

FEMAG 区熔法超纯单晶硅数值模拟方案

目录

1. 背景介绍	1
1.1 单晶硅	1
1.2 单晶硅的区熔法制备	1
2. 问题及需求	2
2.1 区熔法制备超纯单晶硅的现状	2
2.2 区熔法制备超纯单晶硅的模拟需求	3
3. FEMAG 解决方案	4
3.1 FEMAG/FZ 的技术案例	4
4. 关于 FEMAG	10
5. 关于中仿科技（CnTech）公司	10

1. 背景介绍

1.1 单晶硅

硅的单晶体，是一种良好的半导体材料。在工业上单晶硅多用于半导体产业，主要用于制造半导体芯片、太阳能电池等。

单晶硅有巨大的市场和广阔的发展空间。其原料来源丰富，硅元素在地壳中含量达高达 25.8%，可谓取之不尽。以单晶硅为代表的高科技附加值材料，如今已经成为当代全球经济发展中增长最快的先导产业——信息技术产业的支柱。且随着当前常规能源供给的有限性和环保压力的不断增加，太阳能等新能源正在掀起新一轮能量改革热潮，国际上许多国家已经开始制定可持续发展战略，将太阳能的发展当做重要的战略目标。一个大规模的半导体信息时代以及太阳能等新能源时代正在拉开序幕，单晶硅产品因此也将成为 21 世纪最受关注的产品之一。

1.2 单晶硅的区熔法制备

在半导体行业，单晶硅主要用于半导体制造芯片和电子器件，为了保证其工作的稳定性可靠性，工业上通常要求单晶硅的纯度达到 99.9999%，甚至 99.9999999% 以上。

普通的单晶硅晶体生长方法或多或少都会引入少量杂质，但是区熔法是一种比较特殊的高纯度单晶生长技术。由于其本身也是一种提纯的方法，因此用区熔法来制备超纯单晶硅非常适合。

区熔法晶体生长技术工业上被称为悬浮区熔法，简称区熔法（FZ），这种技术是指在气氛或真空的炉室中，利用高频线圈在单晶籽晶和其上方悬挂的多晶硅棒的接触处产生熔区，然后使熔区向上移动进行单晶生长。由于硅熔体完全依靠其表面张力和高频电磁力的支托，悬浮于多晶棒与单晶之间，因此不需要坩埚等其他载体，这是区熔法最显著的特征之一。

