

FEMAG 直拉法单晶硅生长数值模拟方案

目录

1.	背景介绍	1
1.1	单晶硅	1
1.2	单晶硅的直拉法制备	1
2.	问题及需求	2
2.1	直拉法制备单晶硅的现状	2
2.2	直拉法制备单晶硅数值模拟的需求	2
3.	FEMAG 解决方案	3
3.1	FEMAG/CZ 的技术案例	4
4.	关于 FEMAG	9
5.	关于中仿科技（CnTech）公司	9

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 单晶硅的直拉法制备

由于半导体结构具有特殊性，芯片的工作也要求具有稳定性，因此工业上对单晶硅的结构要求是非常高的，例如通常要求其纯度要达到 99.9999%，甚至 99.9999999% 以上，而且只有很少的缺陷才能满足芯片的需求。目前工业上生产单晶硅通常采用的是直拉法（Cz 法），它是制造单晶硅的一种重要方法，当今 90% 以上的单晶硅都是用直拉法生产的。图 1 就是直拉法制备单晶硅的整个工艺过程示意图。

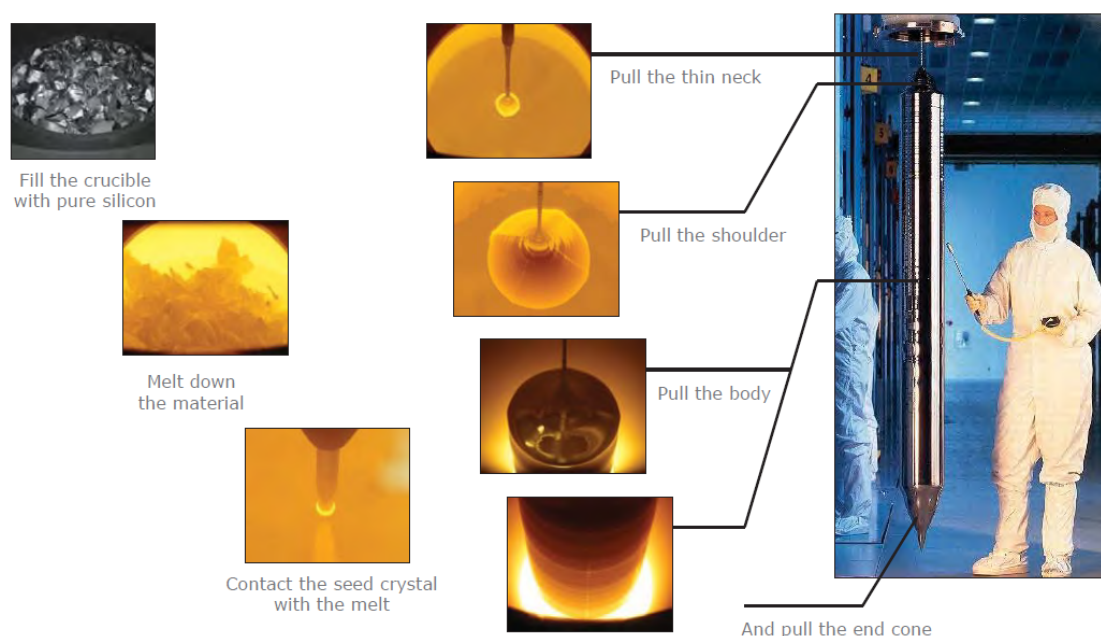


图 1.直拉法生产单晶硅工艺示意图

直拉法制备晶体硅主要有以下优点：

- (1) 生长的晶体结构稳定，位错密度低，光学均一性高。
- (2) 使用优质定向籽晶和“缩颈”技术，可减少晶体缺陷，获得所需取向的晶体；
- (3) 工艺简单，利于自动化控制和批量生产。

2. 问题及需求

2.1 直拉法制备单晶硅的现状



直拉法是一种非常適合工业生产的晶体生长方法，直拉法晶体生长过程既有物质的传输，也有热量的传输，是一个复杂的物理过程。在直拉法中，控制热量的传输是生长晶体成败的关键，建立合适的温度场是生长优质晶体的一个重要条件。较大的温度梯度(轴向分量)有利于克服组分过冷；较小的温度梯度有利于防止开裂、减小应力和降低位错密度；平(或微凸)界面生长晶体、有助于提高晶体的均匀性。此外熔体内的流动与温度场也密切相关，流动状态的变化还会影响溶质以及杂质的分布，影响晶体的性能。

