

FEMAG 软件在单晶硅提拉生长工艺模拟中的应用综述

沈鑫¹, 梁琳^{1*}

¹中仿科技公司, 漕河泾开发区松江高科技园, 上海, 201612

*通讯作者, 邮箱: info@cntech.com; 电话: +86-21-37696588

摘要: 单晶硅一直是半导体行业中非常重要的晶体材料, 具有非常可观的市场应用前景。论文分析了在半导体行业中单晶硅生长的应用和研究现状, 并综述了 FEMAG 数值模拟软件在单晶硅生长仿真中的应用, 总结得出结论, 利用专业化的晶体生长数值模拟软件 FEMAG, 可以全面地分析晶体生长工艺, 在实际应用中能显著提高研发效率、降低产品开发周期, 同时也可为提高晶体质量、控制晶体生长缺陷提供切实可行的解决方案。

关键词: 半导体; 单晶硅; 晶体生长; 提拉法; FEMAG; 数值模拟

Application on simulation technology of mono-crystal silicon growth using the FEMAG

Xin Shen¹, Lin Liang^{1*}

¹CnTech Co.,Ltd, Songjiang High-Tech Park, Caohejing Development Zone, Shanghai, China, 201612

* Corresponding author, E-mail: info@cntech.com; Tel: +86-21-37696588

Abstracts: The mono-crystal silicon is an important crystal material used for the semiconductor industry, and its marketing application prospect is very board as well. The application status of the mono-crystal silicon and numerical simulations of mono-crystal silicon growth with the FEMAG are analyzed. It is showed that the crystal growth process and crystal quality can be improved significantly, and the research and development costs of the mono-crystal silicon products will be saved efficiently with the FEMAG, an efficient package for the numerical simulation of crystal growth.

Keywords: Semiconductor; Mono-crystal silicon; Crystal growth; Czochralski method; FEMAG; Numerical Simulation.

1 概述

高度创新的半导体芯片产业需要借助新材料和技术实现更高的处理能力和更大的内存

容量。然而，所有这一切只有凭借功能日益强大的半导体元件才能实现。因此，对晶体半导体材料以及晶片尺寸的要求日益提高。1958 年 9 月，集成电路（Integrated Circuit，IC）发明成功。1965 年，英特尔创始人 Gordon Morre 便敏锐地意识到这点。IC 的复杂性平均每 18 个月增加一倍（这一发展趋势称为 Morre 定律）。由于半导体行业的迅猛发展，晶体生长工艺相关要求也亟需同步提升。而单晶硅是最常用的半导体芯片晶体材料。随着我国单晶硅片行业的发展，单晶硅生产核心技术应用与研发成为业内企业与研究者关注的重点。技术的优劣直接决定单晶硅产品的市场竞争力。研究单晶硅的生长工艺，有效地提高单晶硅的质量具有十分重要的实际意义。

单晶硅片的技术门槛相对较高，多是由拥有雄厚技术和生产规模的大型企业参与，竞争企业相对较少。从市场集中度看，在中小企业退出行业的同时，大型龙头企业通过产业布局和技术更新不断提升品质、降低成本，市场占有率逐步提高，行业集中度不断提升。从产能的角度看，国内单晶硅生产企业主要分布在江苏、浙江等省市。江苏省生产单晶硅的企业共有 32 家，占总市场分布的 40%。国内各省市单晶硅生产企业分布如图 1 所示。

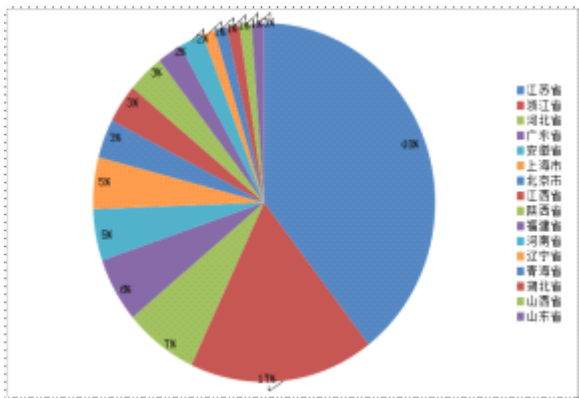


图 1 单晶硅生产企业分布

2 单晶硅的提拉生长工艺研究现状

单晶硅的晶体生长工艺和方法有很多种，目前发展最为成熟的，应用也最广泛的是提拉生长法。

随着半导体芯片的发展，半导体芯片对单晶硅的晶体质量要求越来越高。合格的半导体单晶体硅产品，要满足多项严格的参数指标，具体可包括晶体晶向、氧碳含量、参杂型号、径向电阻率、位错缺陷密度、金属含量，直径偏差等^[1,2]。

