

國立交通大學

機械工程學系

碩士論文

數值模擬柴氏長晶法之熱流場與氧濃度分佈
Simulation of Thermo-Fluid Flows and Distributions
of Oxygen Concentration in CZ Crystal Growth

研究生：陳彥志

指導教授：陳慶耀 博士

中華民國一百零一年七月

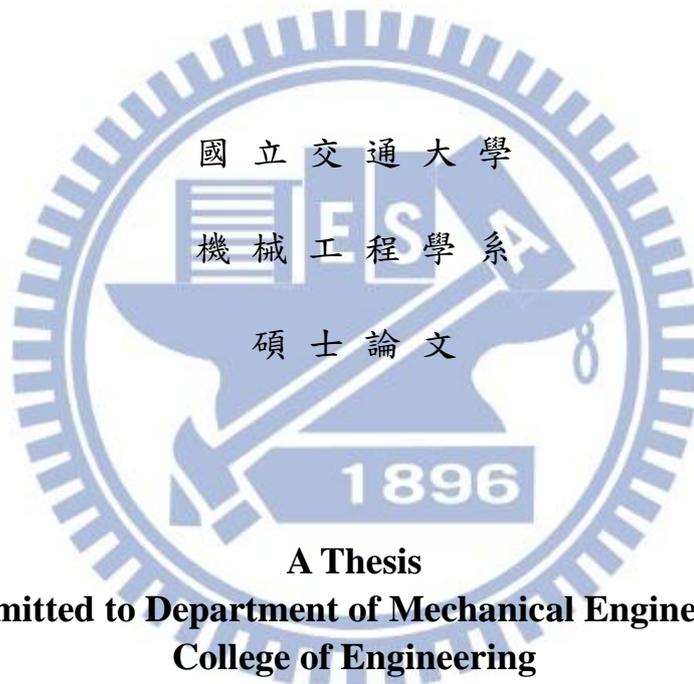
數值模擬柴氏長晶法之熱流場與氧濃度分佈
**Simulation of Thermo-Fluid Flows and Distributions of Oxygen
Concentration in CZ Crystal Growth**

研究生：陳彥志

Student：Yen-Chih Chen

指導教授：陳慶耀

Advisor：Ching-Yao Chen



A Thesis
Submitted to Department of Mechanical Engineering
College of Engineering
National Chiao Tung University
in Partial Fulfillment of The Requirements
for the Degree of
Master of Science
in
Mechanical Engineering
July 2012
Hsinchu, Taiwan, Republic of China

中華民國一百零一年七月

數值模擬柴氏長晶法之熱流場與氧濃度分佈

學生:陳彥志

指導教授:陳慶耀

國立交通大學機械工程學系碩士班

摘要

本研究以商用軟體 CGSim 作柴氏長晶法之動態模擬，以及晶爐內的氧濃度分佈。動態長晶的研究將比較模擬和實際測量之晶身長度的變化，氧濃度則探討在熔湯內部及氣體流場的分佈現象。網格繪製皆採用二維軸對稱，統御方程式包含連續方程式、動量方程式、能量方程式及質傳方程式。柴氏長晶法過程非常複雜，液固界面形狀、熱流場及氧濃度分佈難以觀察，若能將長晶之物理參數搭配電腦模擬，便可及早推估長晶過程中熱流場與雜質濃度場之變化。除了 CGSim 之外，亦利用商用軟體 Fluent 做初步的熱流場模擬。

關鍵字：CGSim、柴氏長晶法、動態長晶、Fluent、氧濃度

Simulation of Thermo-Fluid Flows and Distributions of Oxygen Concentration in CZ Crystal Growth

Student: Yen-Chih Chen

Advisor: Dr. Ching-Yao Chen

Department of Mechanical Engineering
National Chiao Tung University

ABSTRACT

This study outlines the dynamics of CZ crystal growth and oxygen concentration by simulation of commercial software CGSim. The dynamics of CZ crystal growth are illustrated by the influence of the heater and the pull velocity, and the discussions on the oxygen concentration involve in silicon melt and gas flow distributions. The meshes of the system are constructed in 2D-axisymmetric model. The governing equations include continuity equation, momentum equation, energy equation, and mass transfer equation. Due to the complication of the CZ crystal growth process, it is difficult to observe the thermo-fluid flow field and oxygen concentration. By utilizing the simulation results, we can predict and estimate the variation of the thermo-fluid flows field and oxygen concentration. In addition to the simulation of CGSim, we also use the other commercial software Fluent to simulate the thermo-fluid flows field.