因此目前工业上用直拉法制备单晶硅，可能会遇到如下的问题：

- (1) 单晶硅生长对生长炉内温度场设置要求很高，但是实际生产中温度场复杂且不容易实现精确测量和控制；
- (2) 生长炉内包含熔体和气体复杂的对流与传热作用，这会导致晶体的生长过程难以预测，并且对流会影响缺陷分布，影响晶体的质量；
- (3) 相对来说单晶硅的直拉法生产周期较长，能耗较大且成品率低，因此通常都希望在实际生产时能够得到最优化的生产方案并且实现产品质量的预测。

2.2 直拉法制备单晶硅数值模拟的需求

在直拉法生长单晶硅的系统中有着很复杂的物理过程。例如熔体的流动对生长系统内的传热传质起着十分重要的作用。

影响流动的主要因素是热对流、晶体旋转和坩埚旋转。而热对流的驱动力又有很多，包括坩埚中由于温度场的非均匀性，导致密度差而引起的熔体热对流，表面张力差引起的热毛细流(Marangoni流动)等。此外晶体和坩埚的反方向转动也能引起熔体的强制对流，晶体旋转能引起晶体下方的熔体旋转，并将熔体提至离自由面一定的高度而形成半月胞，这样晶转就直接影响掺杂剂的引入和晶体横截面的均匀性，但晶体旋转对整个流体运动影响较小；而坩埚旋转却带动整个熔体，特别是对大单晶炉而言更是如此，会形成较大的离心力，从而强化熔体的流动。在实际的晶体生长过程中，热对流、强制对流、表面张力共同作用在熔体上，使熔体的流动变得很复杂。

此外，为了抑制对流作用的影响，有时候还需要外加横向磁场，形成了复杂的热场、流场、磁场耦合的物理问题。

随着高速计算机的迅速发展,数值模拟方法已经发展成为解决实际问题或辅助实际生产的一种重要手段。以上所有这些问题,都可以通过数值模拟的方法来解决。此外在实际生产中,单晶硅的生产成本很高,包括热功率,原料,耗时等,而且成品率低,对于这样的工艺特点,通常都希望用数值模拟的方法来进行辅助优化,可以很大程度地减少人物力,缩短生产周期,降低生产成本,也为单晶硅生产和质量分析提供依据。图 2 指出了工程上直拉法工艺对应的仿真需求。

