

旋转圆盘下的流场解及熔硅中溶质有效分凝系数的计算*

麦振洪 毛再先

中国科学院物理研究所, 北京, 100080

阳述林

北京应用物理与计算数学研究所, 北京, 100088

1990年8月15日收到

本文在导出旋转圆盘下磁流场的解析解的基础上, 计算不同的轴向磁场强度下, 一维模型的场流速度及熔硅中溶质有效分凝系数 K_{eff} , 并进行计算机模拟图解. 结果表明, 磁场使场流受到强烈的抑制; 而且, 对给定的转速, 溶质的 K_{eff} 随磁场强度增加而增加, 而后在一定的磁场强度范围内趋于常数. 同时还发现, K_{eff} 强烈地依赖于溶质的扩散系数.

PACC: 6150C; 8110F

一、引 言

为了满足超大规模集成电路发展的需要, 半导体工业的一个迫切任务是提高硅材料的质量. 人们很早就发现, 硅单晶生长过程硅熔体中热对流是影响硅单晶质量的一个重要因素. 近年来发现, 在硅单晶生长过程, 外加横向或纵向磁场, 不仅场流减弱, 而且场流和温度波动也受到抑制. 有关磁场下直拉硅单晶 (MZO 硅) 的实验和理论方面已有不少报道. 例如 Hoshikawa 报道了纵向磁场对对流的影响^[1]; Hoshi 等人研究了横向磁场下硅单晶的生长^[2]; 麦振洪等人应用 X 射线形貌术, 扩展电阻等技术研究了 MCZ 硅和 CZ 硅的完美性^[3]. 有关 MCZ 硅生长的理论数值模拟也有不少报道^[4-7]. 近几年来, 模拟计算多集中于计算流场和温度场. 本文在分析旋转圆盘下静磁流场的作用基础上, 应用 Burton 等人^[8]的边界层理论 (BPS 理论) 计算熔硅中溶质的有效分凝系数 K_{eff} , 其目的是理解轴向磁场对熔硅流场以及熔硅中溶质的 K_{eff} 的影响.

二、旋转圆盘模型磁流场解析解

1983 年 Langlois 论证了直拉法生长晶体轴对称磁场的焦耳热的影响可以忽略不计^[9], 从而使 Navier-Stokes (缩写 N-S) 方程具有如下形式:

* 国家自然科学基金资助的课题.

$$\rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\nabla P - \rho\alpha\mathbf{g}(T - T_0) + \mathbf{j} \times \mathbf{B} + \rho\nu\nabla^2\mathbf{u}, \quad (1)$$

其中 ρ , α , T_0 和 ν 分别代表流体密度、体膨胀系数、凝结温度和熔体的粘滞系数。然而(1)式仍然非常复杂,只有在某些特定的边界条件下才能求解。为此,有关 MCZ 技术的理论计算直到目前还远不能令人满意。为了简化方程,将拉晶问题考虑为在磁场中旋转圆盘在半无限大液体中的强迫对流问题。这个假设使 N-S 方程在流体力学中具有解析解。以后能看到,解析解对求解有效分凝系数 K_{eff} 随磁场的变化具有重要意义。

假设晶体生长中的晶体为一个旋转圆盘,晶体的转速为圆盘转速 ω , 固液界面为通过圆点并垂直于 z 轴的平面。为简化问题,不考虑晶体提拉速度。图 1 为旋转圆盘的示意图,外磁场方向沿 z 轴,圆柱坐标 (r, θ, z) 定义如图 1 所示。设电磁流体为不可压缩,并处于稳定状态,即(1)式可化成无量纲形式

$$(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = -\nabla P + \nabla^2\mathbf{u} + N\mathbf{j} \times \mathbf{H}. \quad (2)$$

同理,流体中的麦克斯韦方程组

$$\nabla \cdot \mathbf{H} = 0; \quad (3a)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = P_m \mathbf{j}; \quad (3b)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0; \quad (3c)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = q. \quad (3d)$$

