

12英寸电子级直拉单晶硅氧含量的数值模拟研究



唐安辰^{1,2}, 韩学峰^{1,3,*}, 原帅^{1,2}, 马向阳¹, 杨德仁^{1,2,3,*}

1. 浙江大学硅及先进半导体材料全国重点实验室, 杭州, 310027

2. 浙江大学-上虞半导体研究院, 绍兴, 312399

3. 浙江大学杭州国际科创中心, 杭州, 311215

*通讯作者邮箱: xuefenghan@zju.edu.cn

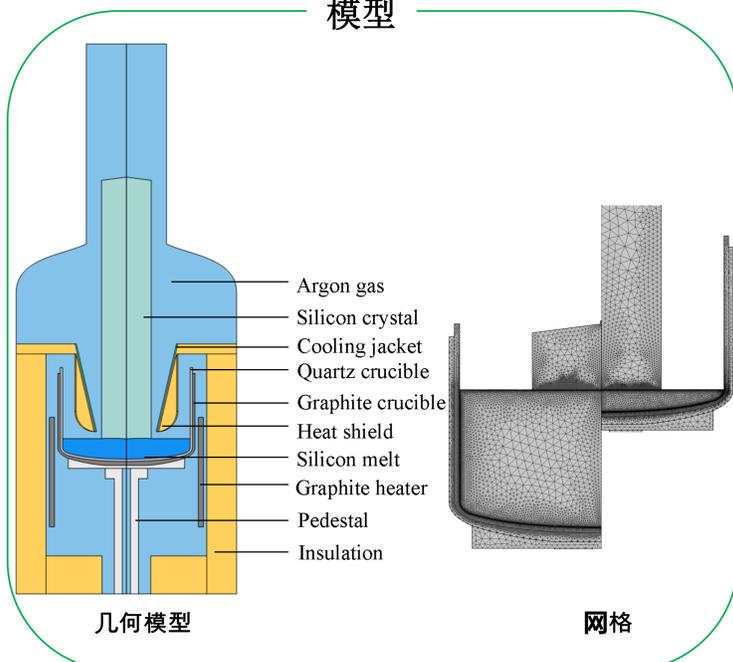


摘要

随着大规模集成电路的发展, 大尺寸电子级直拉单晶硅的需求与日俱增, 而硅片尺寸增大的同时, 氧相关缺陷带来的问题更加凸显。硅片中的氧相关缺陷有利有弊, 因此直拉法生长单晶硅中的氧含量控制十分重要。本文基于有限元方法对12英寸电子级直拉单晶硅生长过程进行数值模拟分析, 研究直拉单晶硅在不同凝固阶段下, 晶体与熔体中氧浓度的变化, 并计算出不同凝固阶段下氧在晶体和熔体两相中的浓度分布。通过考虑水冷屏, 增加固液界面处的温度梯度, 进而根据Voronkov理论计算出晶体中微缺陷区与“完美晶体区”。基于该模型, 比较不同直径的坩埚对生长12寸直拉单晶硅的影响。结果表明, 坩埚直径越大, 自由液面处的氧挥发越多, 进入晶体的氧越少。通过比较k-ε和k-ω两种湍流模型下固液界面处的氧含量变化, 证明了k-ω模型氧含量更低。

方法

模型



控制方程

质量守恒方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0$$

ρ 密度
 \vec{u} 速度

动量守恒方程

$$\rho_0 \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{u} + \rho_0 \vec{g} - \rho_0 \beta (T - T_0) \vec{g}$$

ρ_0 密度 p 压力
 μ 动力粘度 T 温度
 \vec{g} 重力加速度
 β 热膨胀系数
 T_0 参考温度

能量守恒方程

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p \vec{u} \cdot \nabla T = \nabla \cdot k \nabla T + Q$$

k 热导率 ρ 密度
 C_p 比热容 Q 加热功率

马兰戈尼效应方程

$$\left(\mu \frac{\partial u_\tau}{\partial n} \right)_{melt} = \left(\frac{\partial \sigma}{\partial T} \right)_c \frac{\partial T}{\partial \tau}$$

n 法向 u 速度
 τ 切向 c 浓度

对流-扩散方程

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (-D_{eff} \nabla c) + \vec{u} \cdot \nabla c = 0$$