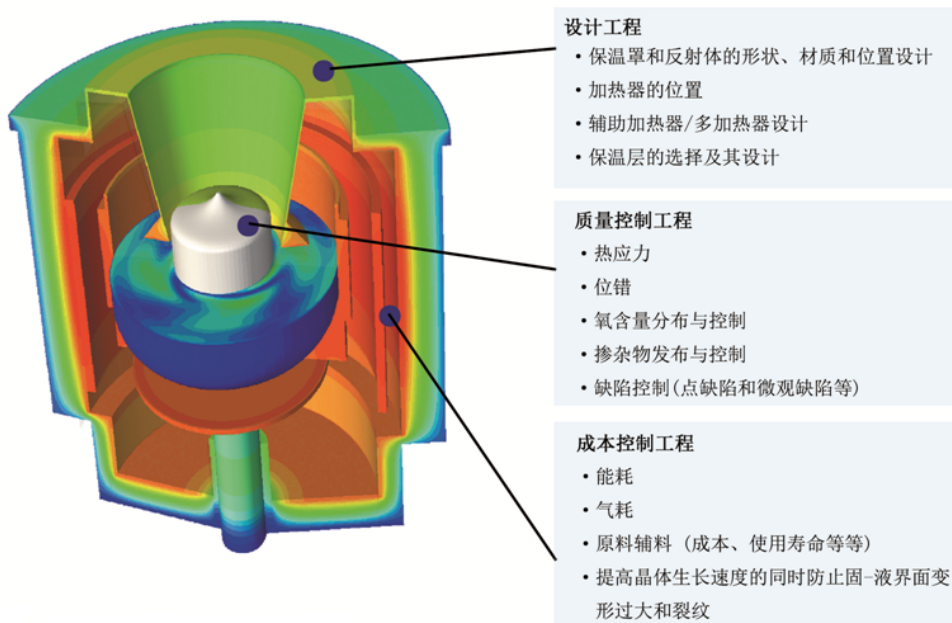
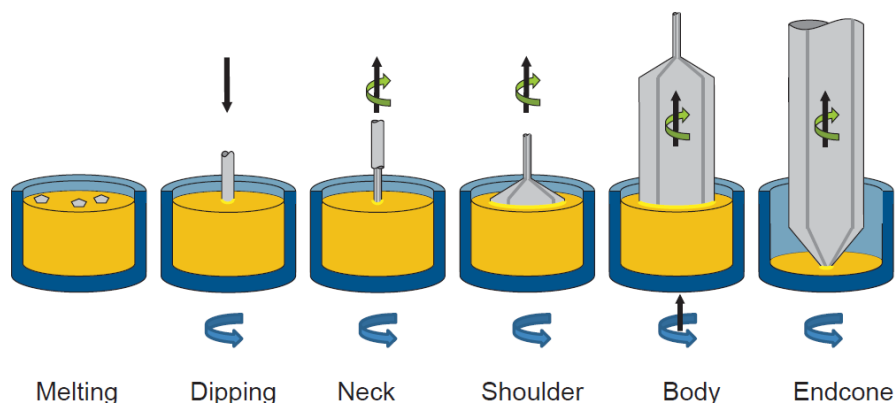
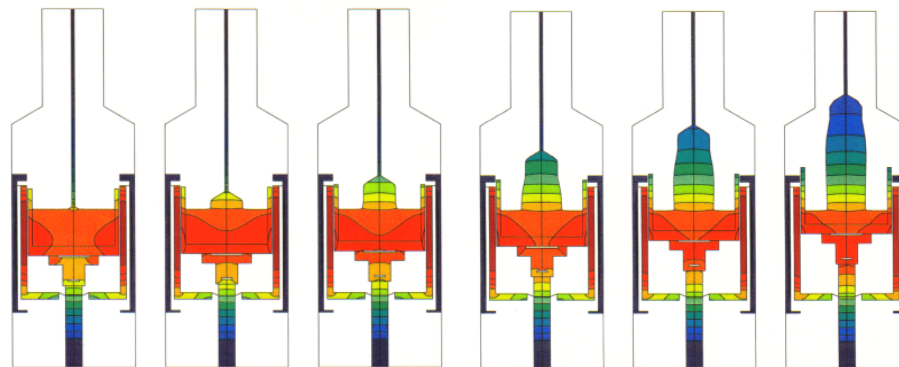


图 2.直拉法工艺与对应的仿真需求

3. FEMAG 解决方案

FEMAG/Cz 是 FEMAG 针对晶体生长直拉法(Cz)而开发的专用软件,该软件致力于为直拉法晶体生长技术和工艺提供专业的仿真模拟与数据分析,可以模拟包括热场,流场,磁场在内的多物理场耦合过程,能够最大程度地为您或您的企业提供可靠的仿真数据和优化方案。





3.1 FEMAG/CZ 的技术案例

3.1.1 FEMAG/CZ 的网格划分

FEMAG/CZ 支持对晶体生长炉全局的非结构网格自动生成，此外还针对了磁场作用下磁流体边界层效应，FEMAG 特别提供了 BLM 网格划分等多种先进的网格划分策略，能够很好的适应特定的复杂的结构和物理情景。

