

硅生长过程中尖形磁场对流场及 提拉速率的影响

陈启生¹⁾ 秦 明 邓谷雨

(中国科学院力学研究所, 北京 100190)

摘要 通过使用基于非正交网格有限体积法的 FLUTRAPP (fluid flow and transport phenomena program) 程序模拟了工业 8 in 单晶硅提拉法生长过程. 数值模拟结果表明, 流场及提拉速率在单晶硅生长过程中具有振荡特性, 提拉速率的振荡周期大约为 2 min. 尖形磁场的引入能够抑制坩埚中熔体流动的振荡, 减小提拉速率的振幅, 从而有利于提高所生长单晶的质量.

关键词 提拉法, 单晶硅, 流动振荡, 提拉速率

中图分类号: O782, TK124 文献标识码: A 文章编号: 1000-0879(2009)04-024-04

EFFECT OF THE CUSP MAGNETIC FIELD ON FLOW FIELD AND PULLING RATE DURING SI SINGLE CRYSTAL GROWTH PROCESSES

CHEN Qisheng¹⁾ QIN Ming DENG Guyu

(Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

Abstract The growth process of industrial 8 inch single crystals is simulated by FLUTRAP (fluid flow and transport phenomena program), which is based on non-orthogonal grid and finite-volume method. The results show that the flow field inside the crucible and the pulling rate are oscillating during the growth processes. The pulling rate is fluctuating with a period of about 2 minutes. The fluctuation amplitude of the pulling rate could be reduced by applying a cusp magnetic field.

Key words Czochralski method, silicon single crystal, flow oscillation, pulling rate

引 言

提拉法 (Czochralski method) 是单晶硅生长的最主要方法. 通过很多研究人员的努力, 单晶硅的尺寸和质量得到不断的提高^[1]. 目前工业上已经能够大规模制备直径达 200~300 mm 的单晶硅. 对于如此大直径的单晶硅生长来说, 坩埚中熔体流动的瞬时效应、三维效应以及湍流现象非常明显, 这些效应影响着单晶硅生长过程中热量传递、物质输运以及所生长晶体的质量^[1]. 单晶硅生长过程的物理建模和数值模拟已经被人们广泛应用于理解各种影响晶体质量的物理、化学因素.

为了有效控制生长区内的熔体流动、氧浓度以及掺杂组分浓度分布等, 人们在生长过程中引入磁

场. 常见的磁场类型有轴向磁场^[2]、水平磁场^[3]、尖形磁场^[4,5]和电磁场^[6]. 本文中考虑的是尖形磁场. 所谓的尖形磁场, 就是在生长界面上下方对称放置一组通以相反方向电流的导电线圈, 它们将形成一个轴对称的如尖劈状的磁场, 故称之为尖形磁场 (图 1). 尖形磁场能够抑制浮力对流, 提高晶体的径向掺杂均匀性和降低晶体的氧组分浓度^[7~11].

根据 Voronkov 理论, 提拉速率和生长界面处的温度梯度决定了所生长的晶体缺陷的类型^[1]. 因此从保证晶体质量角度来说, 提拉速率是一个很重要的因素. 本文采用 PID 控制坩埚的参考点温度. Gevelber 等^[12]介绍了大尺寸晶体生长控制的方法, 并通过单晶硅生长实验测量了生长过程中提拉速率随时

2008-04-11 收到第 1 稿, 2008-07-11 收到修改稿.

1) E-mail: qschen@imech.ac.cn

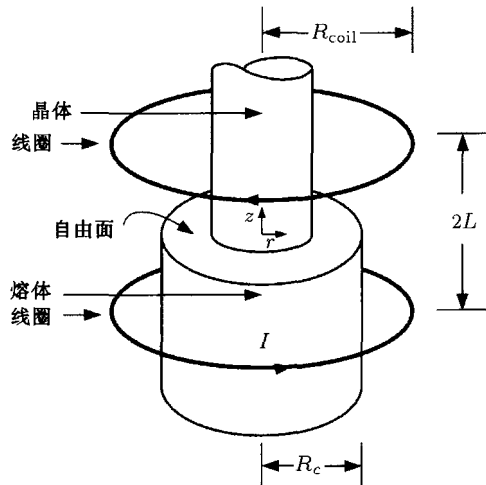


图 1 尖形磁场结构示意图

间变化曲线. 根据他们的实验发现, 在生长过程中, 提拉速率是随时间振荡的, 振幅大致在 $\pm 17\%$, 振荡的平均周期约为 1.5 min.