D_{eff} 有效扩散系数

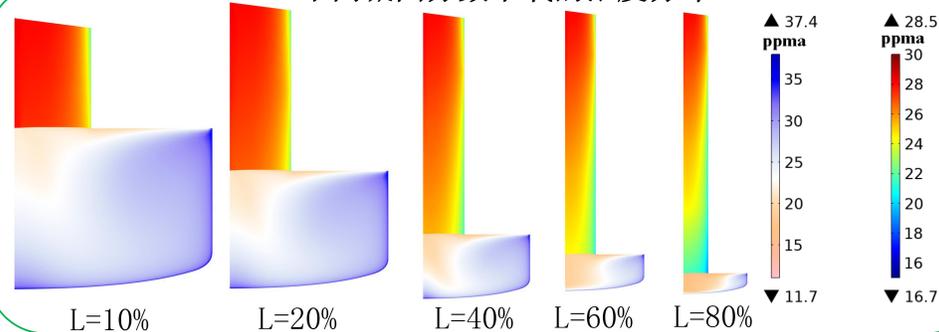
Burton-Prim-Schlichter(BPS) 方程

$$k_{eff} = \frac{k_0}{k_0 + (1 - k_0) \exp\left(-\frac{\varepsilon f}{D}\right)}$$

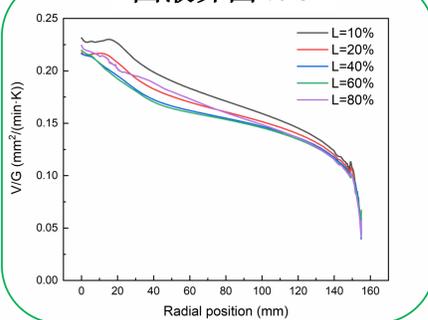
k_{eff} 有效分凝系数 f 生长速率
 k_0 平衡分凝系数
 ε 扩散边界层厚度

结果

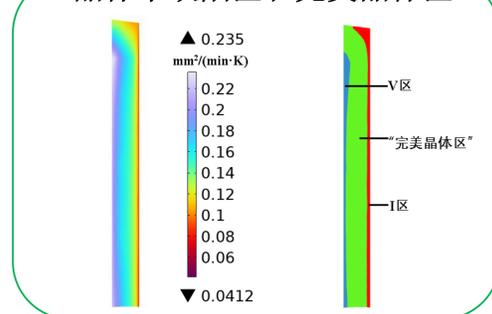
不同凝固分数下氧的浓度分布



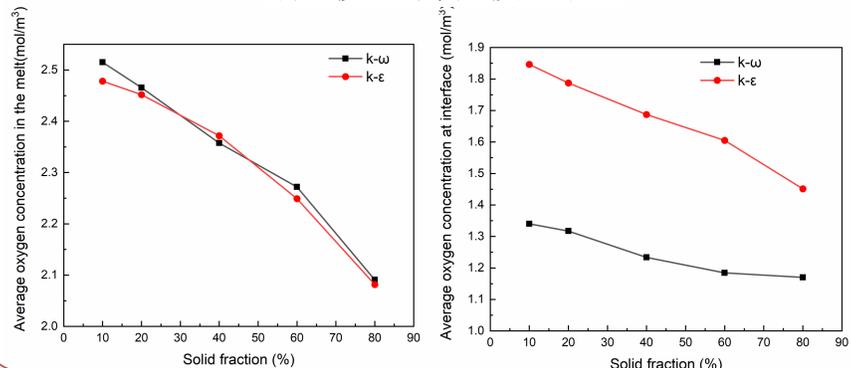
固液界面V/G



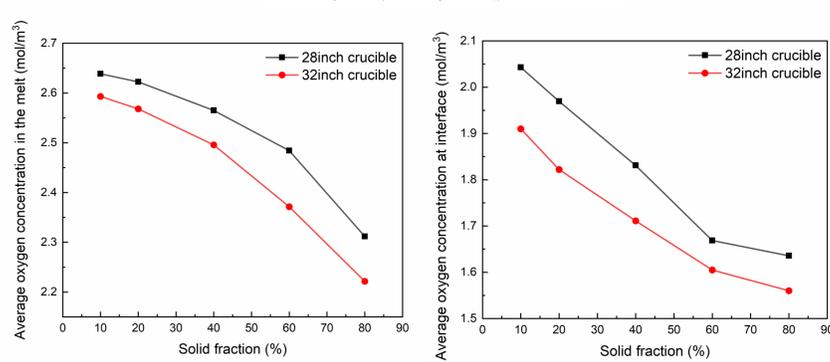
晶体中缺陷区和完美晶体区



湍流模型对氧浓度的影响



坩埚尺寸对氧浓度的影响



总结

本文基于 COMSOL Multiphysics 软件构建多物理场模型分析12英寸电子级直拉单晶硅生长过程中的传质传热现象, 计算了不同凝固阶段下氧在晶体和熔体两相中的分布。通过加入水冷屏, 得到约87%的区域是“完美晶体区”的电子级单晶硅。基于该模型, 比较了k-ε和k-ω两种湍流模型下的氧浓度, 熔体中氧的总量几乎一样, 但由于流动差异, k-ω模型进入晶体中的氧更少。此外, 本文比较了不同直径的坩埚对生长12英寸直拉单晶硅的影响, 结果表明, 坩埚直径越大, 自由液面处的氧挥发越多, 进入晶体的氧越少。