誌謝

這篇論文能順利完成首先要感謝我的指導老師-陳慶耀教授。感謝老師在研究上給予的協助，當我遇到困難時指點我前進的方向，並教導我們學習的態度，僅此表示萬分的感謝。還要感謝口試委員葉俊良教授與許立傑教授在百忙之中撥空前來給與指正本文要改善的疏失，使得本論文更趨於完善。

此外要感謝彥宏、裕盛、聖焱、合慶諸位博班學長在研究上提供的寶貴意見，以及柏瑋、啟鳴、佳芬、文良、杰民、國安、世聰等諸位碩班學長姊在我剛進實驗室時給予我的幫助，同窗好友育辰、隆福、定弘，很高興能和你們一起進複雜性流體實驗室共渡兩年的求學生涯，還要謝謝開俊、皓中、佩玲學弟妹們幫忙分擔實驗室的業務，這兩年在複雜性流體實驗室所渡過的時光我終生難忘。

最後我要感謝永遠支持我的家人，爸爸、媽媽謝謝你們提供給我衣食無缺的生活，讓我能全心全力專注於研究工作，除此之外也要感謝熱流應用實驗室的各位，以及一路從交大機械系陪伴我到研究所的各位同學，感謝你們增添我學習的色彩。

目 錄

中文摘要	i
英文摘要	ii
誌謝	iii
目 錄	iv
圖目錄	vi
表目錄	ix
符號說明	x
第一章 緒 論	1
1.1 前言	1
1.2 柴氏單晶生長法簡介	2
1.3 文獻回顧	4
1.4 研究動機	7
第二章 物理模型與系統描述	13
2.1 分析假設	13
2.2 矽熔湯流動現象	14
2.3 長晶過程熱傳現象	17
2.4 熔湯內之氧元素	17
2.5 統御方程式	18

2.6 邊界條件	20
第三章 數值方法	26
3.1 前言	26
3.2 液固界面計算	28
3.3 收斂條件	30
第四章 結果與討論	35
4.1 動態長晶模擬	36
4.1.1 同時設定加熱器功率與晶棒拉速	37
4.1.2 只設定加熱器功率	38
4.1.3 只設定晶棒拉速	38
4.2 柴氏長晶熱流場模擬	39
4.2.1 氣體流場	40
4.2.2 溫度場	40
4.2.3 矽熔湯內流場	42
4.3 晶爐內氧濃度分析	42
4.3.1 矽熔湯內氧濃度分佈	43
4.3.2 氣體流場中氧濃度分佈	44
第五章 結論	65
參考文獻	67

圖目錄

圖 1-1 柴氏矽晶爐示意圖	9
圖 1-2 柴氏長晶法流程(a)填料(b)熔化(c)浸入晶種(d)晶冠生長(e)晶身生長(f)尾部生長	10
圖 1-3 傳統柴氏矽晶爐	11
圖 1-4 Purge tube 影響整體流場圖	11
圖 1-5 400mm 晶棒拉速與液固界面形狀	12
圖 2-1 柴氏長晶法熱傳示意圖	24
圖 2-2 熔湯流動型態(a)垂直自然對流(b)水準自然對流(c)晶棒拉速影響的強制對流(d)晶棒旋轉影響的強制對流(e)坩堝旋轉影響的強制對流..	24
圖 2-3 氧於系統中的傳輸示意圖	25
圖 3-1 網格中心點及離散面相關位置示意圖	31
圖 3-2 CGSim 研究流程圖	32
圖 3-3 Fluent 研究流程圖	33
圖 4-1 長晶爐構造與網格示意圖(a)KX150(b)CG6000	46
圖 4-2 a)設定晶棒拉速與加熱器功率之動態長晶過程熱場示意圖(b)液固界面形狀變化趨勢	48
圖 4-3(a)設定晶棒拉速與加熱器功率時晶身長度的變化與時間之關係圖(b)晶身生長速度與時間之關係圖	49