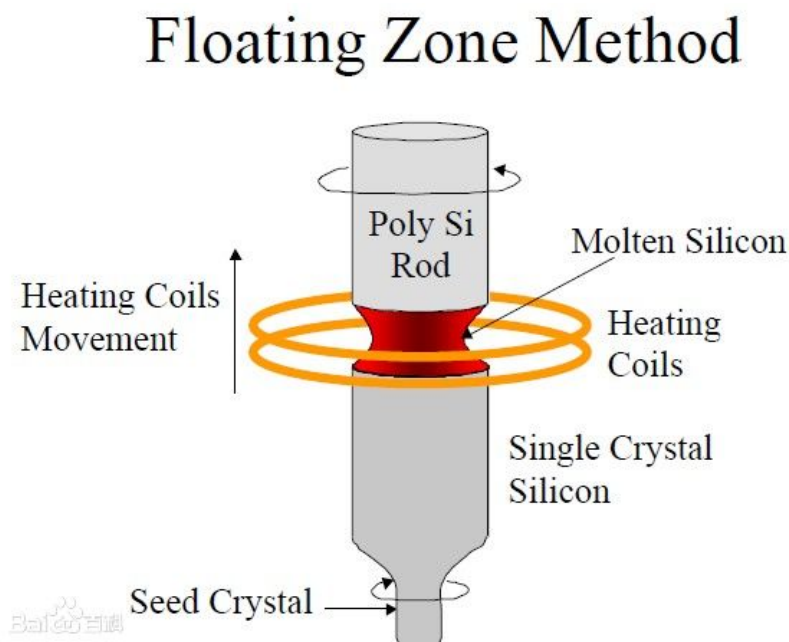


图 1.1 区熔法示意图

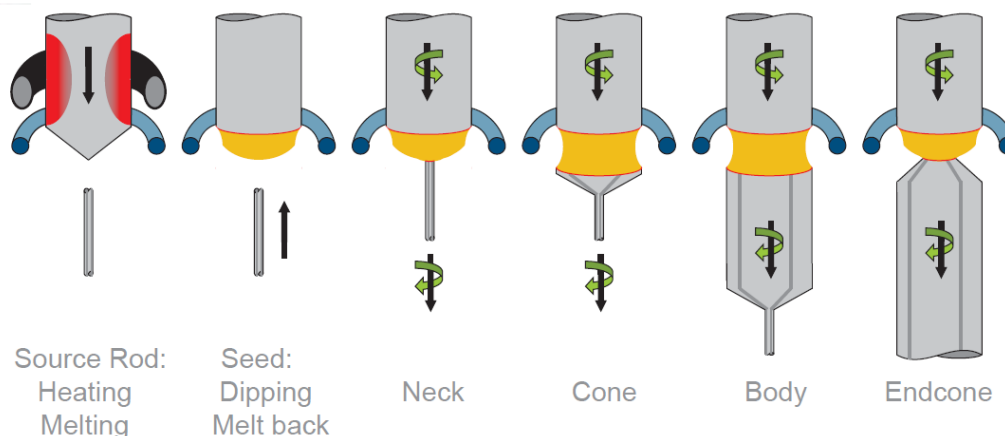


图 1.2 区熔法的工艺流程示意图

由于使用区熔法制备晶体时不使用坩埚，避免了来自坩埚的污染，因此区熔法可以用来制备纯度很高的晶体。

另外区熔法还有提纯作用，其提纯原理是分凝原理。杂质在熔体和已结晶的固体中的溶解度是不一样的。在结晶温度下，若一杂质在某材料熔体中的浓度为 c_L ，结晶出来的固体中的浓度为 c_s ，则称 $K=c_L/c_s$ 为该杂质在此材料中的分凝系数。 K 的大小决定熔体中杂质被分凝到固体中去的效果。 $K<1$ 时，则开始结晶的头部样品纯度高，杂质被集中到尾部； $K>1$ 时，则开始结晶的头部样品集中了杂质而尾部杂质少。因此经过一次区熔后会出现杂质富集效果，只需要把杂质富集区截掉，就能够获得纯度很高的晶体。

2. 问题及需求

2.1 区熔法制备超纯单晶硅的现状

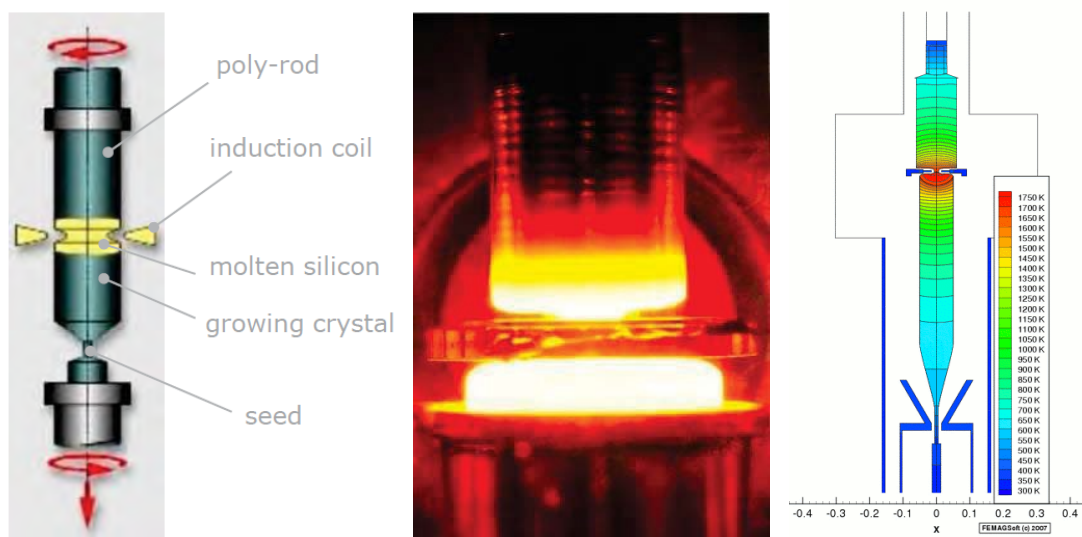
区熔法制备的单晶硅纯度很高，实际生产中区熔法单晶的氧含量比直拉硅单晶的氧含量低 2 到 3 个数量级。因此很多高质量的电子器件，高集成电路，例如光敏二极管、射线探测器、红外探测器等器件的关键部位多采用区熔法制备的单晶硅来制造。

但是区熔法也有自身的局限性，首先工艺比较烦琐，生产效率偏低，而且一般使用纯度较高的多晶硅为原料，生产成本较高，此外由于工艺特殊性，较难生产出大直径的单晶硅棒。因此生产商很希望提高区熔法的成品率，降低原料消耗和成本。

