

DOI:10.3969/j.issn.1001-4551.2014.01.013

反射环对区熔炉温度场的影响^{*}

傅林坚, 曹建伟, 沈文杰, 朱 亮, 张 俊, 石 刚, 欧阳鹏根, 叶 欣, 邱敏秀^{*}
(浙江晶盛机电股份有限公司, 浙江 上虞 312300)

摘要:针对悬浮区熔法生长较大直径的单晶硅时, 单晶硅外部的轴向温度梯度比内部温度梯度大很多, 从而导致硅单晶径向电阻率不均匀及生长裂纹的问题。通过有限元法对生长区熔硅单晶的温度场进行了数值模拟, 建立了有反射环和无反射环的两种模型, 得到了两种模型下的单晶温度分布图, 并对比分析了两种模型下的单晶外表面温度分布及纵向温度梯度分布。研究表明, 反射环可改善温度场分布, 降低单晶硅外表面轴向温度梯度, 使晶体径向温度趋于一致, 提高硅单晶径向电阻率均匀性, 并有效解决了生长过程中单晶硅易出现裂纹的问题。

关键词:悬浮区熔法; 反射环; 数值模拟; 温度场

中图分类号:TH142; TN30

文献标志码:A

文章编号:1001-4551(2014)01-0062-05

Influence of reflection ring on temperature field of float-zone furnace

FU Lin-jian, CAO Jian-wei, SHEN Wen-jie, ZHU Liang, ZHANG Jun,
SHI Gang, OUYANG Peng-gen, YE Xin, QIU Min-xiu
(Zhejiang Jingsheng M&E Co., Ltd., Shangyu 312300, China)

Abstract: Aiming at the problem of non-uniform radial resistivity of monocrystalline silicon, which is caused by the difference of external axial temperature gradient and the internal temperature gradient while the grown monocrystalline silicon has a large diameter. In order to analyze the influence of reflection ring on the temperature field, a numerical simulation of the temperature field of the monocrystalline silicon was made by using the finite element method. The models with reflection ring and without reflection ring were built to analyze the external temperature distribution and longitudinal temperature distribution of the monocrystalline silicon. The results indicate that the reflection ring could improve the temperature distribution and lower monocrystalline silicon's external temperature gradient, thus leading to a uniform radial temperature gradient and higher radial resistivity, then effectively avoiding cracks on the surface of the grown monocrystalline silicon.

Key words: float zone method; reflection ring; numerical simulation; temperature field

0 引 言

区别于传统的直拉法(CZ)生长硅晶, 区熔硅单晶采用区熔法(也叫针眼法)原理生长硅晶, 即: 利用高频感应加热原理, 直接对高纯多晶棒料局部加热并熔化, 下轴的籽晶通过线圈中心孔与多晶棒熔接并生长出单晶。在整个拉晶过程中硅晶不与外界接触, 因而容易获得高纯度、高完整性、低缺陷的晶棒, 该技术被广

泛应用于制作高压整流器、高压晶体管、晶体晶闸管等高压大功率器件和探测器、RF 无线通信芯片等领域。

当生长的区熔单晶硅直径较大时, 晶体外部的热量通过热辐射和热对流等形式传递到周围环境中, 而晶体内部的温度只能通过热传导向晶体外部散去, 这样一来将会造成晶体外部温度降低很快而晶体内部温度降低比较慢; 也就是说, 区熔单晶硅径向温度梯度分布不均匀, 呈现为晶体中心处温度梯度小, 晶体外径处

收稿日期: 2013-06-17

基金项目: 国家科技重大专项资助项目(2011ZX02706-005)

作者简介: 傅林坚(1980-), 男, 浙江杭州人, 博士, 主要从事机电一体化方面的研究. E-mail: fulinjian@jsjd.cc

通信联系人: 邱敏秀, 女, 教授, 博士生导师. E-mail: ouyangpenggen@jsjd.cc

温度梯度大^[1-4]。这种情况下生长的区熔单晶硅切片后,硅片的径向电阻率也不均匀,电阻率小的地方易击穿,整个硅片的整体质量就大大降低。所以,理想状态是区熔单晶硅内的等温线呈水平,即径向温度梯度处处相等,但是这种情况是不可能完全实现的,只能通过增加特殊构件(如反射环等),来改善温度场分布,尽量使晶体径向温度梯度趋于一致。