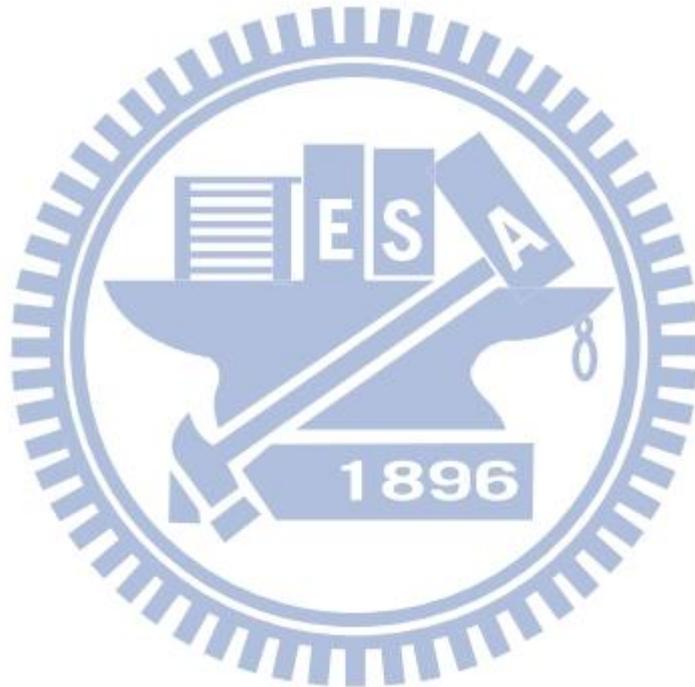
圖 4-4(a)設定加熱器功率之動態長晶過程熱場示意圖(b)液固界面形狀變化趨勢	50
圖 4-5(a)設定加熱器功率時晶身長度變化與時間之關係圖(b) 晶身生長速度與時間之關係圖	51
圖 4-6(a)設定晶棒拉速之動態長晶過程熱場示意圖(b)液固界面形狀變化趨勢	52
圖 4-7(a)設定晶棒拉速時晶身長度變化與時間之關係圖(b) 晶身生長速度與時間之關係圖	53
圖 4-8 加熱器功率隨拉晶時間變化圖	54
圖 4-9 CGSim 網格示意圖	55
圖 4-10 Fluent 網格示意圖	55
圖 4-11 氣體流線示意圖(a)Fluent(b)CGSim	56
圖 4-12 矽熔湯內部流線示意圖(a)Fluent(b)CGSim.....	56
圖 4-13 晶爐徑向速度(m/s)分佈圖(a)Fluent(b)CGSim.....	57
圖 4-14 晶爐軸向速度(m/s)分佈圖(a)Fluent(b)CGSim.....	58
圖 4-15 晶爐溫度場(K)分佈圖(a)Fluent(b)CGSim.....	59
圖 4-16 矽熔湯與矽晶棒溫度(K)分佈圖(a)Fluent(b)CGSim.....	60
圖 4-17 液固介面圖(K)分佈圖(a)Fluent(b)CGSim.....	60
圖 4-18 矽熔湯內徑相速度分佈(m/s)(a)Fluent(b)CGSim.....	60

圖 4-19 矽熔湯內軸相速度分佈(m/s)(a)Fluent(b)CGSim.....	61
圖 4-20 Prandtl number 與液固界面關係圖	62
圖 4-21 KX150 架構與網格示意圖	62
圖 4-22 氧化物濃度分布圖(a)氣體流場(b)熔湯內.....	63
圖 4-23 液固界面之氧濃度分佈	64
圖 4-24 氣體流場之徑相速度分佈圖(m/s)	64



表目錄

表 3-1 材料參數 35



符號說明

文字符號

c_p	比熱
D_{eff}	有效擴散係數
d	坩堝直徑
g	重力常數
H	熔湯深度
J	感應電流
M	分子量
P_0	參考壓力
R_g	理想氣體常數
T	溫度
C_o	氧之質量濃度

希臘符號

β	熱膨脹係數
ρ_0	參考質量密度
ρ	質量密度
τ	應力張量

μ_{eff}	有效黏滯係數
ν	動力黏滯係數
λ	熱擴散係數
λ_{eff}	有效熱擴散係數
ω_s	晶棒轉速
ω_c	坩堝轉速
γ	表面張力

無因次參數

Gr	葛拉秀夫數($\beta\Delta TgL^3/\nu^2$)
Pr	普朗特數(ν/α)
Re	雷諾數($\omega_s r^2/\nu_k$)
Ta	泰勒數($2\omega_c h^2/\nu_k$) ²
Ma	馬若哥尼數($\frac{\Delta Td}{\rho\nu_k}(\frac{\partial\gamma}{\partial T})$)



第一章 緒論

1.1 前言

單晶生長在半導體與光電產業中扮演舉足輕重的角色，例如：積體電路、發光二極體和太陽能電池等皆與單晶材料習習相關，目前業界以單晶矽為大宗，高達 98% 的電子元件皆以此為母材。電子元件的良率往往取決於單晶矽的品質，所以在這半導體迅速發展的時代，開發高效率、高品質的單晶矽是不可小覷的環節之一。