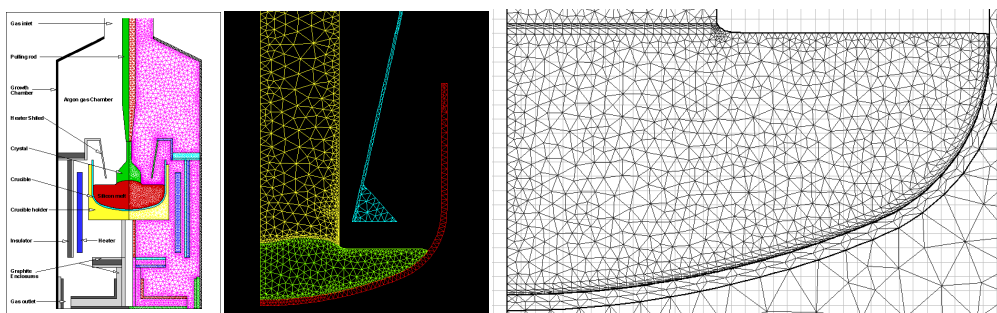


图 3.1 (a) 整个炉体的非结构网格；(b) 关键区域非结构网格；(c) BLM 边界网格沿着熔体边缘分布

3.1.2 传质、传热、流动以及掺杂物浓度等缺陷的综合分析

FEMAG/CZ 具备完整的针对直拉法制备单晶硅的分析能力，包括对流、传热、传质、缺陷及应力分析等。以下是直拉法生长直径 200mm 单晶硅的分析案例，工艺环境：坩埚半径 0.2m，晶体半径 0.1m，晶体旋转速率-16rpm，坩埚旋转速率 8rpm，提拉速率 1mm/min。

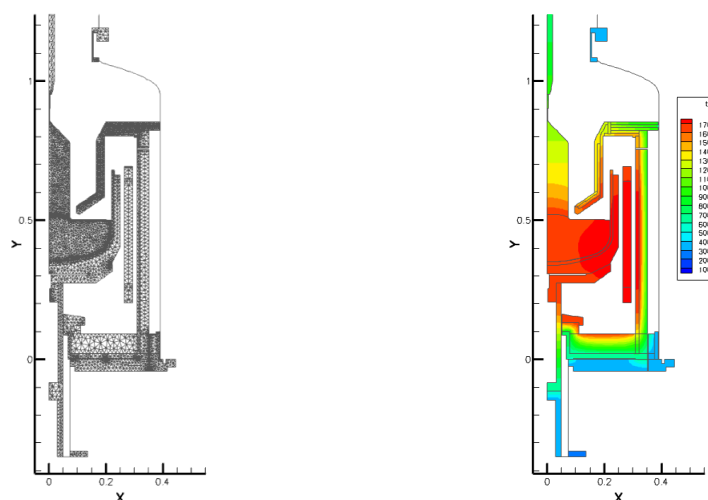


图 3.2 网格划分和全局温度场设计

在考虑马兰格尼对流（Marangoni convection）和熔体反射边界条件情况下，对熔体及晶体的温度场，流场，杂质分布等情况进行模拟。下图（a）（b）（c）（d）分别为熔体晶体温度场，熔体的流场以及氧浓度分布和硼浓度分布的模拟结果。

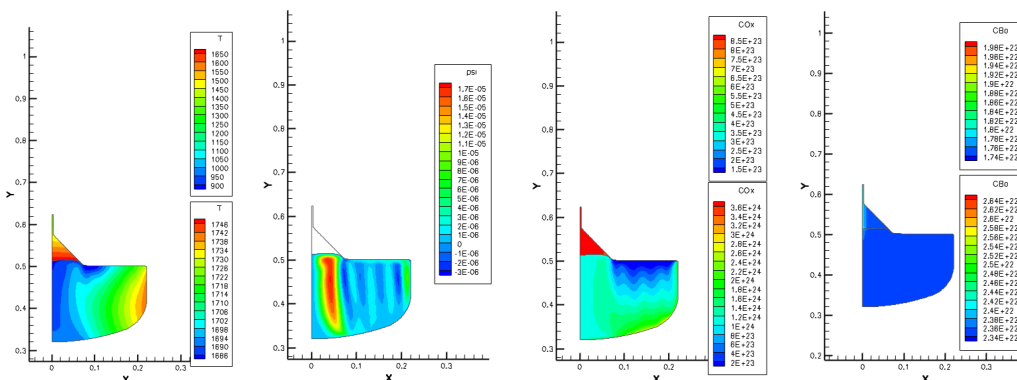


图 3.3 (a) 温度场 (b) 流场 (c) 氧浓度 (d) 硼浓度

此外 FEMAG/CZ 先进的算法能够实现晶体生长结束阶段熔体末端的温度场和流场的模拟，下图案例是对直径 300mm 单晶硅生长结束阶段熔体末端的模拟，图中（a）是温度场，（b）是流场。