本研究主要探讨反射环对区熔炉温度场的影响,针对不使用反射环和使用反射环两种情况对区熔炉温度场进行有限元仿真,分析反射环对单晶硅温度及温度梯度的影响。

1 区熔炉温度场数学模型

区熔炉中的热量传递涵盖了传热学中三大基本传热形式:热传导、热对流和热辐射。熔区及晶体内的主要换热方式为热传导,晶体与炉体内的氩气之间存在热对流,熔区与加热线圈、晶体与反射环之间主要是热辐射。

对于笔者研究的区熔炉温度场,单晶硅及多晶硅热传导微分方程可表示为^[5-6]:

$$Pe_{C,F}\frac{\partial T}{\partial z}=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(f_k(T)r\frac{\partial T}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(f_k(T)\frac{\partial T}{\partial z}\right)\tag{1}$$

式中:下标 C、F、M—单晶、多晶和熔区; $f_k(T)$ —随温度变化的导热系数, $f_k(T)=k(T)/k^0$; k^0 —特征导热系数, $Pe_{C,F}=v_{C,F}c_{C,F}\rho_{C,F}R_0/k_{C,F}^0$; R_0 —单晶特征半径; v_C —单晶生长速度; v_F —多晶移动速度; c —比热; ρ —密度。

对于该温度场的边界条件^[5]是相当复杂的,边界划分如图 1 所示。

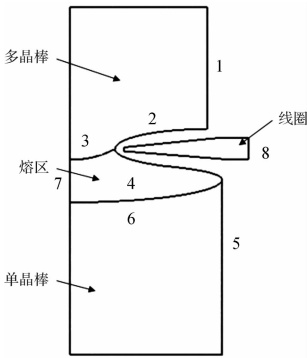


图 1 温度场模型边界示意图

具体分析如下:

(1)在晶体中心线上:径向温度梯度为零,即:

$$\frac{\partial T}{\partial r}=0\tag{2}$$

(2)在融化边界 3、6 上:温度为常数,即:

$$T=T_0\tag{3}$$

式中: T_0 —硅的熔点。

(3)在单晶及多晶的外表面 1、5 上:

$$\frac{\partial T}{\partial \boldsymbol{n}}=Bi_{F,C}f_e(T)(T^4-T_u^4)-Qe_{F,C}j^2\tag{4}$$

式中: $\boldsymbol{n}$ —指向多晶或单晶的单位法向量; T_u —环境温度; j —表面电流密度; $f_e(T)$ —随温度变化的发射率, $f_e(T)=e_{F,C}/e_{F,C}^0$; $Bi_{F,C}$ —无量纲常数, $Bi_{F,C}=e_{F,C}^0\sigma_{SB}T_0^3R_0/k_{F,C}^0$; e —发射率; σ_{SB} —斯蒂芬—波尔兹曼常数; $Qe_{F,C}$ —无量纲常数, $Qe_{F,C}=I_0^2R_0\sqrt{\omega\mu_0}/k_{F,C}^0T_0\sqrt{2\delta_{F,C}}$; I_0 —加热线圈电流; ω —电源角频率; μ_0 —相对磁导率; δ —电阻率。

(4)在熔区固液表面上,边界条件可由热量平衡方程描述:

$$\left.\frac{\partial T}{\partial \boldsymbol{n}}\right|_F+q_M-Cr_F\cos\theta=0\text{(边界 3 上)}\tag{5}$$

$$\left.\frac{\partial T}{\partial \boldsymbol{n}}\right|_C+q_M-Cr_C\cos\theta=0\text{(边界 6 上)}\tag{6}$$

式中: q_M —由熔区通过表面 3 和 6 的热流密度, $q_M=k_M/k_{F,C}\cdot\partial T/\partial \boldsymbol{n}$; $Cr_{F,C}$ —无量纲常数, $Cr_{F,C}=v_{F,C}\rho_{F,C}QR_0/k_{F,C}^0T_0$; Q —融化热; θ —熔区自由表面切向与水平面夹角。