本文中, 我们考虑了工业 8in 单晶硅生长的多相体系, 使用有限体积法^[13,14]模拟了流动及提拉速率, 并采用离散交换因子法计算了生长室内的辐射传热^[15]. 最后讨论了尖形磁场对流场及提拉速率的影响.

1 物理及数学模型

考虑如图 2 所示的提拉法单晶硅生长的物理模型, 我们假设坩埚中的熔体为 Newton 流体, 体系为二维轴对称结构. 生长过程为准定常. 对于浮力的处理, 假定熔体满足 Boussinesq 近似条件, 即在考虑有

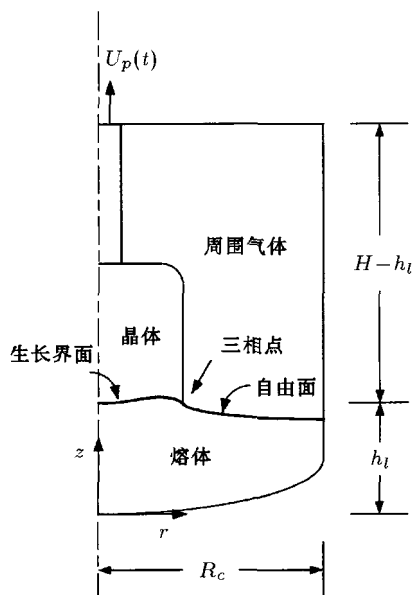


图 2 单晶硅提拉法生长示意图

重力影响时, 熔体的密度与温度存在着线性变化关系. 尖形磁场是轴对称和定常的. 计算电流时假定熔体和晶体是导体, 生长室内的气体为绝缘体^[9].

根据以上基本假设, 我们采用如下基本方程组

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + (\rho \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g} + \mathbf{F} \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c_p T) + (\rho c_p \mathbf{u} \cdot \nabla) T = k \nabla^2 T + q_{\text{radi}} \quad (3)$$

其中, \mathbf{u} 为熔体的速度矢量, p 为压力, ρ 为密度, μ 为动力学黏性系数, \mathbf{g} 为重力加速度, \mathbf{F} 为尖形磁场产生的洛仑兹力, c_p 为比热, T 为温度, k 为热扩散系数, q_{radi} 为辐射传热源项. 辐射传热采用离散交换因子方法计算得到^[15].

磁感应强度矢量的计算采用了与 Hick 等^[8]相同的方法. 在得到坩埚区内磁感应强度分布之后, 我们利用如下方程计算熔体中的电流密度^[9]

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) = \frac{\partial (v B_z)}{\partial z} + \frac{\partial (v B_r)}{\partial r} \quad (4)$$

其中 v 为周向速度分量, B_r 和 B_z 分别为磁感应强度在径向和轴向的分量. 电流密度矢量定义为

$$J_r = \frac{\sigma_c}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z}, \quad J_z = -\frac{\sigma_c}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \quad (5)$$

而电流密度矢量在周向的分量可通过广义欧姆定律得到

$$J_\theta = \sigma_c (v B_r - u B_z) \quad (6)$$

在计算得到磁感应强度 \mathbf{B} 和电流密度矢量 \mathbf{J} 之后, 我们可以得到 Lorentz 力 \mathbf{F} . 本文中引入无量纲参数 $Ha = B_0 b \sqrt{\xi/\mu}$ 表征 Lorentz 力与黏性力之比, 其中 B_0 为磁感应强度, b 为坩埚半径, ξ 为熔体电导率.