根据晶体的生长理论，晶体生长过程中的碳氧量，位错缺陷等受到诸多因素的影响，例如温度，压力，流动等。因此在实际生产中，通常要求晶体生长炉能建立适合稳定的热场，同时还要求在生长过程中对熔体温度、熔体对流、晶体旋转、晶体的生长速度、固液界面位置、炉内压力、保护气流量等工艺参数进行精确的控制优化。

表 1 列出了提拉生长工艺中常见的晶体质量参数和对其产生影响的工艺参数。

晶体质量参数	与晶体质量参数相关的晶体生长工艺		
电阻率均匀性	晶转	蜗转	磁场
氧碳含量	氢气流量、压力	坩埚位置	磁场
微缺陷	晶体生长速度	界面处轴向温度梯度度磁场	磁场
晶体直径	熔体温度	晶体生长速度	坩埚上升速度

表 1 晶体质量参数和对其产生影响的工艺参数

为了获得高质量、低成本，高产率的单晶硅，科学研究工作者对单晶硅的提拉工艺展开了大量的研究，目前研究热点主要集中在对晶体质量缺陷的实验预测，理论分析，以及对晶体生长工艺参数和设备的优化上。

例如张维连^[3]等利用环形永磁场，研究磁场作用下单晶硅的熔体热对流与离心强迫对流，以及受磁场影响的掺杂与杂质的分布均匀性，得出结论，通过调整磁环位置优化磁场强度能提高晶体质量。

任丙彦^[4]等对直径200mm太阳能用直拉单品的生长速率进行了研究。通过采用热屏、复合式导流系统及双加热器改造直拉炉的热系统进行不同热系统下的拉晶试验，结果发现平均拉速可从0.6ram/min提高到0.9ram/rain，提升了50%。

符黎明^[5]等重点研究了直拉硅中氧沉淀在快速热处理(RTP)和常规炉退火过程中的高温消融以及再生长行为。研究发现，RTP是一种快速消融氧沉淀的有效方式，比常规炉退火消融氧沉淀更加显著。

徐岳生^[6]等使用钕铁硼永磁体向熔体空间引入磁场，研究了永磁体所产生的磁场对硅单晶生长的影响，研究发现，采用钕铁硼永磁体向熔硅所在空间中引入Cusp磁场后，当坩埚边缘磁感应强度达到0.15T时，熔硅中杂质输运受到扩散控制，熔硅自由表面观察到明显的表面张力对流，单晶硅的纵向、径向电阻率均匀性得到改善。

此外由于计算机模拟技术的发展，除了利用实验探究外，大量的单晶硅生长研究还借助计算机数值仿真技术来进行辅助分析。

例如D.P. Lukanina^[7]等通过计算机2D模拟，考虑熔体对流和温度梯度，判断预测分析凝固界面的演化。字慧平^[8]等研究了不同磁场对大直径单晶硅生长中的动量与热量传输的影响，并进行数值分析。通过采用紊流模型对大直径硅单晶在垂直磁场及勾行磁场作用时熔体内动量及热量进行数值模拟和利用有限体积法离散控制方程、SMPLLE等算法对压力和速度场进行耦合得出，垂直磁场对动量及热量的分布具有双重效应。垂直磁场强度过大不利于晶体生长。对无磁场、垂直磁场及勾形磁场作用下熔体内的传输特性进行比较后发现，熔体内子午面上的流动强度，紊流强度都随着勾形磁场强度发生变化。

3 FEMAG 软件在国内的应用综述

随着计算机数值模拟技术的发展，数值分析作为研究辅助已经成为了主流。

利用数值模拟技术在材料晶体生长领域可以实现快速的全程工艺分析，追踪晶体的整个生长过程中涉及的多物理场、多时空尺度现象，具有很高的精度和效率。故目前在对单晶硅提拉工艺研究工作中，多借助专业的数值模拟软件来进行，作为理论分析和试验方法的辅助手段，专业的数值模拟软件得到广泛的应用。