在计算所用到的硅的物性参数及相关函数如表 1 所示。

表 1 在计算中要用到的 Si 的物性参数表

物性参数	数值或表达式	单位
T_0	1 685	K
δ_M	0.83×10^{-6}	$\Omega\cdot\text{m}$
$\delta_{F,C}$	0.2×10^{-4}	$\Omega\cdot\text{m}$
$c_{F,C,M}$	1 000	J/kg·K
$\rho_{F,C,M}$	2 530	kg/m ³
$k_{F,C}^0$	22	W/m·K
$k_{F,C}$	$k_{F,C}^0f_k(T)$	W/m·K
$f_k(T)$	$4.495-7.222\frac{T}{T_0}+3.728\left(\frac{T}{T_0}\right)^2$	
k_M	67	W/m·K
$e_{F,C}^0$	0.46	
$e_{F,C}$	$e_{F,C}^0f_e(T)$	
$f_e(T)$	$\begin{cases} 1.39\left(\frac{T}{T_0}<0.593\right) \\ 1.96-0.96\frac{T}{T_0}\left(\frac{T}{T_0}\geq0.593\right) \end{cases}$	
e_M	0.27	
R_0	150	mm
f	2.5	MHz

2 区熔炉温度场数值模拟

区熔炉温度场是一个典型的电磁—温度耦合场,

电磁场中求解出的生热率是温度场中的载荷,反过来温度场中温度变化又会影响到硅的电磁参数^[7-11]。在电磁场分析中,可以求得感生电流产生的焦耳热,这一部分热量作为温度场分析中的内热源,因此区熔法生长单晶的基本导热微分方程中含有内热源项,内热源强度为:

$$q_v = \sigma \omega^2 |A|^2 \quad (7)$$

式中: σ —电导率, ω —高频电源角频率, A —矢量磁势。

因此,轴对称物件感应加热时的傅里叶导热微分方程可表示为:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(rk(T) \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right) + q_v = \rho c \frac{\partial T}{\partial t} \quad (8)$$

式中: $k(T)$ —随温度变化的导热系数; ρ —密度; c —比热; q_v —内热源强度。

硅材料的电阻率又受温度的影响,其满足函数:

$$\delta_T = -1.38 \times 10^{-8} T + 0.24 \times 10^{-4} \quad (9)$$

本研究中电磁—温度耦合场分析采用物理环境法,耦合流程如图 2 所示。

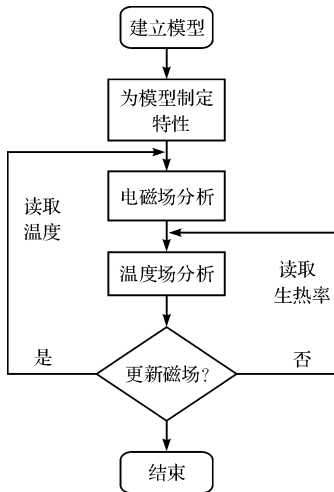


图 2 电磁—热耦合场分析流程图

在温度场有限元分析中,反射环结构如图 3 所示。

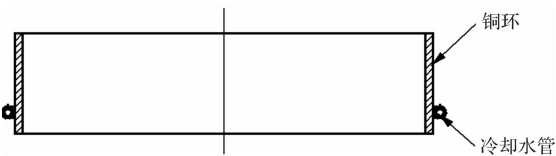
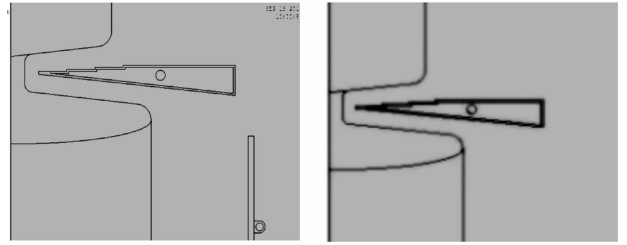


图 3 反射环结构示意图

以生长直径 6 英寸的区熔单晶硅为例,取多晶硅长度 150 mm,单晶硅长度 200 mm,建立包括单晶硅、多晶硅、熔区、线圈、反射环及氩气氛围等面,该模型是典型的轴对称模型,可只建立 1/2 的二维区域,使用和不使用反射环的两种模型如图 4(a)、4(b) 所示。