現今許多公司以生產大尺寸的矽晶棒為主，晶圓廠從早期的 6 吋演變到今日的 8 吋與 12 吋，而 8 吋與 12 吋晶圓的需求量也隨時代的腳步而大增，兩者之中的使用量又以 8 吋晶圓為最高。單晶矽由特定的晶體生長法而得，再經製程加工變成矽晶圓，目前最常用的晶體生長法為柴氏單晶生長法(Czochralski single crystal growth method)。由於電子元件的效能取決於單晶的品質，然而晶體生長過程耗費的成本相當可觀，若只靠實驗方法勢必要投入為數不少的金錢與人力；況且晶體的生長過程假使有參數控制不當，都會對晶圓造成缺陷而大大降低產品的良率，況且目前製程的技術愈來愈精密，尺度已發展至 90 奈米等級，相對矽晶圓品質的要求也水漲船高，所以為求得高品質的單晶矽，除了要有精密的控制設備外，還需透過電腦數值模擬得到較佳的晶爐熱場設計，來降低晶圓缺陷以求改進製程效率。

本研究使用有限體積法進行柴氏長晶法之熱場、流場及氧濃度的穩態模擬研究與分析，以及模擬柴氏法的動態拉晶過程，此方法是以 Basic CGSim 作為計算平台來探討在不同的控制變因下對長晶過程有何影響。

1.2 柴氏單晶生長法簡介

柴氏長晶法又可被稱為 Teal-Little 法，是因 1950 年時貝爾實驗室(Bell Lab.)的 Teal 及 Little [1]兩人將 Czochralski [2]方法用來生長矽及鍺單晶上，並研究拉單晶的方法。當今業界主要使用兩種方法來生長單晶矽，分別為柴氏長晶法(CZ)及浮融法(Float Zone)，前者就佔了 85%左右，是因 CZ 法有兩大優點，其一為比 FZ 法更易生長出大尺寸的晶棒，其二它的高含氧量提供了強化晶片及 gettering。柴氏長晶法生長的單晶矽主要是用在低功率的積體電路元件，例如:SDRAM、DRAM、ASIC 等。而 FZ 法生長的單晶用於高功率的電子元件，例如：閘流晶體、電晶體等。

柴氏長晶法屬於熔融液生長法(Melting Growth)的一種，一般工業界使用的長晶爐如圖 1-1 所示，其架構可分為控制系統、矽晶爐體、加熱器、晶棒/坩鍋拉升旋轉機構與氣體壓力控制器等，晶爐上放為氣體進口端，可在此通入氬氣作為晶爐內部之工作流體。由於 CZ 法生長過程牽涉到液固相變化的問題，熔融液在特定的條件下會沿晶種方向凝固，逐漸形成規則性的原子堆積，進而得到高品質的單晶結構。藉由晶種或自發成核的繼續生長，液固介面需為過冷的狀態，其餘部分為過熱的狀態。結晶所釋放的潛熱 (latent heat) 會藉由熱傳導沿著晶棒傳輸；晶棒表面藉熱對流及熱輻射將熱量散失到外圍。

長晶過程內容非常繁雜，每個步驟各有不同的控制參數會影響到晶棒的品質，其過程可分為加料、熔化、晶頸生長、晶冠生長、晶身生長和尾部生長，如圖 1-5 所示。以下為各步驟之細部介紹:

(1) 加料(Stacking Charge)

將多晶矽原料及摻雜物(dopant)放入石英坩堝內，此過程中若填

裝不當，會造成熔化時的困難。內部雜質的種類依電阻為 N 或 P 型而定，P 型的攙雜物為硼，N 型則為銻、砷及磷。

(2) 熔化(Meltdown)

加料過程後晶爐必須關閉並抽真空，使其維持在一定壓力範圍。接著開啟石墨加熱器，加熱至熔化溫度(1685K)以上。在此過程中最重要的控制參數為加熱器功率大小，功率過大雖然可以縮短熔化時間，但容易對坩堝壁造成損傷；若功率過小，相對會耗費較多的時間在熔化過程，導致產能下降。

(3) 晶頸生長(Neck Growth)