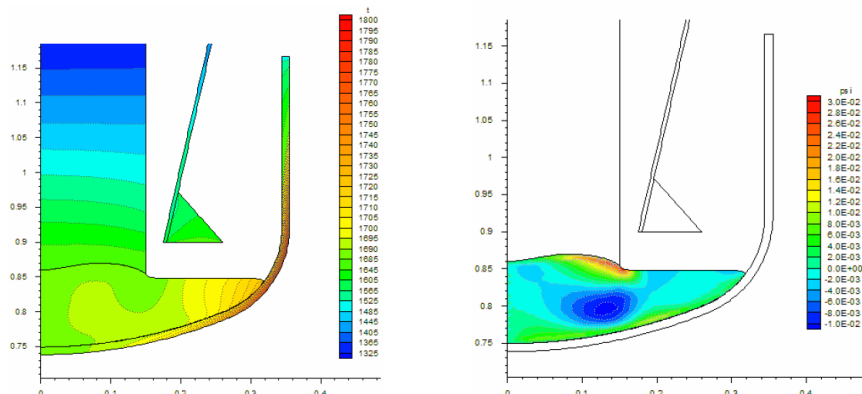


图 3.3 熔体末端温度场 (a) 和流场 (b)

3.1.3 熔体气体对流分析

FEMAG/Cz 还能实现全局的熔体气体对流综合分析，如图案例是在不同气体流量下（500，1500，3000，4500L/h）对直拉法单晶硅的全局对流模拟，提拉速率 2mm/min，，外部压力 0.1MPa，晶体旋转速率 20rpm，坩埚旋转速率-5rpm，其中（a）（b）是热场（c）（d）是流场。从案例分析图可以看到在气体流动影响下，全局的热场和流场分布有显著区别。

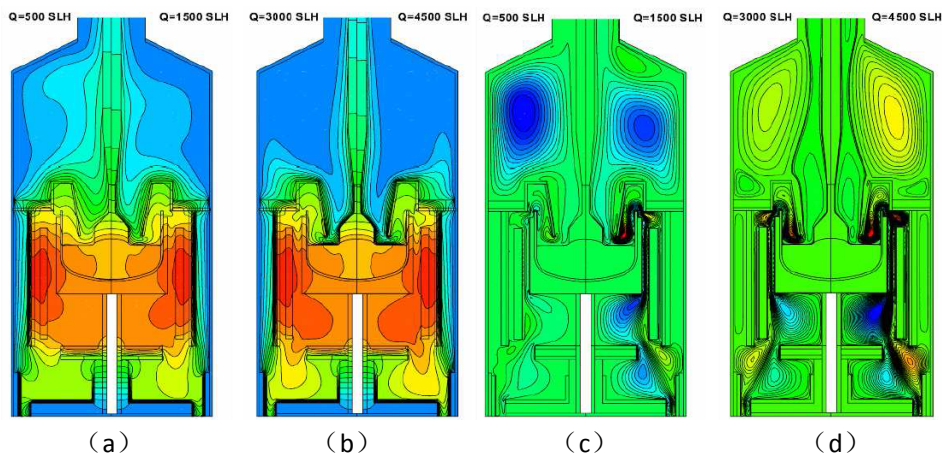


图 3.4 不同气体流量下的熔体气体对流

3.1.3 晶体取向和应力分析

在直拉法生长单晶硅的工艺中，单晶硅的晶体取向由籽晶的晶向决定，可以通过调整籽晶来调整单晶硅的晶体取向，而沿着不同晶向生长，晶体性质也会有所不同。下面案例是用 FEMAG/CZ 对分别沿着 $\langle 1,1,1 \rangle$ 和 $\langle 1,0,0 \rangle$ 两种生长方向生长的单晶硅进行准稳态模拟，可以看到 von Mises 等效应力的分布差异。