在产品质量方面，由于区熔法熔体中存在着受重力而引起的自然对流，受表面张力驱动而产生的对流，还有旋转引起的强迫对流等多种对流作用，使得熔体与晶体界面复杂，因此很难得到无层错的晶体。同时区熔法工艺涉及到传质传热和流动耦合的复杂物理过程，因此要对产品质量进行精确分析和预测都有一定难度。



2.2 区熔法制备超纯单晶硅的模拟需求



如前所述，在区熔法单晶硅生长过程中，熔体中存在着受重力作用而引起的自然对流，受熔体自由表面张力的驱动而产生的对流，另外还有旋转引起的强迫对流等多种对流作用，熔体的流动模式十分复杂。

生长的单晶硅质量受到很多传质、传热及对流因素的影响。例如生长材料的热扩散率、溶质扩散率、表面张力、熔点以及热传输系数等物理性质以及实际的工艺参数如单晶半径、拉晶速度等因素都能影响晶体质量。为了获得高质量的单晶硅，同时也为了优化工艺设备，多数企业还有机构都希望借助先进的计算机技术手段来辅助工艺分析。

随着高速计算机的迅速发展，数值模拟方法为解决这一类复杂物理场的实际问题提供了一种重要手段。利用数值模拟技术对超纯单晶硅区熔法技术所涉及的复杂物理场进行分析和研究，可以快速有效的解决工艺问题，提高生产质量并优化工艺路线。计算机数值模拟的方法已经成为目前国内外广泛使用的分析手段。

3. FEMAG 解决方案

FEMAG/FZ 是 FEMAG 公司针对晶体生长区熔法 (FZ) 而开发的专用软件, 这是目前世界上最专业的用于模拟分析区熔法晶体生长工艺过程的软件。FEMAG/FZ 可以帮助您全面分析单晶硅区熔法生产过程中的热场、应力场、流场、缺陷、加热器功率等问题, 并具有辅助工艺优化设计的功能。能够为您或您的企业提供可靠的工艺仿真数据和工艺优化方案。

3.1 FEMAG/FZ 的技术案例

3.1.1 网格划分

FEMAG/FZ 能够实现快速的全局非结构网格生成, 并且可以根据熔体结构以及边界情况对网格进行自动优化或者进行人工优化。

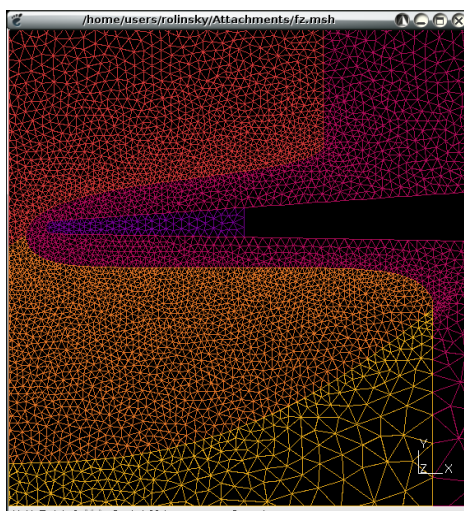


图 3.1 热传导和加热器的全局非结构网格

3.1.2 全局温度场分析

FEMAG/FZ 可以全面的分析生长炉全局的温度场, 为炉体热场优化提供重要依据。

图 3.2 案例是用 FEMAG/FZ 软件准稳态模拟的方法对直径 100mm 单晶硅生长炉全局温度场进行的模拟, 拉晶速率为 1mm/min。

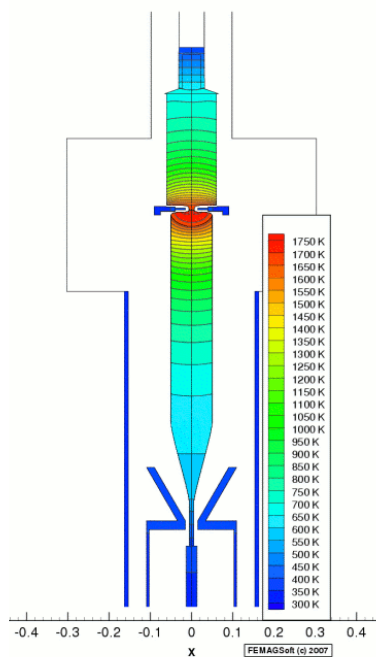


图 3.2 全局温度场分布

图 3.3 案例是用 FEMAG/FZ 对半径 51mm 单晶硅的生长进行模拟，其中籽晶旋转速率 10RPM，多晶硅料旋转速率-15RPM，拉晶速率 3.4mm/min。