當矽熔湯溫度較為穩定之後，將晶種慢慢浸入矽熔湯中。因為矽熔湯和晶種接觸會有熱應力的效應，這時晶種會產生差排，這些差排可藉由此步驟來消除。因為差排線通常和生長軸成一個交角，只要晶頸夠長差排便能長出晶體表面。一般而言長出來的晶頸直徑大小為 4~6mm，長度約和晶棒長度相等。晶頸的直徑愈小，愈容易消除差排。但晶頸的直徑過小，可能會無法承受晶棒本身的重量而斷裂。

(4) 晶冠生長(Crown Growth)

晶頸長完後須降低溫度與拉速，使得晶體直徑漸漸增大致所需的尺寸。此步驟最重要的控制參數為直徑的增加速率(即晶冠的角度)，晶冠的角度與形狀會影響到液固介面形狀與晶棒品質。若降溫過快液面會呈現過冷的情況，晶冠容易變形導致出現差排。

(5) 晶身生長(Body Growth)

長完晶肩與晶頸之後，藉由參數控制使晶棒直徑維持一定長度，這段直徑固定的區間稱為晶身。因業界使用的矽晶片取自於晶身，所

以此階段為長晶過程中最重要的步驟。許多控制參數皆會影響到晶棒的品質。例如:拉速大小會影響到晶棒直徑之均勻度;晶種與坩堝的轉速會影響到矽熔湯內的氧濃度分布。在此過程中，因為液面會逐漸下降且加熱功率持續上升，晶棒的散熱速率會隨其長度的增加而遞減。

(6) 尾部生長(Body Growth)

晶身長完後將晶棒直徑慢慢縮到一個尖點仔與液面分離，此舉是因為如果長完晶身就立刻與液面分離，會出現熱應力效應使得晶棒出現差排與滑移線，上述過程即為尾部生長。

1.3 文獻回顧

半導體的效率取決於晶體的品質，然而在柴氏長晶法過程裡，差排(Dislocation)會出現於晶體中。西元 1958 年，Dash [3]發明一種可以消除差排的方法(Dash Technique)，他是在晶體生長前期縮小晶頸來消除差排，由於這種零差排(Dislocation-free)的方法，才使得未來能發展出大尺寸的晶棒。1960 年，Jack Kilby 發明出第一顆鍺電晶體，半導體也從此迅速發展，緊接著矽取代鍺成主要基材，伴隨此時建立的柴氏長晶法的穩定機制，加上矽具有霍爾效應、熱電效應等，矽逐漸成為半導體業不可或缺的材料之一。液固界面形狀對流場的影響、熔湯傳導機制、晶體組成之探討及 Hot zone 的設計改善等，都明顯改善晶體在品質上的要求，在生長部分目前也朝向全自動化來發展。隨著晶棒尺寸增大，熔湯內流場也愈來愈複雜，使得控制參數更為困難，因此近二十年來有愈來愈多的學者投入柴氏長晶法的熱流場電腦數值模擬，模擬坩堝內矽熔湯流動行、熔湯氧濃度分佈及整體熱場的傳遞模式。

西元 1986 年時，Derby 與 Brown [4, 5]除了利用有限元素法模擬柴氏法生長單晶矽時的晶爐內之熱傳行為，還探討固液界面形狀與熔湯內流動情形的關聯性。同年 Dupret 等人 [6]針對柴氏矽晶爐體作全域熱傳行為的分析(Global Heat Transfer)，使用有限元素法研究柴氏矽晶爐的整體熱場分佈。

1997 年 Dupret 等人 [7, 8]模擬暫態的柴氏長晶系統，並於文獻中提高計算時的速度，也更深入探討晶爐內熱輻射與熱傳導等現象，在這些模擬暫態系統的文獻中，皆提出一個重要的概念，就是晶體生長為一暫態行為，隨著時間與拉速的變化，晶棒的尺寸也隨之改變，同時牽動了爐體內的熱傳行為，因此若要真實逼近爐體內的熱場分佈，還是要考慮成暫態的系統較為合理。

晶棒與矽熔湯交接之液固界面形狀會影響矽晶圓的品質，倘若形狀為凸形(convex)或凹形(concave)，都會對晶棒造成缺陷、差排或是氣泡，所以液固界面的現象對長晶有很大的影響力，1996 年 Wu [9]等人提出自然對流、晶棒與坩堝的旋轉對液固界面的影響，並解釋當增加晶棒轉速會產生凹型；當自然對流增加時，液固界面會產生凸型。