FEMAG 软件是一款经典的专业的晶体生长软件，由比利时新鲁汶大学教授 François Dupret 于 20 世纪 80 年代中期领导开发。软件拥有深厚的数值算法理论基础^[9]，

能充分考虑单晶硅生长过程中对流、辐射、磁场等问题。算法稳健、求解精度高、计算效率高，其全面的分析能力和较高运算精度奠定了其在研究领域的主导地位，获得了国内外很多研究学者的青睐和肯定。

FEMAG 软件在国内拥有很多的应用实例，包括北京有色金属研究总院有研半导体材料股份有限公司在内的多家企业和高校，将 FEMAG 软件投入到晶体生长研究和实际生产应用中。目前 FEMAG 在国内主要应用到以下几个大方面：工艺参数优化，热场及设备优化，多物理场耦合缺陷预测。

3.1 工艺参数优化

工艺参数对于晶体生长至关重要，利用 FEMAG 结合缺陷分析，对晶体生长工艺参数进行优化是目前国内 FEMAG 软件最广泛的应用之一。

刘大力等^[10]利用 FEMAG/CZ 软件模拟了不同拉晶速率下硅晶体的生长结果。结合 Ci-Cv 分布图，分析了环状分布的颗粒缺陷是由于晶体中间隙原子富集区产生的微缺陷，在外延过程中（1050℃）聚集长大，从而在界面处造成晶格畸变引起的。随着衬底拉速的降低，间隙原子富集区的面积增大，硅片外延后越容易出现环状分布的颗粒缺陷。因此他们认为，在单晶硅生长过程中，为避免环状缺陷的产生，应适当提高晶体的拉速。

常麟等^[11]数值模拟了晶体生长速度对直径为 300mm 直拉单晶硅的生长过程，分析了单晶硅中微缺陷的类型和分布随不同晶体生长速度的变化规律。随着晶体生长速度的不断增大，单晶硅中以空位为主的微缺陷区域逐渐增大，而间隙原子为主的微缺陷区域逐渐减小；同时，间隙型微缺陷的浓度呈现不断减小的趋势，空位型微缺陷的浓度呈现不断增大的趋势。晶体生长速度的不断增大，单晶硅体中间隙型微缺陷的浓度与空位型微缺陷的浓度近似相等的区域先增大后减小。因此通过调整晶体生长速度，可以显著改变缺陷的类型和分布。

3.2 热场及设备优化

在国内，企业的实际生产过程中更关注热能耗以及设备的使用情况，FEMAG 作为专业的模拟软件，用来解决企业项目和实际问题也是其主要应用之一。

滕冉等^[12]利用 FEMAG/CZ 软件模拟计算了在 700 mm 热场中生长 300mm 直拉单晶硅的过程中，热屏底端位置对热场中温度分布的影响。模拟中考虑了熔体和气流流动对单晶硅生长过程的影响，通过对生长界面上 V/G 比值、热应力进行分析，认为，在该热场中尽量低的坩埚位置与离晶体适当近的热屏底端位置有利于生长高质量晶体。

西安理工大学王庆^[13]在设计 TDR-120 型单晶炉自动控制系统过程中，利用 FEMAG/CZ 软件对 TDR-120 型单晶炉热场进行了模拟分析，确定了熔晶电流、电压、坩埚的位置等化料工艺参数，使熔晶过程可以顺利进行。并通过软件模拟，得到了长晶各个阶段炉内热场分布。在热场分析的基础上确定了合理的温度、速度曲线，为晶体生长控制奠定了工艺基础。此外在文献^[14]的研究工作中，王庆基于 FEMAG/CZ 软件模拟分析了直拉单晶炉热场，提出使用温度梯度分析热场，通过仿真可以合理设计热场，从而满足生长单晶棒的要求。

上海大学邓先亮等^[15]利用 FEMAG/CZ 软件分析了 TDR-95A-ZJS 型 22 英寸直拉单晶硅热场结构中影响能耗的主要因素。基于模拟结果提出了通过改变部分热场结构及保温毡布局等优化措施可有效降低原有热场功耗。实际生产实验表明,优化后的热场在保证晶体生长原有质量前提下较原有热场节能 29%。