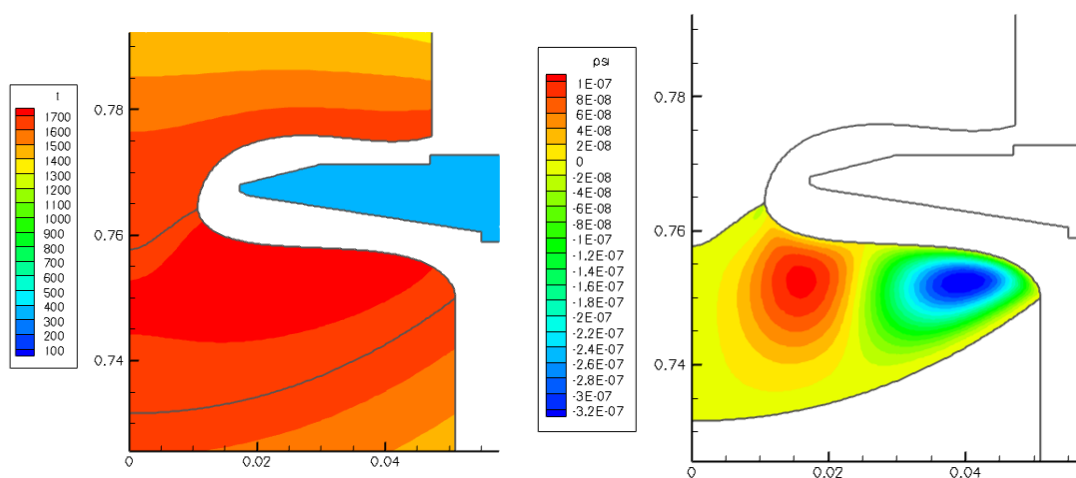


图 3.3 温度场与流场分布

热挡板作为炉体温度场设计的重要部件，对单晶生长质量也起着非常大的作用，图 3.4 案例是用 FEMAG/FZ 对热挡板和对应温度场做的模拟，可以清楚的显示是否设置热挡板，对温度场的影响很大。

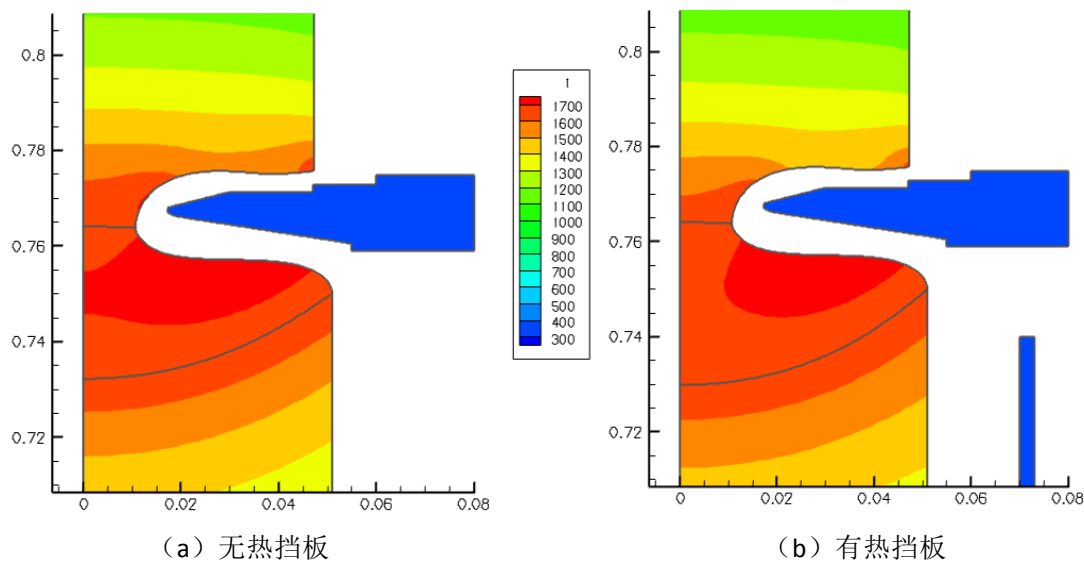


图 3.4 热挡板对温度场的影响

3.1.3 熔体流动场模拟

区熔法中熔体的流动比较特殊，用 FEMAG/FZ 进行熔体流场分析可以获得很精确的分析结果。图 3.5 是用 FEMAG/FZ 软件准稳态模拟的方法对单晶硅生长时的流场进行模拟，其中晶体直径为 100mm，拉晶速率为 1mm/min。