在 2000 年時，Brown 學者等人 [10]模擬柴氏生長矽單晶，分別使用有限元素法(FEM)計算熱傳模式和有限體基法(FVM)計算矽熔湯內的紊流模式，使用此方法可以分割整體熱場與熔湯流場，使得較複雜的熔湯流場得到更高的精確度，也能同時計算熔湯內的紊流行為，藉此得以分析紊流對於熔湯的熱場分佈所造成的影響，還進一步探討紊流下熔湯內氧析出物的分佈是否有改變。

在 2001 年，Tankano 學者等人 [11]利用 FEMAG 軟體，模擬拉

升不同晶棒直徑和熱應力的關係，並加以解釋當晶棒直徑愈大時，熱應力也會隨之增加，進而影響到液固界面的形狀，造成性質的不穩定。此外，模擬在氬氣流道上加裝一 Purge tube 可以減少渦流的產生，如圖 1-4。

當矽熔湯內熱對流情形過於劇烈時，容易導致液固界面出現不穩定性。由於大部分的金屬與半導體溶液都具有高導電性，所以適當施加磁場，可以抑制自然對流的程度，避免紊流的發生。在 2003 年，Li 和 Ruan 等人 [12] 針對柴氏長晶法施加軸向磁場，分別施與不同磁場強度對液固界面、氧含量及溫度梯度等參數進行分析。

利用柴氏長晶法(Czochralski method)生長晶棒的過程中，當晶棒直徑提升到300公厘或450公厘時，坩堝內矽熔湯的自然對流所造成的效應是工程師必需注意的課題 [13]。若使用不同類型的穩態直流電(direct current, DC) 磁場 (如垂直式、水平式或者cusp式) 於長晶製程中，可以改變矽熔湯的對流熱質傳現象與流場特性。例如，當磁場強度 B 大於0.014T時，矽熔湯的流動會形成層流 [14]；當晶棒長度超過300公厘時，不加磁場效應的話矽熔湯流動會變成紊流 [15]。因此，使用磁場來控制矽熔湯內的自然對流效應，再進一步探討最佳的液固界面形狀與 V/G 值，是較有效率的方法(V 為晶棒拉速， G 為晶棒溫度梯度)之一。在2007年，Kalaev [21]學者模擬大尺寸晶棒400mm，同時外加cusp磁場和橫向磁場，發現能有效抑制熔湯內的自然對流程度，探討有無開起磁場之流場、溫度場、固液界面形狀及 V/G 的好壞，如圖1-5。

然而長晶設備及磁場裝置的開發所需的成本相當昂貴，而且在實際製程中液固界面也不易觀測。在過去數十年間，數值模擬已變成一

種用來降低成本，提供相關物理現象與定性分析的利器。因此，許多關於使用磁場影響矽熔湯流動與溫度分佈，進而預測晶棒品質的穩態與非穩態研究已陸續發表出來 [16-30]。

2010 年本實驗室的學長陳柏瑋[33]利用 Basic CGSim 作柴氏長晶法的熱流分析，研究內容之一有探討拉速對液固界面的影響，適當增加拉伸速度有助於減緩液固界面的高低差，如圖 1-6。

1.4 研究動機

伴隨半導體業崛起，矽晶圓的需求量也水漲船高，由於矽晶圓純度會直接影響到電子元件的品質與良率，眾多大廠對矽晶圓品質的要求也愈來愈嚴格，電阻率的均勻度、氧及含碳量的均勻度和金屬不存物的純度等都是著重的項目。目前已有許多學者投入柴氏長晶法的研究，也累積了相當多的經驗，雖然晶棒尺寸與品質上已有相當顯著的進步，但尺寸愈大操作限制也愈困難，因此還需藉由模擬的方法來幫助我們釐清完整的生長機制，使單晶矽在製程上不會耗費過多的成本，由於實際的拉晶過程中，晶爐與晶棒、矽溶湯、坩堝之熱場（熱歷程）和晶爐內氧濃度分佈以及固液界面等情形難以加以觀察，加上製程時間相當冗長，若能將長晶之物理參數搭配電腦模擬，可以及早掌握長晶過程中熱流場。

目前業界廣泛使用的專業長晶軟體 CGSim 在諸多設定所受限制較多，因此本文除了用商用軟體 CGSim 進行柴氏長晶法之動態長晶模擬與穩態之氧濃度分析之外，也嘗試用 Fluent 作柴氏長晶法之熱流場穩態模擬，並和 CGSim 的模擬結果作比較。長晶過程耗費成本相當昂貴且控制參數非常複雜，晶爐的熱場分佈會直接影響晶棒品質，