本研究采用物理环境法求解电磁—温度耦合场,先建立电磁物理环境。所有面的单元类型选取



(a) 使用反射环有限元几何模型 (b) 不使用反射环有限元几何模型

图 4 两种模型结构

PLANE 13;定义材料属性,包括相对磁导率、电阻率、电流密度载荷、电源频率等,然后将电磁场物理环境写入文件 emag.rmg。

定义热物理环境前,先将电磁物理环境删除。面单元类型选取 PLANE 55,辐射表面单元类型选取 SURF 151;然后定义材料的热导率、焓、发射率、斯蒂芬—波尔兹曼常数等参数。熔区热导率 $67 \text{ W/m} \cdot \text{K}$,多晶硅及单晶硅的热导率是随温度变化的,满足函数:

$$f_k(T) = 22 \times \left(4.495 - 7.222 \frac{T}{T_0} + 3.728 \left(\frac{T}{T_0} \right)^2 \right) \quad (10)$$

式中: T —开氏温度, T_0 —硅的熔点。

反射环和加热线圈为紫铜材料,热导率为 $397 \text{ W/m} \cdot \text{K}$;熔区表面的发射率为 0.27;多晶硅和单晶硅表面发射率满足函数:

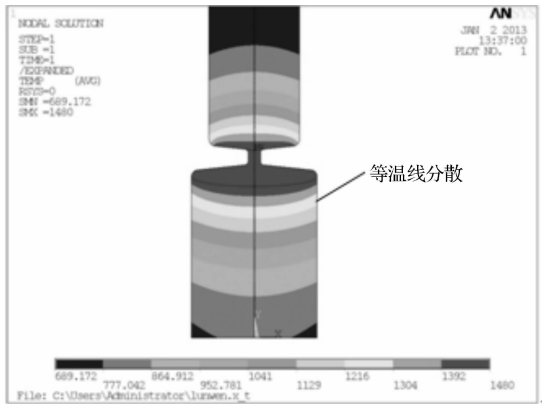
$$f_e(T) = \begin{cases} 0.46 \times 1.39 \left(\frac{T}{T_0} < 0.593 \right) \\ 0.46 \times \left(1.96 - 0.96 \frac{T}{T_0} \right) \left(\frac{T}{T_0} \geq 0.593 \right) \end{cases} \quad (11)$$

式中: T —开氏温度, T_0 —硅的熔点;反射环及线圈的发射率为 0.4。

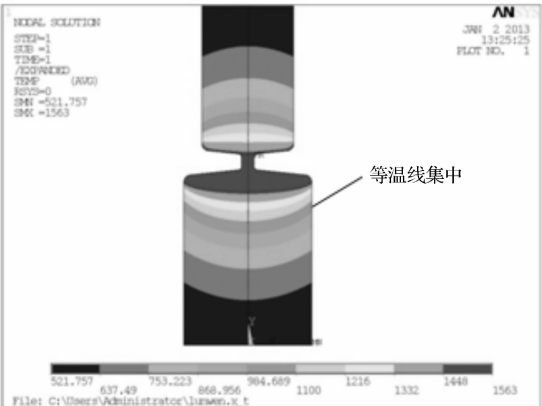
在加热线圈和反射环内还通有冷却水,需定义温度和对流换热系数。定义完成后,将热物理环境写入文件 thermal.rth。

电磁场物理环境和温度场物理环境写好之后,通过循环求解,可得晶体温度分布。为方便对比,本研究只选取晶体部分温度云图,如图 5(a)、5(b) 所示。

从图 5(a) 和图 5(b) 的对比中可看出:在单晶硅外表面处,使用反射环的等温线分布更分散,即从上到下温度变化更缓慢;不使用反射环的等温线分布更集中,即从上到下温度降低的速度很快。出现这种现象的原因:反射环在电磁场的作用下会发热,温度升高,反射环与单晶外表面通过热辐射的形式交换热量,使单晶温度降低得没那么快。这样就可以避免由于单晶温度降低过快而发生单晶出现裂纹的现象。另外,从图中还可以发现:图 5(a) 中单晶的等温线比图