3.3 多物理场耦合缺陷预测

晶体生长过程是个多物理场耦合的过程,为了实现准确分析和预测,借助专业的晶体生长软件 FEMAG 进行分析具有很大的优势。

常麟等^[16,17]考虑了磁场强度、热传导、热辐射和气体/熔体对流等物理现象,利用 FEMAG/CZ 软件数值研究了 300mm 直拉单晶硅生长过程中的微缺陷浓度与分布,同时研究了 CUSP 磁场通电线圈距离和半径、晶体生长速度与热屏位置对单晶硅中微缺陷的影响,并通过热场改进降低了其对单晶硅质量的影响。

综合以上 FEMAG 软件在国内的应用情况,可以得出结论,FEMAG 软件作为专业的晶体生长数值模拟软件,其专业,高精度,高效率的特点得到了大量的实验研究案例进行验证。FEMAG 软件具备全面的分析模块,能满足包括工艺参数优化,热场及设备优化,多物理场耦合缺陷预测等在内的晶体生长研究和实际生产模拟需要,已经在国内获得了广泛的应用。

结束语

单晶硅作为重要的半导体芯片材料,具有广阔的市场应用前景。利用专业化的晶体生长数值模拟软件 FEMAG 可显著提高单晶硅材料的研发效率、降低产品开发周期,同时可为提高单晶硅的质量、有效控制其生长中可能产生的缺陷提供切实可行的解决方案。

参考文献

- [1] 张厥宗.硅单晶抛光片的加工技术.北京:化学工业出版社,2006.55- 63
- [2] 王从赞,郭瑾,吴福立.GB/T12962-1996硅单晶切割片和研磨片.洛阳:洛阳硅单晶厂,中国有色金属工业总公司标准计量研究所.1997
- [3] 张维连,孙军生,利用装置环形磁场的直拉炉(PMCZ)生长单晶硅和掺锗硅晶体[J],半导体学报,2001.22(3)
- [4] 任丙彦,羊建坤,李彦林.Φ200mm太阳能用直拉单晶生长速率研究[J].半导体技术,2007.32(2),106-120.
- [5] 符黎明,杨德仁,马向阳,直拉单晶硅中氧沉淀的高温消融和再生长[J].半导体学报,2007.28(1): 52-55.
- [6] 徐岳生,刘彩池,王海云,磁场直拉硅单晶生长[J].材料科学,2005.34(5): 481-492.
- [7] D, P, Lukanin, V, v, Kalaev. Advances in the simulation of heat transfer and prediction of the melt-crystal interface shape in silicon CZ growth[J]. Journal of Crystal Growth, 2004, (266): 20-27
- [8] 宁慧,隋允康,安国平.不同磁场对大直径单晶硅生长中的动量与热量输运影响的数值分析[J].人工晶体学报,2008, 37(5): 1073-1078.
- [9] F. Dupret, P. Nicodeme, Y. Ryckmans et al. Global modeling of heat transfer in crystal growth furnaces[J]. Int.

J. Heat Mass Transfer.1990, 9: 1849-1871.

- [10] 刘大力,冯泉林,周旗刚,等.300 mm Si 外延片表面颗粒缺陷的研究[J].稀有金属,2002,36(3):446-449.
- [11] 常麟,崔彬,周旗钢,等.晶体生长速度对硅单晶微缺陷影响的数值模拟[J].半导体技术,2012,37(3).
- [12] 滕冉,戴小林,徐文婷,等.热屏底端位置对生长 300 mm 硅单晶热场影响的数值模拟[C].第十七届全国半导体集成电路、硅材料学术会议,2011.
- [13] 王庆.单晶炉自动控制系统的设计[D].西安理工大学硕士论文,2008.
- [14] 王庆,张婷曼.基于 FEMAG/CZ 热场仿真软件的单晶炉热场分析[J].计算机光盘软件与应用,2011,17:65-66.
- [15] 邓先亮,吴亮,邓康,等.基于数值模拟的太阳能直拉硅单晶热场降耗研究[J].稀有金属材料与工程(已收录).
- [16] 常麟.300mm 直拉硅单晶生长过程中微缺陷的数值分析[D].北京有色金属研究总院硕士论文,2011.
- [17] 常麟,周旗钢,戴小林,等.CUSP 磁场对直拉硅单晶氧浓度分布影响的数值模拟[J].稀有金属,2011,6: 909-915.