為了降低晶圓缺陷並提高良率，除了要知悉長晶過程的生長機制，事前還須用數值模擬來設計長晶爐的控制系統，以利生產低缺陷密度及高良率的晶圓。但除了熱流場的影響之外，濃度場也是不可忽視的課題之一，實際長晶過程中石英坩堝(SiO_2)會析出氧元素到矽熔湯中，有一些氧會慢慢溶解在矽熔湯之中，也有小部分的氧會由液固界面處進入固體晶棒中[34]，但絕大部分的氧會由矽熔湯表面以 SiO 形態揮發掉。若留在矽溶湯中的氧析出物過多，便會影響晶棒之機械性質而降低良率，氧在固液界面之間會導致本質點缺陷再結合過程，會決定殘留於晶棒之點缺陷型態與濃度，然而氧濃度分佈量測不易，若能藉由數質模擬先來分析熔湯內部的氧含量，便可對製程有良好的助益。



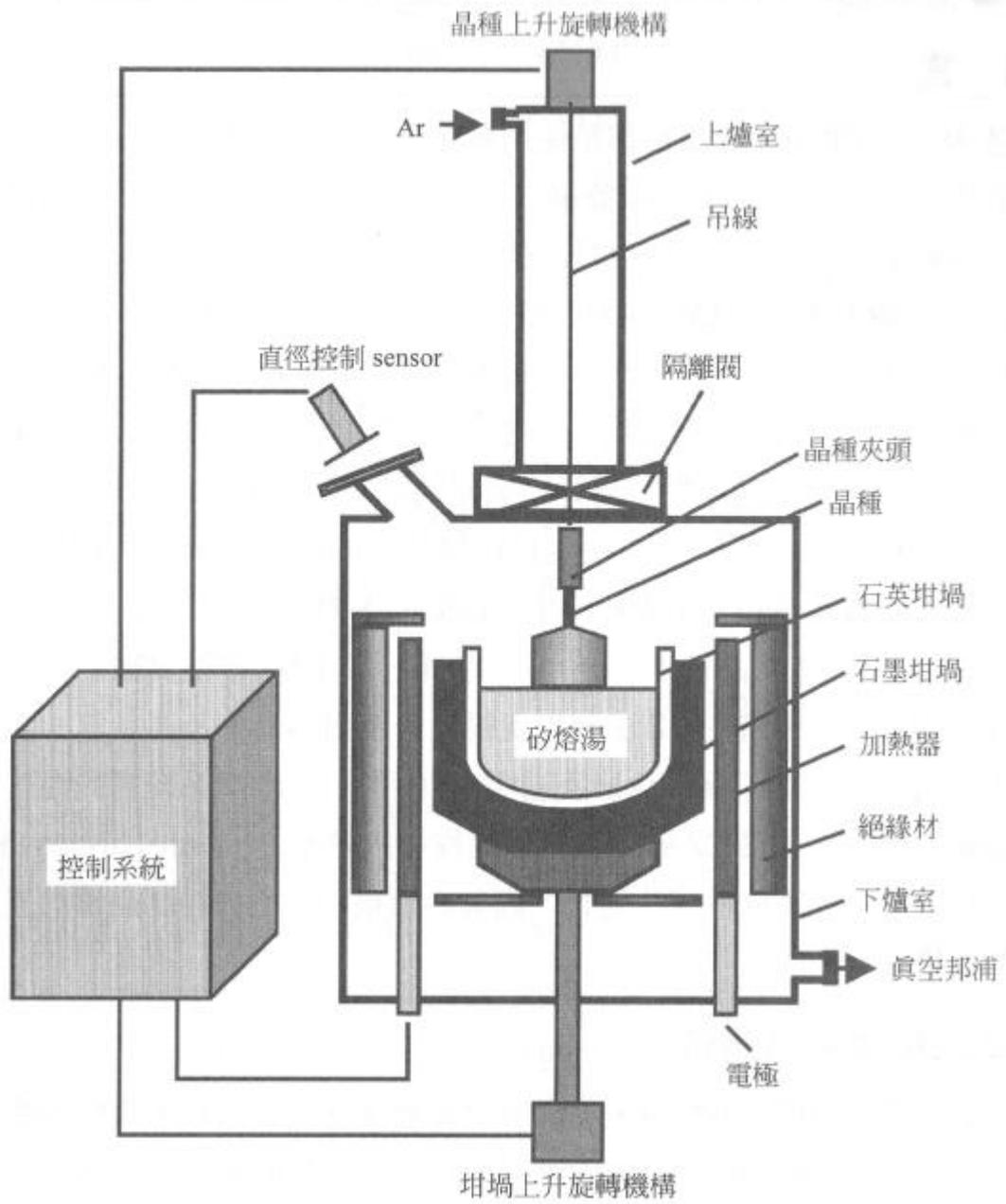


圖 1-1 柴氏矽晶爐示意圖[32]

