

其实就是 ansys, fluent 等软件的集成, 其实 fluent 自身也有气相沉积模型, 虽然不如 polysim 介绍的那么简单易操作。

在直拉法单晶硅生长过程中, 石英坩埚会和硅熔体起反应, 产生大量 SiO。在硅的熔化温度之下, 一氧化硅的蒸汽压达到 9 托, 因此很容易从熔体表面挥发掉。如果生长过程是在高度真空下操作, 那么 SiO 从熔体表面挥发所带来的沸腾现象, 将给晶体生长带来极大的影响。因此, 晶体生长炉内的操作压力很少低于 5 托。除非硅熔体发生过热现象, 否则在 5 托以上沸腾现象是不会发生的。

从硅熔体表面挥发的 SiO 气体, 在受到冷炉壁及氩气的降温作用后, 会凝结成雾状微粒。如果炉壁上凝结了过多的微粒, 这些微粒可能会重新掉入硅熔体表面。而且当这些微粒撞到晶棒时, 还可能使晶棒产生位错而导致多晶的产生。当炉体内的操作压力接近大气压时, 上述现象更为严重, 因此晶体生长时必须保证压力在 5 托以上。为了减少 SiO 的凝结, 炉体内必须通入氩气, 以带走硅熔体表面挥发出来的 SiO 气体。通入的氩气及大部分的 SiO 则由炉体底部的真空系统抽走。通入氩气的另一目的是要同时带走 CO 气体, 以避免 CO 气体重新进入熔体内, 造成晶棒受到碳的污染。一般氩气的流量在 20 - 150dlpm 之间, 端视生长晶体系统的大小及制程而定。去除了表面机械损伤的无位错籽晶, 虽然本身不会在新生长的晶体硅中引入位错, 但是在籽晶刚碰到液面时, 由于热振动可能在晶体中产生位错, 这些位错甚至能够延伸到整个晶体, 而缩颈技术可以生长无位错的单晶口卜 391。

单晶硅为金刚石结构, 其滑移系为(111)滑移面的<110>方向。通常单晶硅的生长方向为<111>或<100>, 这些方向和滑移面(111)的夹角分别为 36. 16. 和 19. 28 。; 一旦产生位错, 将会沿滑移面向体外滑移, 如果此时单晶硅的直径很小, 位错很快就能滑移出单晶硅表面, 而不是继续向晶体内部延伸, 以保证直拉单晶硅能无位错生长。

因此, 种晶完成后, 籽晶应该快速提拉向上, 晶体生长速度加快, 新结晶的单晶硅的直径将比籽晶的直径小, 可以达到 3mm 左右, 其长度约为此时晶体直径的 6--10 倍, 旋转速率为 2~10rpm, 称为缩颈阶段。对于<100>方向而言, 晶颈的直径越小, 越容易消除位错。但是, 缩颈时单晶硅的直径和长度会受到所要生长单晶硅的总重量的限制, 如果重量很大, 缩颈时晶颈的直径就不能很细。晶颈能支撑晶棒重量的最小值由下式表示:

$$d \approx 1.608 \times 10^{-3} \sqrt{3DL} / 2 \quad (3.2)$$

其中 D 是晶棒直径, L 是晶棒长度。

晶体硅生长时, 外形上有一定规则的扁平晶线。如果是<111>晶向生长, 则有 3 条互成 120。夹角韵扁平棱线; 如果是<100>晶向生长, 单晶硅则有 4 条互成 90。夹角的扁平晶线。在保持晶体硅生长时, 这些晶线连续不断: 一旦产生位错, 晶线将中断。这个现象可以用来判断晶体硅是否无位错生长。

控制参数为: 晶棒以 10rpm 旋转, 坩埚以一 5rpm 旋转, 所生长出的晶体质量最好, 远远优于市场上的单晶硅产品。

结论:

- (1) 晶体旋转增加时, 等温线变密, 提高了生长界面轴心处邻近熔体中的温度梯度, 氧的浓度增加, 但径向均匀性提高;
- (2) 坩埚旋转时, 紊流粘性系数和紊动能随着坩埚转速的提高先是增加, 然后是下降;

(3)晶体坩埚同时作用时并不能有效降低紊流粘性系数，但能使自由界面上的熔体流动受到抑制，等温线更为平坦，有利于生长出无位错单晶硅，并使得杂质分布更为均匀。

(4)经过晶体生长过程中控制对比，晶棒以 10rpm 旋转，坩埚以一 5rpm 旋转，所生长出的晶体外形最好，品格最完整，氧分布最均匀。