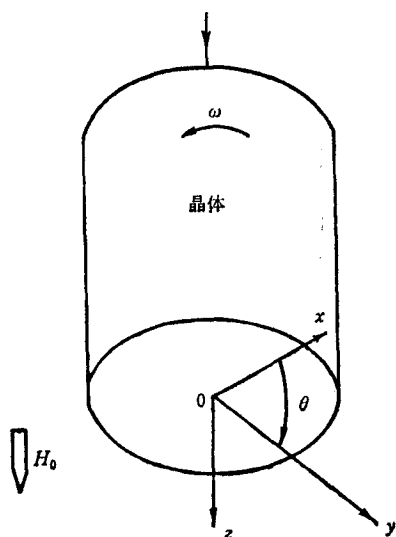


图 1 旋转圆盘模型示意图

欧姆定律

$$\mathbf{j} = \mathbf{E} + \mathbf{u} \times \mathbf{H}. \quad (4)$$

流体连续方程

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (5)$$

其中 $\mathbf{H}$ 为磁场; $\mathbf{E}$ 为电场; $\mathbf{j}$ 为电流密度, q 为电荷密度; $\mathbf{u}$ 为流场矢量; P 为压力; 磁 Prandtl 数为 $P_m = \nu/\eta$; ν 为流体粘滞系数; 流体的磁粘滞系数为 $\eta = 1/4\pi\sigma\mu$, $N = \sigma\mu^2 H_0^2 / \rho\omega$ 为静磁相互作用系数。

在圆盘上边界条件(即 $z = 0$)为

$$u_r = 0; u_\theta = r; u_z = 0. \quad (6)$$

在远离圆盘边界条件(即 $z \rightarrow \infty$)为

$$u_r \rightarrow 0; u_\theta \rightarrow 0; u_z \rightarrow -u_0, \quad (7)$$

其中 $-u_0$ 为待定常数。为了在上述边界条件下解方程(3)、(4)和(5), Kakutani^[9] 假设 P_m 为一个小量,可在计算中忽略所有含 P_m 的项。这样(3b)式简化为

$$\nabla \times \mathbf{H} = 0. \quad (8)$$

根据 Von Karman 假设^[10],令

$$u_r = rf(z), u_\theta = rg(z), u_z = h(z).$$

利用上述边界条件和变量变换解方程(3)、(4)、(5)和(8)。由于其计算十分繁琐,这里只

给出其计算结果。在远离圆盘处 ($z \rightarrow \infty$) 有通解

$$f(z) = \sum_{k=1}^{\infty} F_k e^{k\lambda z}; \quad (9a)$$

$$g(z) = \sum_{k=1}^{\infty} G_k e^{k\lambda z}; \quad (9b)$$

$$h(z) = -c + \sum_{k=1}^{\infty} H_k e^{k\lambda z}, \quad (9c)$$

其中

$$F_1 = A, G_1 = B, H_1 = -2A/\lambda, \lambda = \frac{1}{2}(c + \sqrt{c^2 + 4N}).$$

当 $k \geq 2$ 时

$$F_k = \frac{1}{(K-1)\{(K+1)\lambda + c\}} \sum_{i=1}^{k-1} \left\{ \frac{K-3i}{K-i} F_i F_{k-i} - G_i G_{k-i} \right\},$$

$$G_k = \frac{2}{(K-1)\lambda\{(K+1)\lambda + c\}} \sum_{i=1}^{k-1} \left\{ \frac{K-2i}{K-i} G_i F_{k-i} \right\},$$

$$H_k = -\frac{2}{K\lambda} F_k,$$

其中 A, B 和 C 为待定常数。

在圆盘附近的解为

$$f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k; \quad (10a)$$

$$g(z) = \sum_{k=0}^{\infty} b_k z^k; \quad (10b)$$

$$h(z) = \sum_{k=0}^{\infty} d_k z^k, \quad (10c)$$

其中 $a_0 = 0, b_0 = 1, d_0 = 0; a_1 = a, b_1 = b, d_1 = 0; a_2 = -1/2, b_2 = N/2, d_2 = -a$ 。