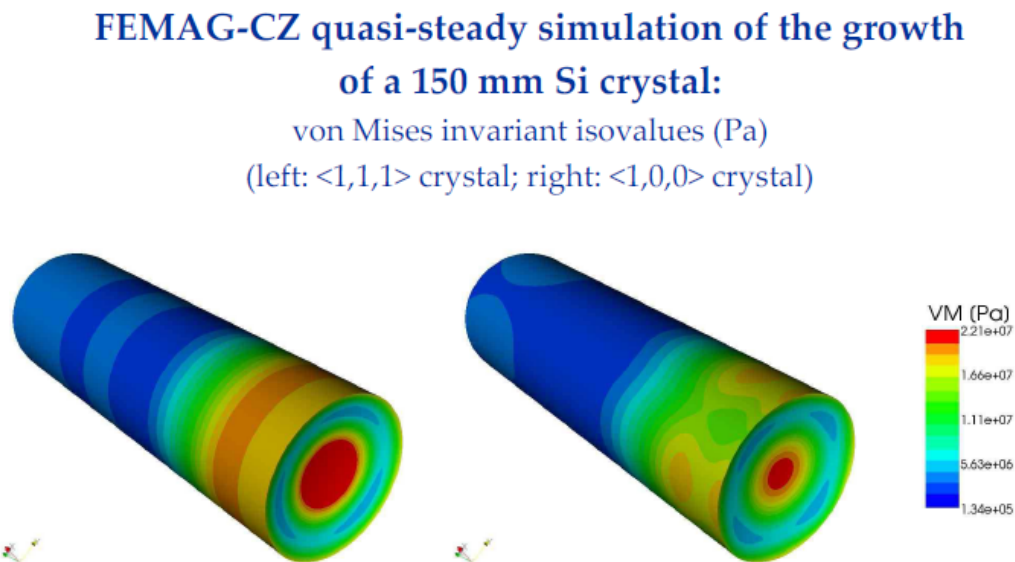


图 3.5 不同方向生长的晶体应力分布

3.1.4 准稳态与动态模拟及对缺陷的分析

FEMAG/Cz 支持准稳态和动态模拟，可以根据实际需要进行相关的设置，下图展示了用 FEMAG/CZ 稳态和动态模拟来分析晶体缺陷的几组相关案例。

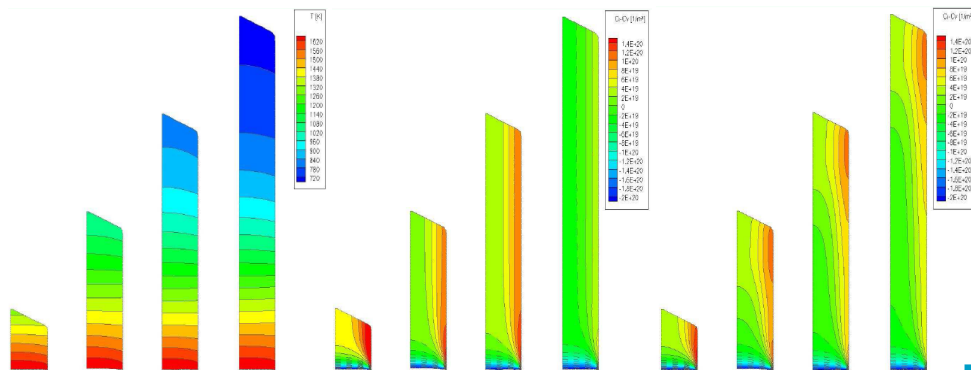


图 3.6 准稳态和动态的分析 (a) 温度场 (b) Ci-Cv 缺陷 (c) Ci-Cv 缺陷

(a) 图是动态模拟下各个生长阶段的温度场；(b) 图是准稳态模拟下各个阶段的缺陷 (Ci-Cv) 浓度预测；(c) 图是动态模拟下各个阶段的缺陷 (Ci-Cv) 浓度预测。