(a) 使用反射环晶体温度分布图



(b) 不使用反射环晶体温度分布图

图5 两种模型晶体温度分布图

5(b) 曲率半径更大,也就是更平缓,这样单晶中心与单晶外表面的温度差就更小,从而使生长的单晶径向电阻率更均匀。

3 仿真数据分析

为更直观地对比两种情况下单晶外表面的温度分布,沿着单晶外表面定义一条路径,路径方向从上到下,然后绘制出路径温度分布曲线,如图6(a)、6(b)所示。

本研究用 ANSYS 中 list path 的功能把路径上温度数据提取出来,然后将图6(a)、6(b)中的两条曲线在一个坐标系下绘制出来,对比曲线如图7所示。

图7中,曲线A代表不使用反射环的单晶外表面温度分布曲线,曲线B代表使用反射环的单晶外表面温度分布曲线。曲线B所示的温度值从熔点下降到757.626℃,曲线A所示的温度值从熔点下降到521.757℃,曲线B的温度降低的速度比曲线A要慢,这个温度降低的速度用轴向温度梯度来表示,也就是说使用反射环时单晶表面的轴向温度梯度要比不使用反射环时小。通过 ANSYS 中的后处理,把沿着路径的温度梯度数据提取出来,得到的两种情况下温度梯度

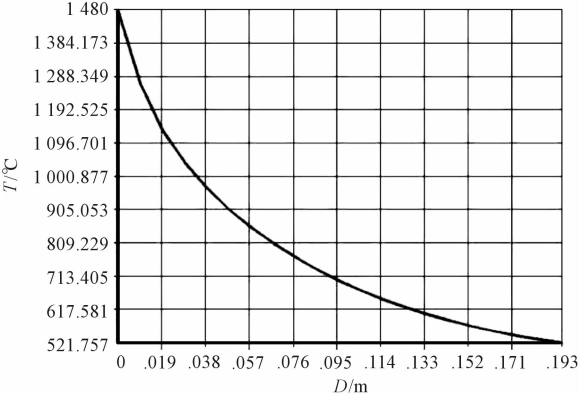
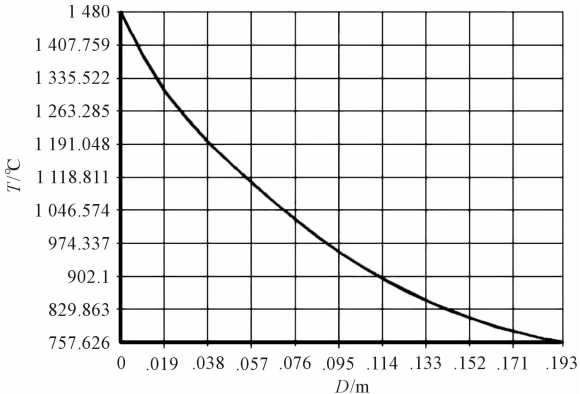