当 $k \geq 1$ 时,

$$a_{k+2} = \frac{1}{(K+1)(K+2)} \left\{ \sum_{i=0}^k \left[\frac{K-3i+1}{K-i+1} a_i a_{k-i} - b_i b_{k-i} \right] + N a_k \right\},$$

$$b_{k+2} = \frac{1}{(K+1)(K+2)} \left\{ 2 \sum_{i=0}^k \left[\frac{K-2i+1}{K-i+1} b_i a_{k-i} \right] + N a_k \right\},$$

$$d_{k+2} = -\frac{2}{K+1} a_k,$$

其中 a 和 b 为待定常数。

为了确定待定系数 A, B, C, a 和 b , 对远离圆盘时取 $k=4$, 在圆盘附近时取 $k=7^{[1]}$ 。设在 $z = z_0$ 处函数 $f(z), g(z)$ 和 $h(z)$ 是连续的, 即有如下关系:

$$-C + \sum_{k=1}^4 H_k e^{k\lambda z_0} = \sum_{k=0}^7 d_k z_0^k; \quad (11a)$$

$$\sum_{k=1}^4 G_k e^{k\lambda z_0} = \sum_{k=0}^7 b_k z_0^k; \quad (11b)$$

$$\sum_{k=1}^4 H_k (K\lambda) e^{k\lambda z_0} = \sum_{k=0}^7 d_k k Z_0^{k-1}; \quad (11c)$$

$$\sum_{k=1}^4 G_k (k\lambda) e^{k\lambda z_0} = \sum_{k=0}^7 b_k k z_0^{k-1}; \quad (11d)$$

$$\sum_{k=1}^4 H_k (k\lambda)^2 e^{k\lambda z_0} = \sum_{k=0}^7 d_k k(k-1) z_0^{k-2}. \quad (11e)$$

(11)式是非线性的实方程组,只能求其近似解.可用下降法对其求解.当求出待定参数 A, B, C, a 和 b 后,将它们分别代入 $f(z)$, $g(z)$ 和 $h(z)$ 的表达式,即可得到 $f(z)$, $g(z)$ 和 $h(z)$ 的解析式.

值得注意的是,在以上求解过程中,圆盘转速 ω 和磁场强度 H_0 被视为已知常数,也就是说,给定一组 ω 和 H_0 , 即对应一组 A, B, C, a 和 b 值.

三、有效分凝系数 K_{eff} 的计算

令坐标系固定在晶体和熔体界面上,稳态条件下溶质浓度场的传输方程可表示为

$$D \frac{d^2 C}{dz^2} + [v_0 - u(z)] \frac{dC_L}{dz} = 0, \quad (12)$$

其中 D 为溶质的扩散系数, v_0 为晶体生长速率.因 $u(z)$ 为无量纲量,因此,式中各参量需化为无量纲量.

从上节分析知,在区间 $[0, z_0]$ 和 $[z_0, \infty]$ 磁流场有不同的解.因此,溶质浓度场也需要分别在上述两个区间求解.根据 BPS 理论^[8],溶质浓度场的边界条件为

$$[C_L(0) - C_s]v_0 + D \left. \frac{dC_L}{dz} \right|_{z=0} = 0,$$

$$C_L(\infty) = C_L.$$

其中 $C_L(0)$ 为固液界面上溶质浓度, C_L 为熔体中溶质浓度, C_s 为晶体中溶质浓度.

在 $z = z_0$ 时 C_L 和 $\frac{dC_L}{dz}$ 应是连续的.解方程(12),可求出 $[0, \infty]$ 区间的 $C_L(z)$ 解.