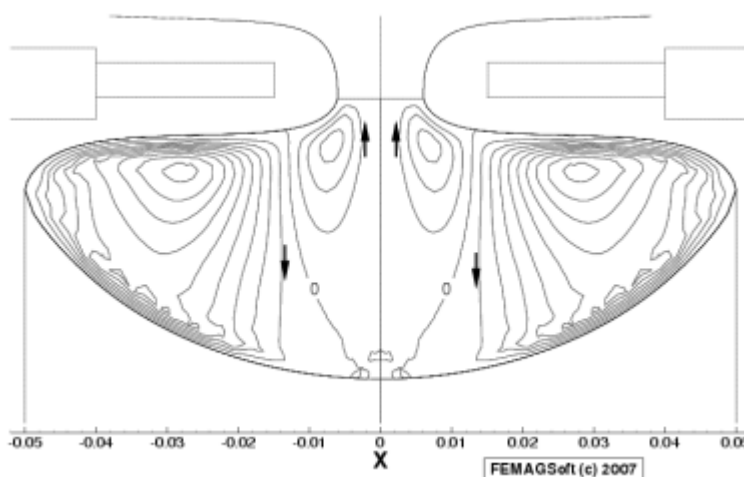


图 3.5 熔体流场示意图

图 3.6 案例是针对晶体旋转和熔体流动关系的模拟，案例中的晶体半径为 51mm，多晶柱的旋转速率为 15RPM，设置了三组不同的籽晶旋转速率，分别为 (a) 5RPM (b) 10RPM (c) 15RPM，Marangoni 系数为 $1 \times 10^{-4} \text{N/mK}$ 。

对比不同的模拟结果可以看到，FEMAG/FZ 能够很好的实现熔体流动场的分析，三组图中的上半部分是模拟的熔体流函数，下半部分是对应的实验测定的结晶形貌，可以看出实验测定与熔体流动模拟的结果相一致。

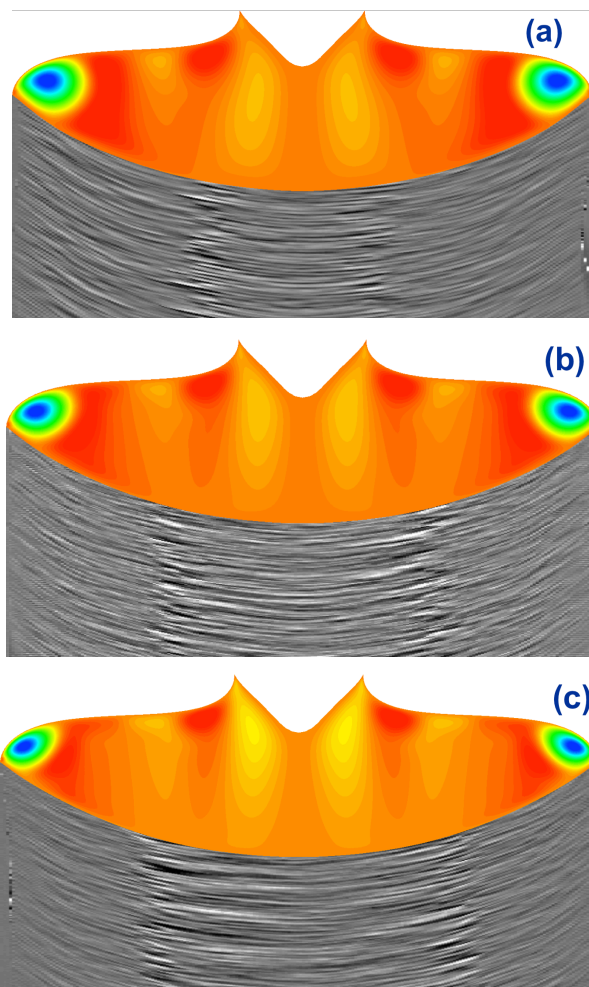


图 3.6 晶体旋转和熔体流动的分析以及与实验的对比

3.1.4 交变感应磁场

在线圈中通入高功率射频电流进行电磁加热是区熔法用来熔化晶体的手段之一，射流感生的磁场不仅是为了在多晶硅料中引起涡流产生焦耳热并熔化晶体，同时高频电磁力也起着支撑熔区悬浮熔体的作用。FEMAG/FZ 能够全面的模拟电磁感应区的复杂电磁效应，为优化晶体生长提供重要的分析数据和依据。图 3.7 是准稳态模拟的方法对 100mm 单晶硅生长时交变磁场的模拟示意图，拉晶速率为 1mm/min。