图6 两种模型单晶外表面温度分布曲线

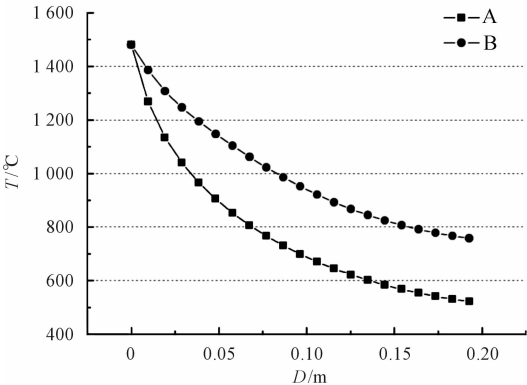


图7 两种模型中单晶表面温度对比曲线

对比曲线如图8所示。

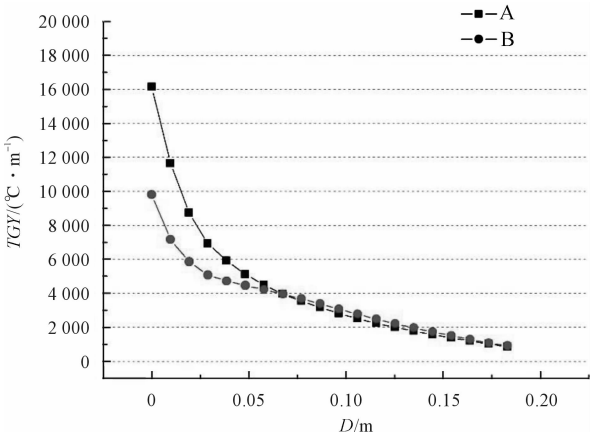


图8 两种模型中单晶表面轴向温度梯度对比曲线

轴向温度梯度 (TGY) 表示温度沿轴向变化的快慢,即温度曲线的斜率。图 8 中,曲线 A 表示不使用反射环时单晶表面轴向温度梯度,曲线 B 表示使用反射环是单晶表面轴向温度梯度。对比两条曲线可发现:在横坐标 0.07 m (该位置刚好为反射环下边缘所在位置) 之前的部分,曲线 A 比曲线 B 的值要大;0.07 m 之后的部分,曲线 A 与曲线 B 的值基本相等。也就是说,使用反射环时,在反射环 (包括反射环) 以上单晶轴向温度梯度比不使用反射环时要小;在反射环以下单晶轴向温度梯度与不使用反射环时的相等。这是因为反射环与单晶表面有热辐射,减缓了单晶表面温度的降低。

4 结束语

本研究通过电磁—温度耦合场的仿真结果,可清楚地了解到反射环对单晶硅表面温度的影响,因此可得如下结论:反射环可以减慢单晶表面温度降低的速度,即减小单晶表面轴向温度梯度,从而使单晶的径向温度分布更均匀。

本研究通过实验还发现降低单晶表面轴向温度梯度有两个好处:其一是可以避免单晶因冷却过快而产生裂纹;其二是单晶表面轴向温度梯度减小,缩小了单晶表面与单晶中心的温度差,使单晶径向电阻率更均匀。

参考文献 (References):

- [1] MUEHLBAUER A, MUIZNIEKS A. System of mathematical models for the analysis of industrial FZ-Si-Crystal growth process[J]. *Cryst. Res. Technol.*, 1999, 34(2): 217-226.
- [2] LIN K, DOLD P. Radiative heat transfer in a resistance

heated floating zone furnace; a numerical study with FIDAP [J]. *Cryst. Res. Technol.*, 2001, 36(7): 629-639.

- [3] YAO Li-ping, ZENG Zhong, ZHANG Yi. Influence of rotating magnetic field strength on three-dimensional thermocapillary flow in a floating half-zone model [J]. *Heat Mass Transfer*, 2012, 48(12): 2103-2111.
- [4] DOLD P. Analysis of microsegregation in RF-heated float zone growth of silicon-comparison to the radiation-heated process [J]. *Journal of Crystal Growth*, 2004, 261(1): 1-4.
- [5] MIIHLBAUER A, MUIZNIEKS A. Interface shape, heat transfer and fluid flow in the floating zone growth of large silicon crystals with the needle-eye technique [J]. *Journal of Crystal Growth*, 1995, 151(1): 66-79.
- [6] LEVENSTAM M, AMBERG G. Experimental and numerical studies of thermocapillary convection in a floating zone like configuration [J]. *Journal of Crystal Growth*, 1996, 158(3): 224-230.
- [7] 褚乐平, 马 骏, 刘玉君, 等. 钢板感应加热机理及电磁—热耦合场数值模拟 [J]. *中国造船*, 2005, 46(1): 98-105.
- [8] 魏文亮. 基于 ANSYS 的 MOCVD 反应室的有限元分析 [D]. 西安: 西安电子科技大学长安学院, 2008.
- [9] LIN K, DOLD P. Radiative heat transfer in a resistance heated floating zone furnace: A numerical study with FIDAP [J]. *Crystal Research and Technology*, 2001, 36(7): 629-639.
- [10] TIWARI S, NISHINO K. Numerical study of steady thermocapillary convection in a cylindrical half-floating-zone [J]. *International Journal of Fluid Mechanics Research*, 2010, 37(6): 506-529.
- [11] 王梦文. 磁力联轴器隔离套涡流场与温度场的数值计算 [J]. *机电工程*, 2010, 27(8): 39-47.

[编辑: 洪炜娜]

本文引用格式:

傅林坚, 曹建伟, 沈文杰, 等. 反射环对区熔炉温度场的影响 [J]. *机电工程*, 2014, 31(1): 62-66.

FU Lin-jian, CAO Jian-wei, SHEN Wen-jie, et al. Influence of reflection ring on temperature field of float-zone furnace [J]. *Journal of Mechanical & Electrical Engineering*, 2014, 31(1): 62-66.

《机电工程》杂志: <http://www.meem.com.cn>