假定三相点的径向坐标为其纵向坐标和时间的函数, $r = R(z, t)$. 自由面的形状方程为 $z = H(r, t)$, H_0 为三相点的纵向坐标 (图 3). 因此, 得到以下三相点的运动方程^[16]

$$\frac{\partial R(z, t)}{\partial t} + \left(U_p(t) - \frac{\partial H_0}{\partial t} \right) \frac{\partial R(z, t)}{\partial z} = 0 \quad (7)$$

其中 $U_p(t)$ 为提拉速率. 由上式, 我们得到如下边界条件

$$\left. \frac{\partial R(z, t)}{\partial t} \right|_{z=H_0(R, t)} = \left(U_p(t) - \frac{\partial H_0}{\partial t} \right) \tan(\phi_J - \phi_0) \quad (8)$$

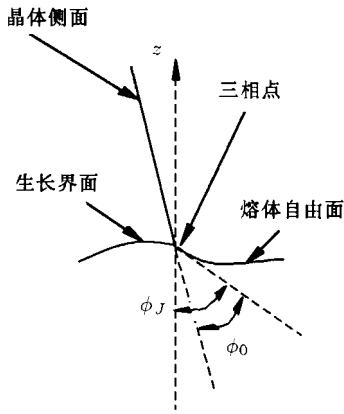


图3 三相点示意图, ϕ_0 为接触角, ϕ_J 为熔体自由面与垂直方向的夹角

其中, ϕ_J 为熔体自由面与垂直方向的夹角, ϕ_0 为晶体接触角. 利用方程 (8) 可以得到三相点的坐标, 从而确定晶体的形状 [16].

晶体 / 熔体生长界面的形状和位置由通过该界面的热流量以及晶体的提拉速度和生长速度决定 [17]. 由生长界面的能量平衡, 得到

$$\rho_s h_{sl} (\mathbf{U}_p(t) \cdot \mathbf{n} - U_{int,n}) = -k_s \frac{\partial T_s}{\partial n} + k_l \frac{\partial T_l}{\partial n} \quad (9)$$

其中下标 s 表示晶体, h_{sl} 为晶体熔化潜热, $U_{int,n}$ 为界面生长速度沿法向的分量 (向上为正), \mathbf{n} 为界面法向 (从液体指向晶体).

自由面具有以下运动学边界方程

$$w = \frac{\partial H(r,t)}{\partial t} + u \frac{\partial H(r,t)}{\partial r} \quad (10)$$

自由面的形状和位置由自由面处的表面张力、气体压力以及熔体内部应力确定

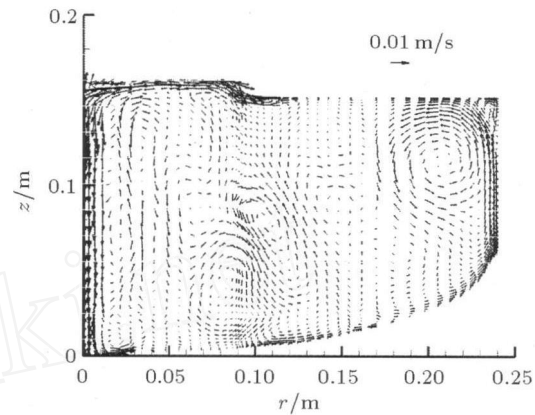
$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{n} = -p_\infty \mathbf{n} - \sigma \chi \mathbf{n} + \frac{\partial \sigma}{\partial a} \mathbf{t} \quad (11)$$

其中 p_∞ 为气体压力, σ 为表面张力, $\sigma = \sigma_0 + \sigma'_T T$, χ 为自由面处的曲率半径 (凸起为正), 应力张量 $\mathbf{S} = -p\delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$, \mathbf{t}, \mathbf{n} 分别为自由面的单位切向和单位法向向量 (从液体指向气体), a 为弧长.