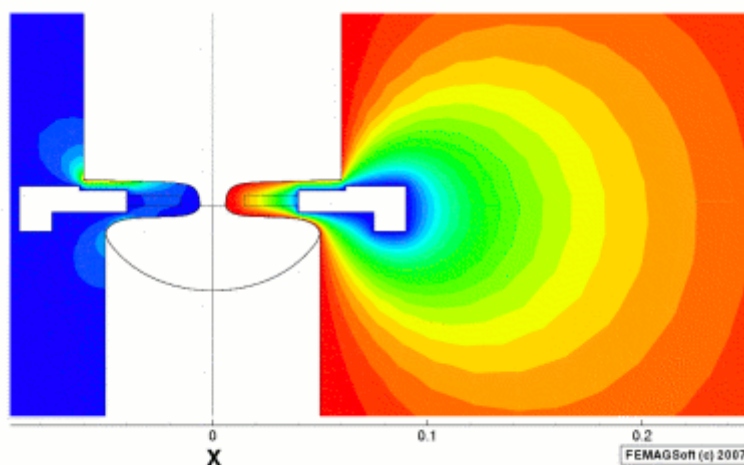


图 3.7 交变磁场示意图

下面案例是用 FEMAG/FZ 准稳态模拟方法对生长 200mm 单晶硅的电磁感应区进行分析，图 3.8 显示了磁通函数等值线以及加热区温度场分布情况。

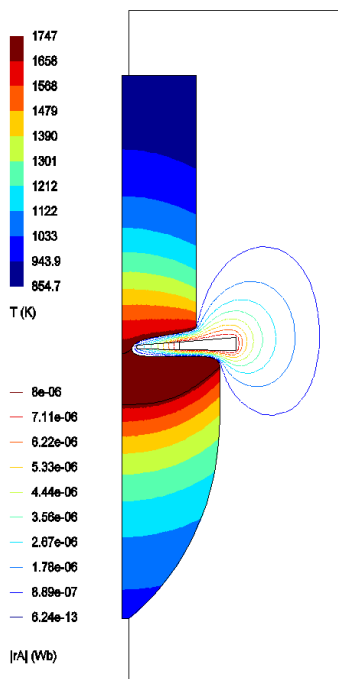


图 3.8 生长 200mm 单晶硅的温度场和磁通函数等值线

图 3.9 分别是不考虑（上图）以及考虑（下图）等效磁切应力情况下，对熔区熔体中温度场分布以及流函数分布的模拟结果。

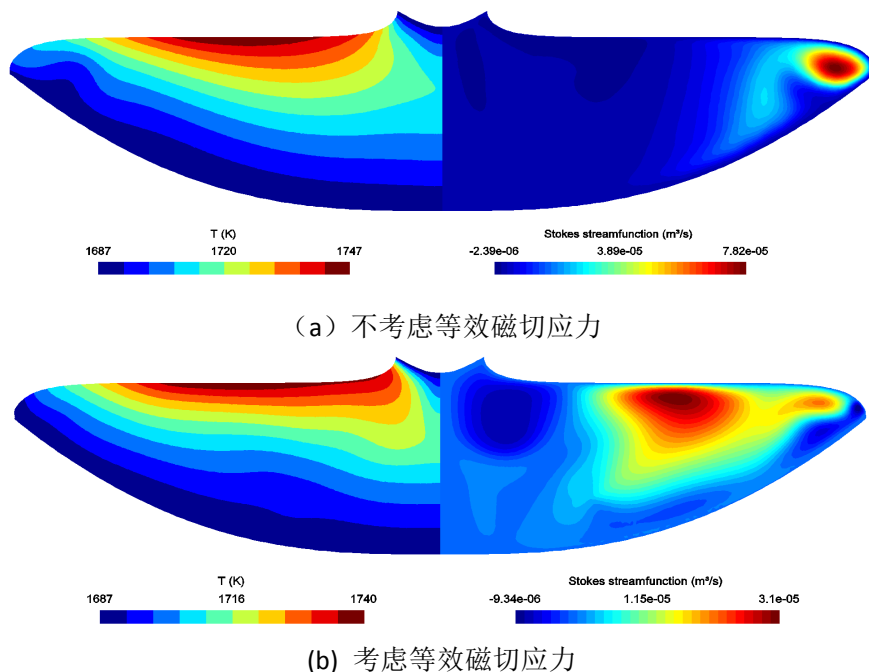


图 3.9 熔体中的温度场和流场分布

3.1.5 应力分析

FEMAG/FZ 可以综合分析晶体中的热应力分布情况，图 3.10 是用 FEMAG/FZ 分析单晶硅生长过程中 Von Mises 等效应力的整体(a)和局部(b)的分布情况，还有 Von Mises 与最大临界分切应力(CRSS)的比率分布 (C)。