若定义有效分凝系数 $K_{\text{eff}} = C_s/C_L$, 平衡分凝系数 $K_0 = C_s/C_L(0)$, 即可得

$$K_{\text{eff}} = \frac{K_0}{1 + (K_0 - 1)J}, \quad (13)$$

其中

$$J = \int_0^{z_0} \exp \left[-\frac{v_0 z}{D} + \sum_{k=0}^7 \frac{d_k z^{k+1}}{(k+1)D} \right] dz \\ + \int_0^{\infty} \exp \left\{ \frac{1}{D} \left[-v_0 z_0 - (v_0 + c)z + \sum_{k=0}^7 \frac{d_k z_0^{k+1}}{k+1} \right] \right\} dz$$

$$+ \sum_{k=1}^4 \frac{H_k}{K\lambda} e^{k\lambda z_0} (e^{k\lambda z} - 1) \Big] \Big\} dz. \quad (14)$$

(13)和(14)式的计算十分复杂,借助计算机在区间 $[0, z_0]$ 用 Legendre-Gauss 法求积,在区间 $[0, \infty]$ 用 Laguerre-Gauss 法求积,即可求得 K_{eff} .

四、结果与讨论

对旋转圆盘下流场解的模拟以及溶质的 K_{eff} 计算是在 IBM 370 大型计算机上进行,鉴于理论计算的复杂性,只能根据计算机的容量进行有限的计算. 计算所用的参数列于表 1.

表 1

熔硅密度 $\rho = 2.33\text{g/cm}^3$	平衡分凝系数 $K_0(\text{氧}) = 0.35$
晶体半径 $R = 2.86\text{cm}$	平衡分凝系数 $K_0(\text{磷}) = 0.35$
熔硅电导率 $\sigma = 12860\text{S/cm}$	拉晶速率 $v_0 = 1\text{mm/min}$
磁场强度 $0 < H < 1200\text{G}$	晶体转速 $10 < \omega < 40\text{rpm}$
熔硅粘滞系数 $\nu = 0.0036\text{cm}^2/\text{s}$	氧在熔硅中扩散系数 $D = 10^{-6}\text{cm}^2/\text{s}$
熔硅磁导率 $\mu = 1$	磷在熔硅中扩散系数 $D = 5.1 \times 10^{-6}\text{cm}^2/\text{s}$

图 2 是流场的 r 分量图. 从图 2 中可看到,随着磁场强度的增加, u_r 的极大值减小并向 z 小的方向移动. 也就是说,随着磁场强度的增加, r 方向的流速极大值逐渐靠近圆盘,相当于磁场对 r 方向的流速有抑制作用. 从图 2 中还看到,当远离圆盘时,径向速率趋于零.

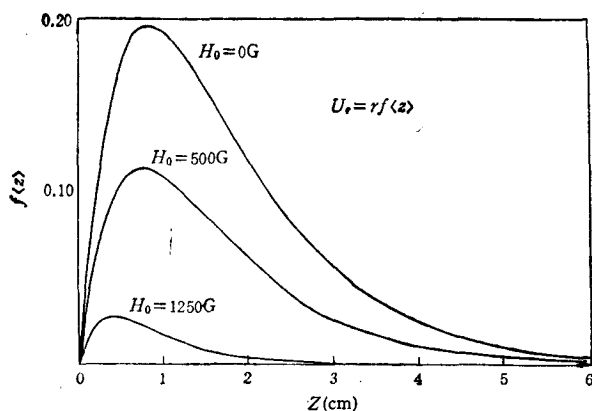


图 2 径向速度分量随 z 的变化 $\omega = 30\text{rpm}$

图 3 是流场的角速度分量图. 从图 3 中看到,对给定 r 和 z 值,磁场强度越大,角向速率越小,且随着远离圆盘 ($z \rightarrow \infty$),角向速率趋于零.

图 4 是流场轴向速度分量图. 可以看到,随着磁场强度的增加,轴向速度趋于稳定越快,而且其值越小,即明显表明磁场对流场轴向分量的抑制作用. 从(14)式可知,此量对求解有效分凝系数十分重要.