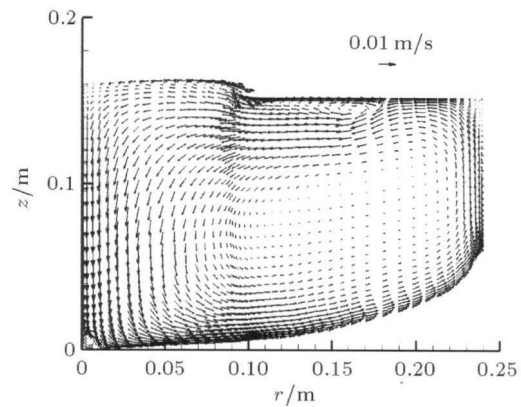
2 数值结果及分析

图 4(a) 显示了 $Ha = 0$ 时坩埚中熔体的流动情况, 对应的输入功率为 73 kW. 从图中可以明显地看出多种流动机制. 流动表现为很多小涡, 显示出明显的振荡特征. 自由面附近由于径向温度梯度的存在, 熔体受热毛细力作用向中心轴方向运动, 与由晶体旋转产生的离心力作用沿着径向排出的流动相

遇. 在晶体 / 熔体界面附近, 形成了一个被称为 Ekman Layer 的边界层. 这个边界层将保护生长界面不受其附近剧烈流动的影响, 从而提高晶体界面附近流动的稳定性 and 温度分布的均匀性, 这对提高晶体质量很重要. 图 4(b) 为 $Ha = 2000$ 时坩埚内熔体的流动情况, 对应的功率 74 kW. 与图 4(a) 流场相比较, 在坩埚中由浮力驱动的逆时针漩涡占主导地位, 振荡减弱.



(a) $Ha = 0$



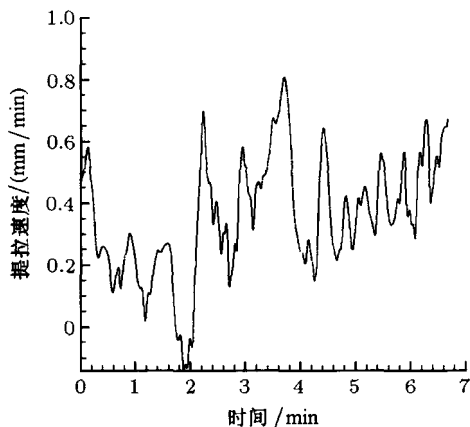
(b) $Ha = 2000$

图4 坩埚中的流场分布图

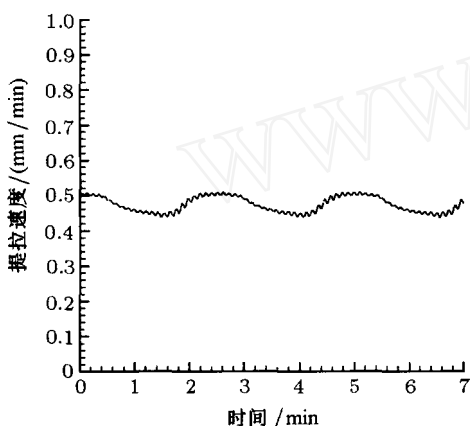
图 5(a) 显示的是使用等径控制时提拉速率随时间变化的曲线, 未加磁场, $Ha = 0$. 这里采用了 PID 控制坩埚的参考点温度, 坩埚参考点温度设定为 1732 K. 在没有外加磁场作用时, 提拉速率表现为明显的振荡, 振幅较大. 根据 Gevelber 等 [12] 实验发现在硅生长过程中, 在等径控制情况下, 硅的提拉速率是随时间振荡的. 通过他们对 10 in 的单晶生长实验研究表明, 提拉速度振荡的振幅大致在 $\pm 17\%$, 振荡的平均周期约为 1.5 min.

