

ОПЫТ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ТРАНСПОРТА КИСЛОРОДА ПРИ РОСТЕ КРИСТАЛЛОВ КРЕМНИЯ ПО МЕТОДУ ЧОХРАЛЬСКОГО

Кислород является одной из основных примесей в кристаллах кремния. Он попадает в расплав в результате растворения кварцевого тигля и либо встраивается в кристалл, либо испаряется со свободной поверхности в виде газообразного оксида кремния. Для интенсификации испарения оксида кремния, а также для предотвращения встраивания других продуктов реакций в кристалл кремния, через ростовую установку прокачивается инертный газ аргон под низким давлением. Для получения монокристалла кремния с необходимыми электрофизическими свойствами необходим эффективный механизм контроля распределения концентрации кислорода в кристалле, как в радиальном, так и в осевом направлении.

Рост кристаллов кремния из расплава происходит при таких высоких температурах, что экспериментальное исследование течения расплава и транспорта кислорода становится практически невозможным. В этом случае компьютерное моделирование помогает понять особенности роста кристаллов и переноса примесей.

В данной работе представлена обновленная численная модель транспорта кислорода в ростовой установке типа Чохральского (рис. 1), разработанная на базе предыдущих исследований [1, 2]. В силу малости массовой концентрации кислорода в расплаве, а также оксида кремния в газе, считается, что концентрация кислорода не влияет на течение расплава и газа. Для расчета транспорта кислорода в расплаве применяются следующие граничные условия. Низкая скорость вытягивания кристалла и близкий к единице коэффициент вхождения позволяет поставить условие нулевого массового потока на границе расплава с кристаллом. На внутренней стенке тигля ставится значение концентрации кислорода при условии локального равновесия реакции растворения. Эта зависимость получена из экспериментальных данных о растворимости кварца [3]. На свободной поверхности расплава ставится граничное условие, полученное из закона действующих масс, условия термодинамического равновесия реакции, а также граничного условия на стенке тигля [3].

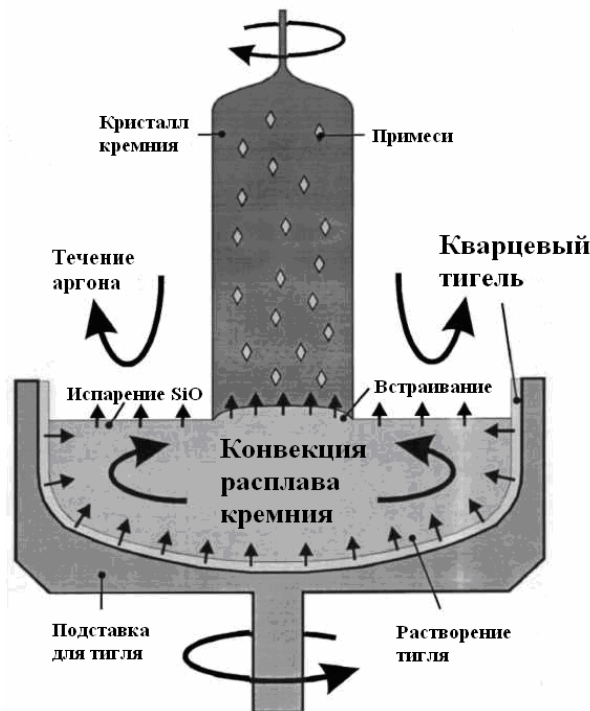


Рис. 1. Общая схема транспорта кислорода

Для верификации обновленной модели транспорта кислорода была произведена серия двумерных расчетов, а также трехмерный нестационарный расчет для ростовой установки с малым диаметром тигля [4]. В силу малости числа Релея для данной установки ($Ra = 2.1 \times 10^5$) расчеты производились в приближении ламинарного течения. В результате исследований на сеточную сходимость в двумерных расчетах сеточно-независимым оказалось решение, полученное на сетке, в четыре раза измельченной по каждому направлению (65 000 ячеек) по отношению к базовой сетке. Трехмерный расчет был выполнен на базовой сетке (250 000 ячеек). В результате трехмерного расчета выяснилось, что течение расплава не симметрично относительно оси с объемными трехмерными структурами. И, как следствие, распределение концентрации кислорода по фронту кристаллизации оказалось также не осесимметричным.

Распределение концентрации кислорода по фронту кристаллизации после осреднения по времени стало осесимметричным. Эти данные, а также результаты двумерного расчета на измельченной сетке и экспериментальные данные приведены на рис. 2.

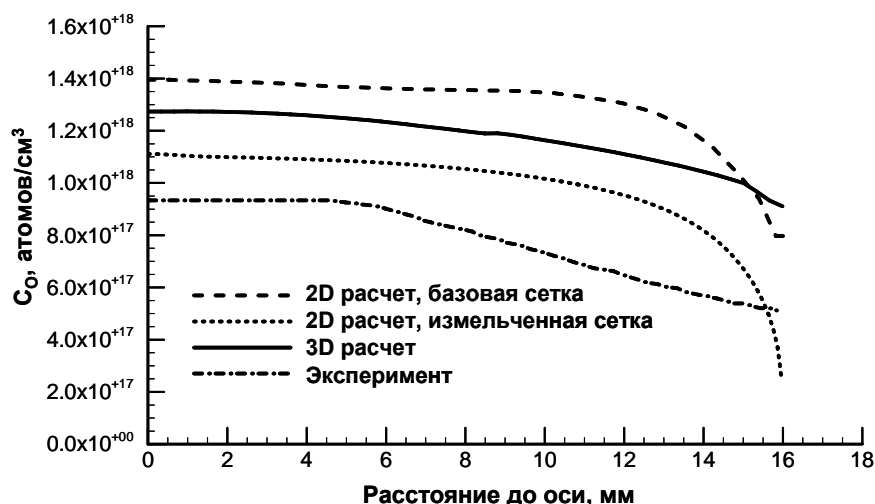


Рис. 2. Радиальное распределение концентрации кислорода в кристалле

По полученным результатам видно, что трехмерная модель лучше описывает распределение концентрации кислорода в зависимости от расстояния до оси, особенно на краю кристалла, в силу более качественного разрешения структур течения. И если для 3D расчетов при измельчении сетки сохранится та же тенденция, что и для 2D расчетов, то при использовании сетки с числом ячеек около 15 миллионов можно ожидать хорошего совпадения расчетного и экспериментального распределения концентрации кислорода по радиусу. Но такого рода 3D расчет в настоящее время провести весьма затруднительно.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Yu.E.Egorov et al. Mat. Res. Soc. Symp. Proc., vol. 490, 1998, p.181.
2. I.Yu.Evstratov et al. Microelectronic Engineering, vol. 56, 2001, p.139-142.
3. X.Huang et al. Jpn. J. Appl. Phys., vol. 32, 1993, p.135-147.
4. L.Liu, S.Nakano, K.Kakimoto. J. Crystal Growth, vol. 282, 2005, p.49-59.