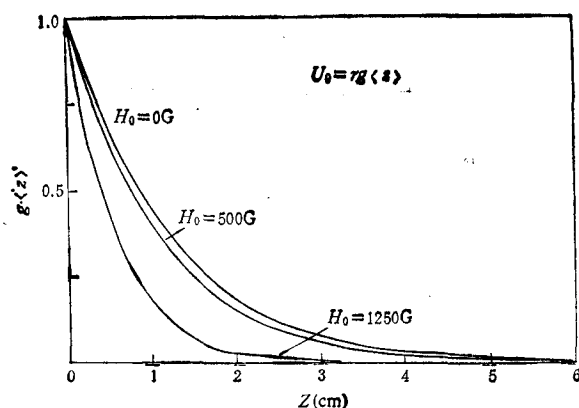
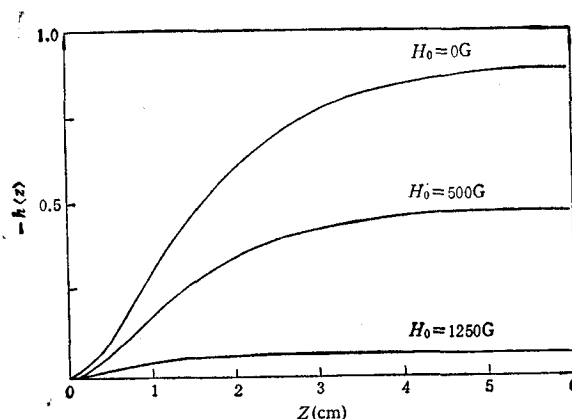
图3 角速度分量随 z 的变化 $\omega = 30\text{rpm}$ 图4 轴向速度分量随 z 变化 $\omega = 30\text{rpm}$

图5是在不同晶体转速下磷在熔硅中的 K_{eff} 与磁场强度的关系图。可以看到, 无外磁场情况下, 随着晶体转速的增加, K_{eff} 逐渐减少, 而加外磁场后, 随磁场强度的增加, K_{eff} 增加。同时, 从图5还看到, 不同磁场强度对 K_{eff} 的影响不同。很清楚, 在曲线斜率较大的区域, 当磁场微小变化时, K_{eff} 将有较大的变化。这将引起溶质在晶体中不均匀分布, 对改善硅单晶的质量是不利的。事实上, 在一定的磁场强度范围随着磁场强度的增加, K_{eff} 趋于常数。例如, 当磁场强度在 1200—1500G 之间, 对曲线 1 的 K_{eff} 约为 0.3875。因此, 我们建议, 在晶体生长中, 磁场强度应保持在使 K_{eff} 为常数的范围内。

还应指出, 在计算氧在硅中的 K_{eff} 时, 发现氧的扩散系数很少 ($\approx 10^{-8}\text{cm}^2/\text{s}$), 以致于磁场对 K_{eff} 的影响不明显。因此, 可得到另一个结果: 磁场强度对 K_{eff} 的影响还取决于溶质在熔硅中的扩散系数。

上述计算结果可以解释我们的实验结果^[12]: MCZ 硅的热稳定性、晶体完美性和电学等性能均优于 CZ 硅, 这是由于磁场对熔硅中热对流的抑制作用, 使熔硅中总的氧含量减少。从而, 使进入单晶硅中的氧含量得以控制。另外, 根据 Hurle 的计算结果可知, 宏观对流有利于温度波的传播, 而弱对流使温度波在到达固液界面以前迅速衰减, 也就是

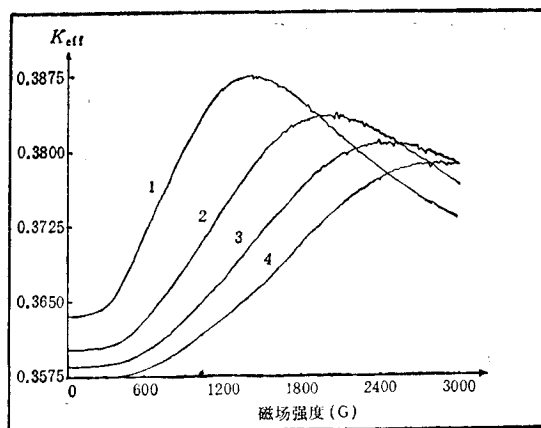


图5 磷在熔硅中的 K_{eff} 随磁场强度的变化 曲线1为10rpm;曲线2为20rpm;曲线3为30rpm;曲线4为40rpm

说,施加磁场减弱了温度波对有效分凝系数的影响。

五、结 论

综上所述,施加磁场对控制硅单晶中杂质分布,改善硅单晶质量有好处:

