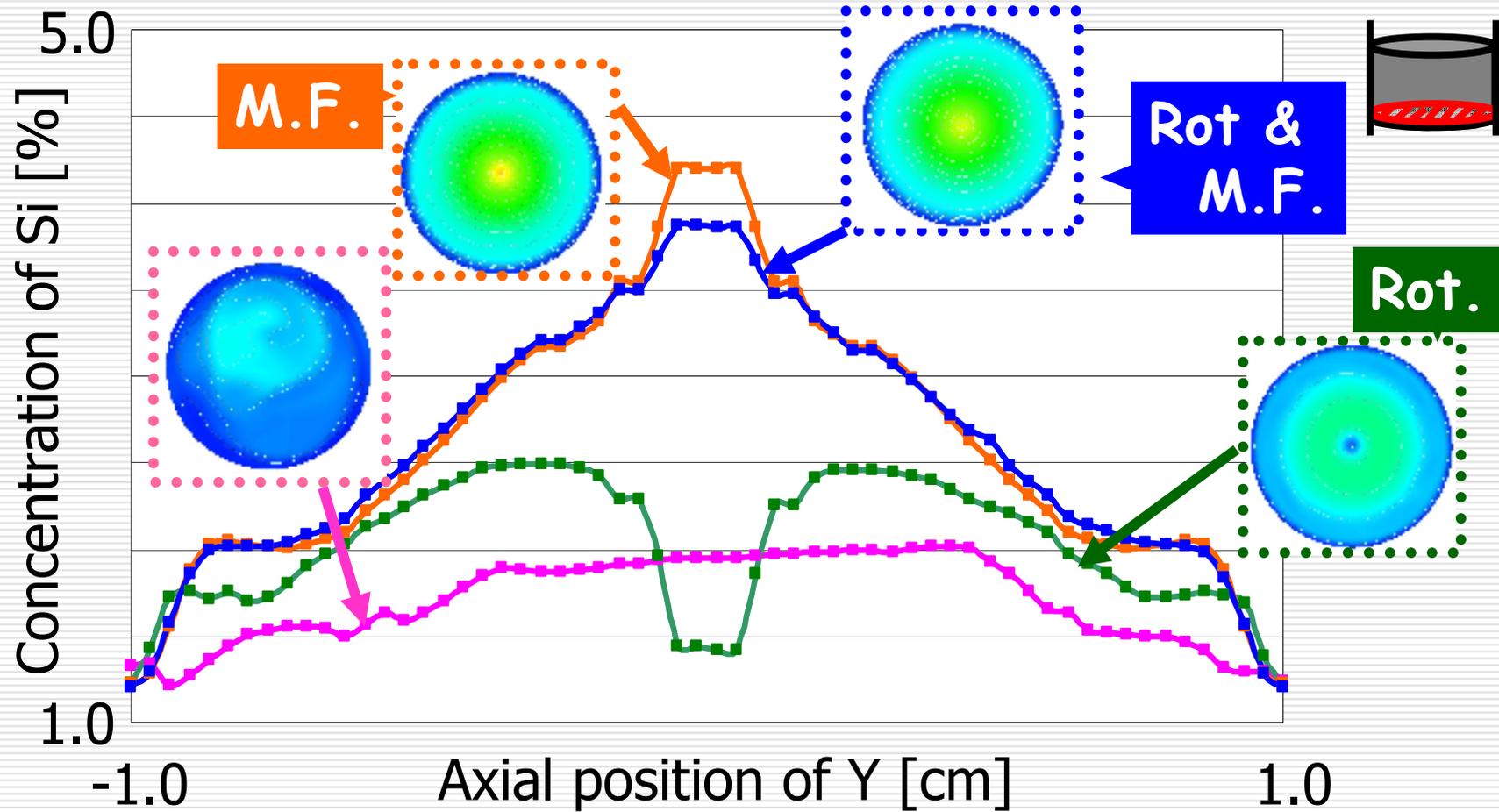
速度

Si濃度



Si濃度

# Si濃度の径方向分布



# 結論

---

- OpenFOAMを用いて、結晶成長融液内の物質移動現象に対する外力の効果を検討できた。
  - 2cm径のとき、結晶中心部でSi濃度を高めるためには、磁場のみを印加して対流を制御する方法が有用である。
  - 径方向に均質な高品質結晶を作製するためには、径サイズに応じた最適な磁場と回転を組み合わせる必要がある。
-

# 今後の課題と展開

- OpenFOAMを用いることにより、
  - 大口径結晶の解析
  - るつぼ部分の伝熱計算
  - 結晶成長界面(固液界面)でのバランス式の考慮
  
- 適用範囲の拡大
  - マランゴニ対流を考慮する Floating Zone法
  - ふく射を伴う Czochralski法