另外动态模拟也可以用于分析熔体中氧和硼的分布，

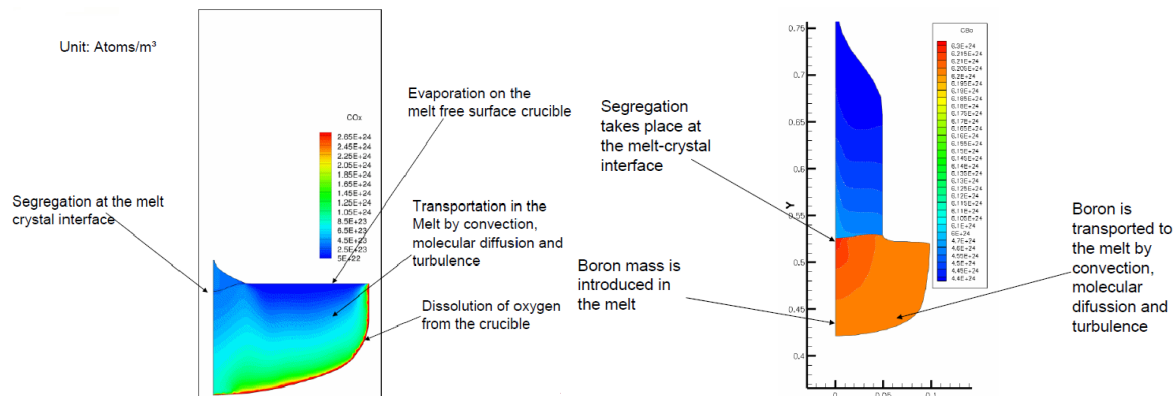


图 3.7 (a) 熔体和晶体中的氧分布 (b) 硼分布

3.1.5 连续进料直拉法

FEMAG/CZ 还特别加入了对连续进料直拉法工艺模拟的支持。下图是用连续进料直拉法生长直径 200mm 单晶硅的模拟案例，图中 (a) (b) 分别显示了生长炉内温度场和熔体的流场。

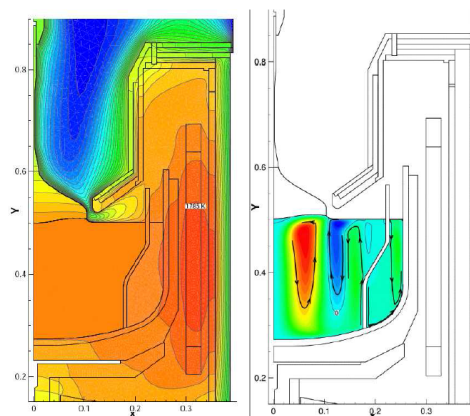


图 3.8 连续进料直拉法的模拟，(a) 温度场 (b) 流场

3.1.6 外加磁场的流动效应

在磁场作用下，整个生长炉内是一个热场，流场，磁场三场耦合的复杂物理过程，模拟过程也比较常规情况要困难。FEMAG 可以很好的实现外加磁场作用下对耦合物理场的模拟。图 3.9 给出了在外加 0.5 T 横向磁场作用下，生长直径 300mm 单晶硅的案例，可以清楚地显示俯视面的速度和流线(上图)以及对应的横断面和速度场(下图)，还可以看出沿坩埚界面熔体流动有明显的 Hartmann 层。