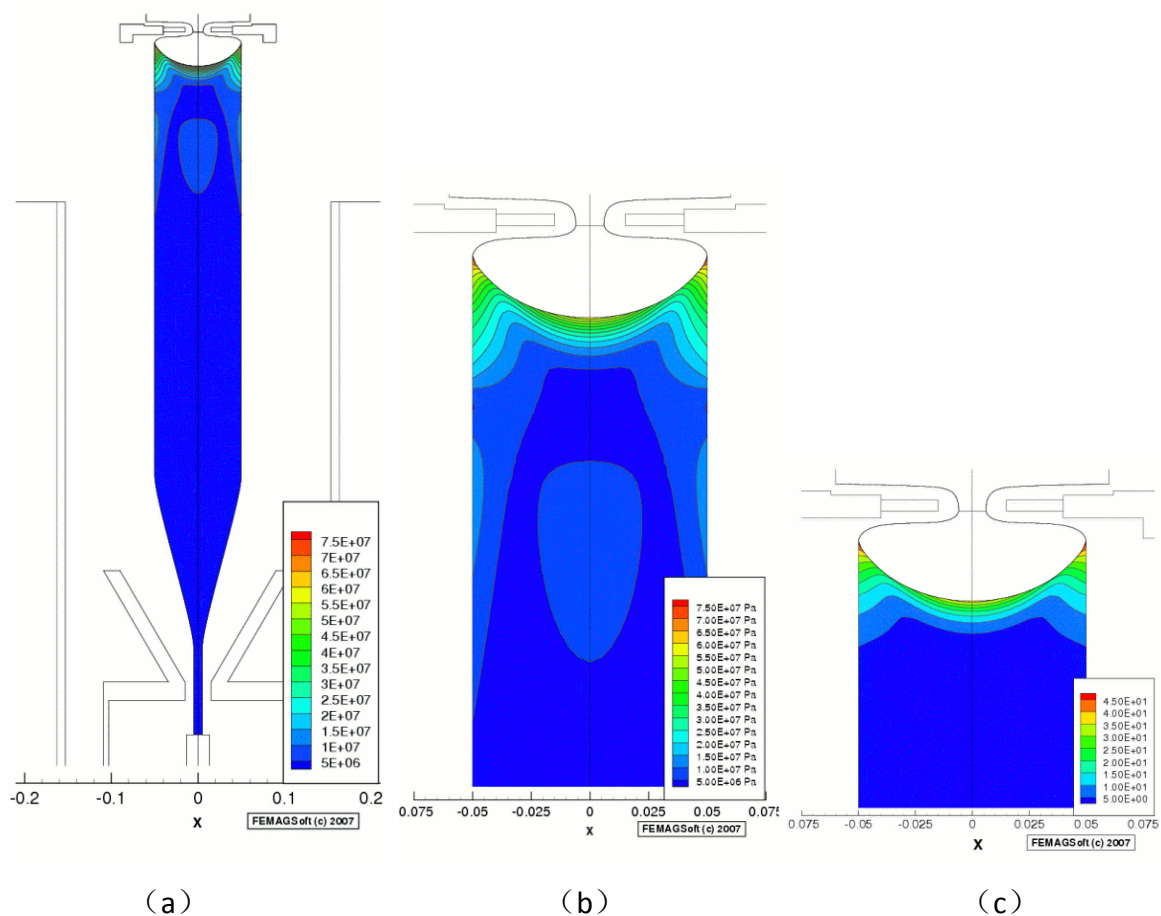


图 3.10 应力分布模拟

图 3.11 是用 FEMAG/FZ 对不同的晶体生长方向上，各向异性的应力分布分析结果。

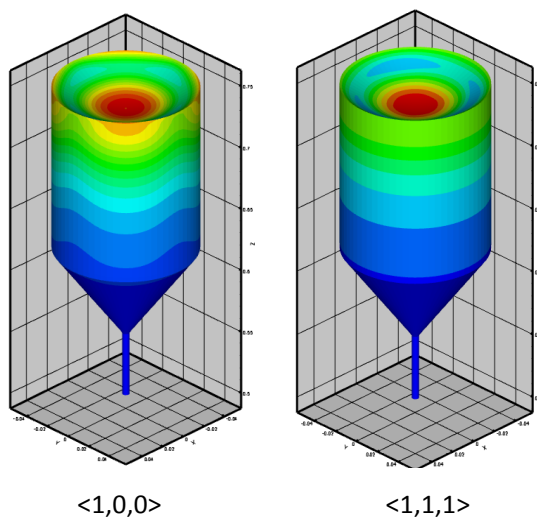


图 3.11 不同生长方向上应力分布情况不同

3.1.6 缺陷分析

用 FEMAG/FZ 对晶体生长的缺陷进行预测，可以为工艺的优化提供重要参考依据。图 3.12 案例是生长 100mm 单晶硅时，用 FEMAG/FZ 准稳态模拟预测的缺陷浓度（Ci-Cv）分布情况，拉晶速率为 1mm/min。