1) 轴向磁场抑制了流场速度矢量,导致速度界面层的增厚。众所周知,增厚的速度界面层能避免 SiO_2 离开坩埚,这就是 MCZ 硅中氧含量低而且可控制的原因。

2) 较大的和稳定的有效分凝系数 K_{eff} , 使溶质(如磷等)均匀进入硅晶体,以致于 MCZ 硅单晶溶质分布均匀及缺陷密度低。

最后,应指出,在计算中,忽略了重力对热对流的影响。这主要是为了简化运算,但即使这样,计算仍是相当复杂,已达到我们所使用的 IBM 370 大型计算机的容量极限。最近,有人考虑重力因素求解 N-S 方程,但直到目前还没能得到满意的结果。不过,可以肯定,重力有利于熔体中对流的产生,因此,为了有效抑制对流所需施加的磁场强度也应相应加大。

- [1] K. Hoshikawa, *Japan J. Appl. Phys.*, 21(1982), L545.
- [2] K. Hoshi, N. Isawa, T. Suzuki and Y. Ohlubo, *J. Electrochem. Soc.*, 132(1985), 693.
- [3] Z. H. Mai, Z. X. Mao, H. P. Li *et al.*, Proceeding of the International Conference on the Sciences and Technology of Defect Control in Semiconductor, Yokohama, Japan, September 17—22(1989).
- [4] W. Langlois and J. S. Walker, Proceeding of 2nd International Conference on Boundary and Interior Layers-Computational and Asymptotic Method, Trinity College, Dublin, (1982).
- [5] W. E. Langlois and M. J. Lee, *J. Crystal Growth*, 62(1983), 481.
- [6] G. M. Oreper and J. Szekely, *J. Crystal Growth*, 64(1983), 505.
- [7] M. Miheleic and K. Wingerath, *J. Crystal Growth*, 71(1985), 163.
- [8] J. A. Burton, R. C. Prim and W. G. Slichter, *J. Chem. Phys.*, 21(1953), 1987.
- [9] T. Kakutani, *J. of the Physical Society of Japan*, 17(1962), 1496.
- [10] Von Karman and T. Z. Angew, *Math. U. Mech.*, 1(1921), 244.
- [11] T. Kakutani, *J. of the Physical Society of Japan*, 17(1962), 1496.

[12] Z. H. Mai *et al.*, *Moder. Phys. Lett.*, B4(1990), 625.

ANALYTIC SOLUTION OF HYDROMAGNETIC FLOW DUE TO A ROTATING DISK AND CALCULATION OF EFFECTIVE SEGREGATION COEFFICIENT K_{eff} OF SOLUTE IN SILICON MELT

MAI ZHEN-HONG MAO ZAI-XIAN

Institute of Physics, Academia Sinica, Beijing, 100080

YANG SHU-LIN

Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing, 100088

(Received 15 August 1990)

ABSTRACT

Based on the analytic solution of hydromagnetic flow due to a rotating disk, both velocity field and effective segregation coefficient K_{eff} of solute in silicon melt in terms of one dimensional model were calculated under actions of various axial magnetic field strength. Results of computer simulation are presented graphically. It is found that not only the magnitudes of velocity components are strongly suppressed by magnetic field, but also the K_{eff} of solute increases as the magnetic field increases with given rotational rate, finally tends to a constant within some definite regions of magnetic field. In addition, it is also found that the K_{eff} is strongly dependent on the diffusion coefficient of solute.

PACC: 6150C; 8110F