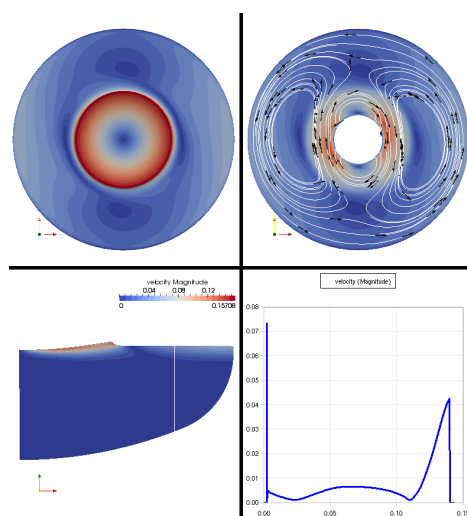


图 3.9 外加磁场作用下的熔体速度场和流线

下图是俯视面和纵截面上，速度场对应区域温度场的分布情况。

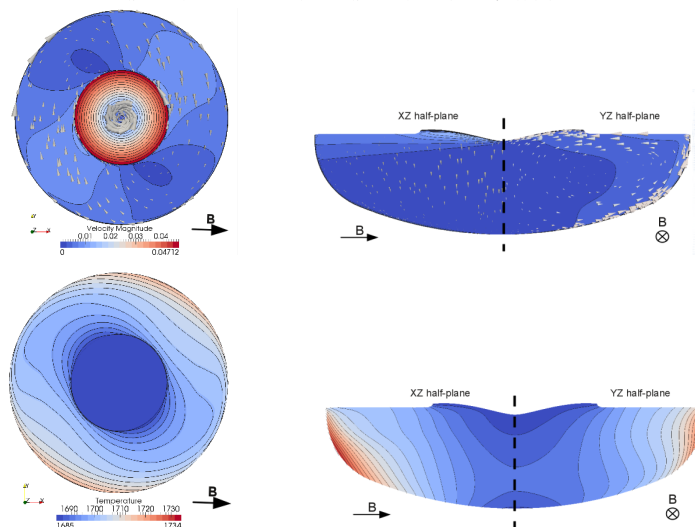
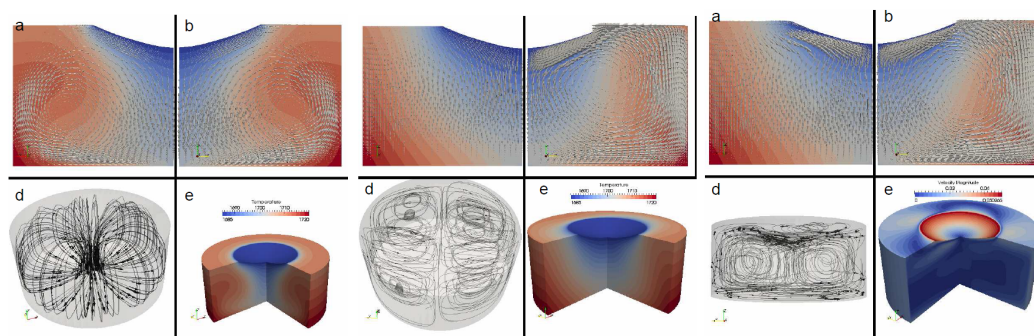


图 3.10 外加磁场作用下速度场与温度场

采用 3D 模拟可以直观的看到外加磁场与坩埚以及晶体旋转对熔体对流的影响。图 3.11 给出相应案例的模拟结果，(a) 图为坩埚和晶体不旋转，无外加磁场作用下熔体的速度场和流线，(b) 坩埚和晶体不旋转，外加 0.3T 水平磁场时的速度场和流线，(c) 坩埚和晶体旋转速率分别是-5rpm 和 30rpm，外加 0.3T 水平磁场时的速度场和流线。



(a) 无旋转无磁场

(b) 无旋转有磁场

(c) 有旋转有磁场

图 3.11 在外加磁场作用下，晶体与坩埚旋转对熔体对流的影响

3.1.7 外加磁场的缺陷预测

FEMAG/CZ 可以对外加磁场作用下的缺陷以及杂质分布进行分析，图 3.12 是生长直径 0.032m 的单晶硅准稳态模拟案例，模拟提拉速率为 0.3mm/min，无晶体旋转和坩埚旋转，受外加横向磁场强度作用，磁场强度 0.3T，可以看到氧浓度分布情况如图所示。

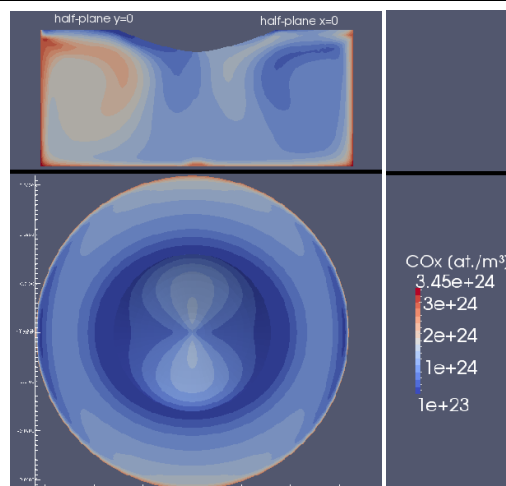


图 3.12 外加磁场作用下晶体中杂质和缺陷的预测

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和奠基人，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