图 5(b) 显示的是 $Ha = 2000$ 时提拉速率随时间变化曲线, 与图 5(a) 比较可以看出, 随着磁感应强

度的增加, 提拉速率的振幅减小, 此时坩埚中的流动振荡较小. 提拉速率的振荡表现出明显的周期性, 其周期大约为 2 min.



(a) $Ha = 0$, 输入功率为 72 kW, 坩埚参考点温度为 1732 K



(b) $Ha = 2000$, 输入功率为 74 kW, 坩埚参考点温度为 1732 K

图 5 提拉速率随时间变化曲线

3 总 结

通过使用 FLUTRAPP 模拟了工业 8 in 单晶硅生长过程. 在未加尖形磁场时, 坩埚内熔体的流动是振荡的, 提拉速率的振幅比较大. 当磁感应强度增加到 $Ha = 2000$ 时, 提拉速率的振荡几乎消失. 振荡表现出明显的周期性, 周期约为 2 min. 尖形磁场起到抑制流动振荡和减小提拉速率振幅的作用.

参 考 文 献

- Ammon WV, Dornberger E, Hansson PO. Bulk properties of very large diameter silicon single crystals. *J Crystal Growth*, 1999, 198/199: 390~398
- Hoshikawa K, Kohda H, Hirata H. Homogeneous dopant distribution of silicon crystal growth by vertical magnetic field-applied Czochralski method. *Jpn J Appl Phys*, 1984, 23: L37~39
- Hoshi K, Isawa N, Suzuku T, et al. Czochralski silicon crystals grown in a transverse magnetic field. *J Electrochem Soc*, 1985, 132: 693~700
- Series RW. Effect of a shaped magnetic field on Czochralski silicon growth. *J Crystal Growth*, 1989, 97: 92~98
- Hirata H, Hoshikawa K. Silicon crystal growth in a cusp magnetic field. *J Crystal Growth*, 1989, 96: 747~755
- Watanabe M, Eguchi M, Hibiya T. Silicon crystal growth by the electromagnetic Czochralski (EMCZ) method. *Jpn J Appl Phys*, 1999, 38: L10~13
- Hicks TW, Organ AE, Riley N. Oxygen transport in magnetic Czochralski growth of silicon with a non-uniform magnetic field. *J Crystal Growth*, 1989, 94: 213~228
- Sabhpathy P, Salcudean ME. Numerical study of Czochralski growth of silicon in an axisymmetric magnetic field. *J Crystal Growth*, 1991, 113: 164~180
- Ma M, Ogawa T, Watanabe M, et al. Study on defects in CZ-Si crystals grown under three different cusp magnetic fields by infrared light scattering tomography. *J Crystal Growth*, 1999, 205: 50~58
- Kim JS, Lee TY. Numerical study of the melt-thermal effect on a silicon crystal in Czochralski growth system. *J Crystal Growth*, 2000, 209: 55~67
- Sim BC, Lee IK, Kim KH, et al. Oxygen concentration in the Czochralski-grown crystals with cusp-magnetic field. *J Crystal Growth*, 2005, 275: 455~459
- Gevelber M, Wilson D, Duanmu N. Modelling requirements for development of an advanced Czochralski control system. *J Crystal Growth*, 2001, 230: 217~223
- Zhang H, Prasad V. A multizone adaptive process model for low and high pressure crystal growth. *J Crystal Growth*, 1995, 155: 47~65
- Ferziger JH, Peric M. Computational Methods for Fluid Dynamics. third, rev. edition, 2002, Springer-Verlag.
- Nunes EM, Naraghi MHN. Numerical model for radiative heat transfer analysis in arbitrarily shaped axisymmetric enclosures with gaseous media. *Num Heat Transfer, Part A*, 1998, 33: 495~513
- Derby JJ, Brown RA. Dynamics of Czochralski crystal growth. *J Crystal Growth*, 1987, 83: 137~151
- Zhang H, Prasad V. A multizone adaptive process model for low and high pressure crystal growth. *J Crystal Growth*, 1995, 155: 47~65

(责任编辑: 刘俊丽)