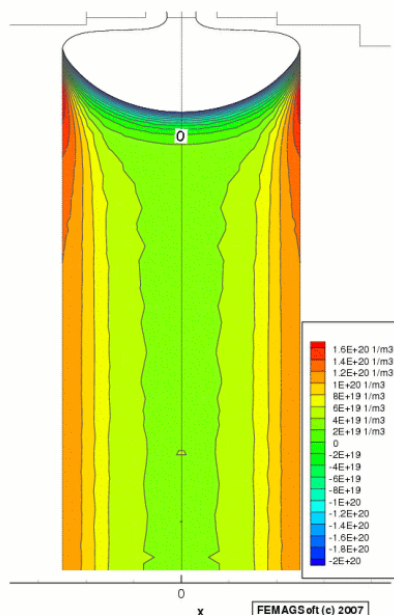


图 3.12 FEMAG/FZ 对单晶硅缺陷浓度 (C_i-C_v) 的预测

4. 关于 FEMAG

FEMAG 是全球首款商业的晶体生长模拟仿真软件。从二十世纪八十年代开始，FEMAG 公司就着力为全球用户开发最专业的晶体生长数值计算仿真工具，经过三十多年的不断发展，已经为全球绝大多数晶体设备供应商、半导体材料科研机构等提供设计、优化其晶体生长工艺过程的帮助。

FEMAG 公司总部位于比利时，FEMAG 公司创始人和首席科学家、新鲁汶大学教授 Dr. François Dupret 是国际著名晶体生长和流体力学专家、第二届晶体生长模型国际研讨会主席、EUROTHERM 相变热力学研讨会联合主席、机械工程学位委员会主席，曾担任国际晶体生长 (Journal of Crystal Growth) 期刊主编。作为国际上晶体生长数学模型构建和数值仿真计算的领导者 and 奠基人，其开创性的产品 FEMAG 在国际上广受欢迎，用户遍及全球。

5. 关于中仿科技 (CnTech) 公司

近年来，中国已经成为全球最大的光伏制造基地和半导体材料消费市场，同时，处于全球竞争体系中的本土半导体设备企业面临着国际半导体设备公司的垄断，国内的晶体设备厂商要破除国际垄断的坚冰，就需要做到更灵敏的反应、灵活的研发和加倍的努力。

中仿科技 (CnTech) 与比利时 FEMAG 公司深度强强合作，本着“根植中国，服务全球”的理念，共同在中国设立中仿 FEMAG 研发中心，将国际一流的数值算法及数字仿真技术引入中国，研发更适合中国市场并完全拥有中国自主知识产权的产品，服务中国并辐射全球用户。中仿 FEMAG 研发中心以具有前瞻性技术的产品、强大的协同创新能力、优质的技术支持，让本土高端装备、材料科学、半导体、集成电路、LED、晶体设备厂商和科研用户更富有竞争力。

中仿科技 (CnTech) 成立于 2003 年，是中国领先的仿真分析软件和系统解决方案的提供者。中仿科技依靠自主创新研发拥有自主知识产权的中仿 CAE 系列产品，同时与国际上领先的数值仿真技术公司拥有长期而紧密的合作关系，具备较强的自主研发能力和创新能力，能够为中国企业和科研机构提供世界一流的仿真技术解决方案。

了解更多详细信息，可访问公司网站：<http://www.CnTech.com.cn>。

公司邮箱：info@cntech.com.cn，全国统一客服热线：400 888 5100。

中仿科技（上海）公司

地址：上海市漕河泾开发区松江科技园莘砖公路 258 号 32 幢 10 楼 D 座（201612）

电话：+86 21-37696588 传真：+86 21-37696588-823

中仿科技（北京）公司

地址：北京市海淀区上地十街 1 号院辉煌国际 2 号楼 13 层 1307 室（100085）

电话：+86-10-59713407 传真：+86-10-59713207

中仿科技（武汉）公司

地址：湖北省武汉市武昌区武珞路 442 号中南国际城 A2 座 2405 室（430071）

电话：+86-27-68782895 传真：+86-27-68782895