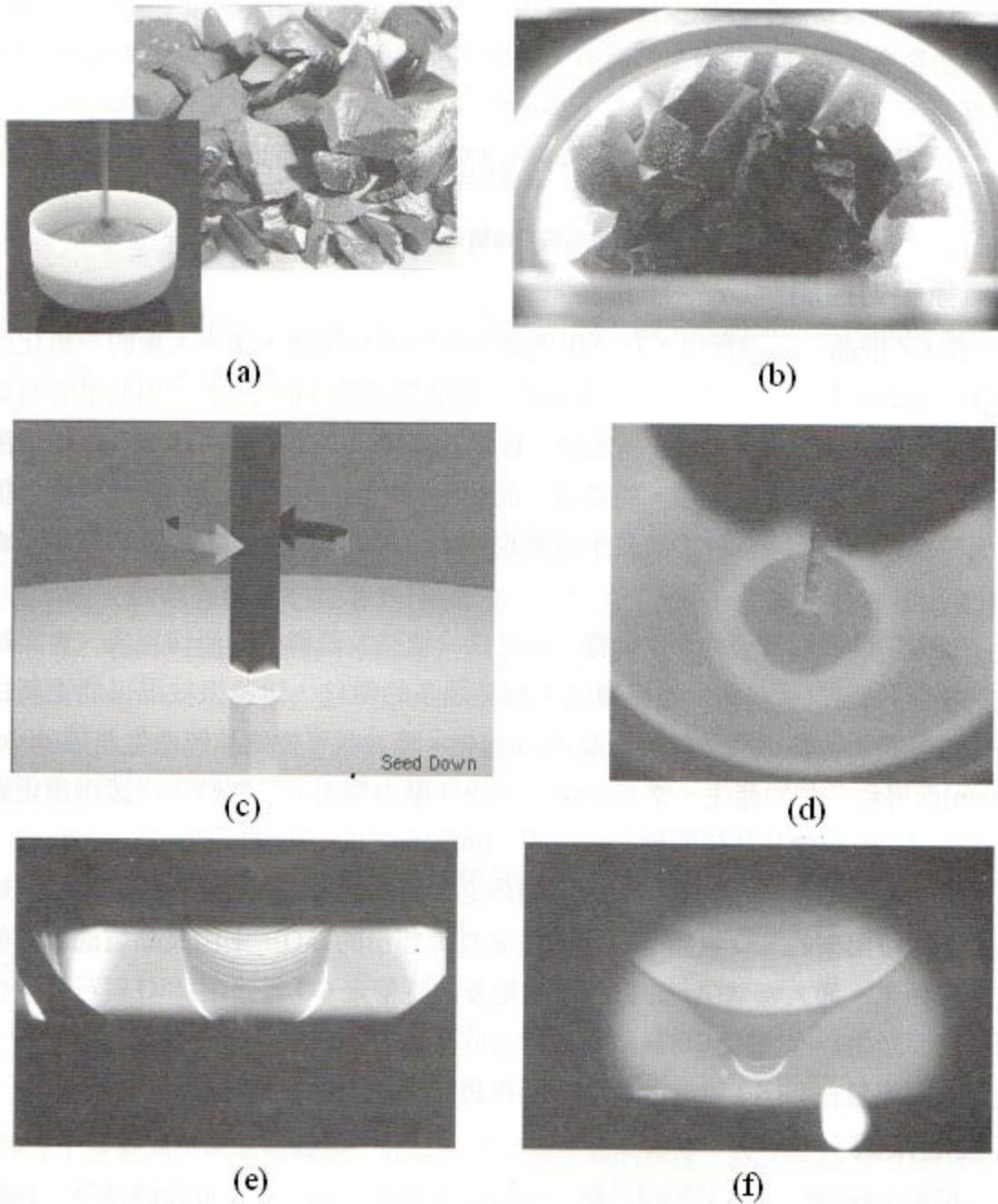


圖 1-2 柴氏長晶法流程(a)填料(b)熔化(c)浸入晶種(d)晶冠生長(e)晶身生長(f)尾部生長[32]

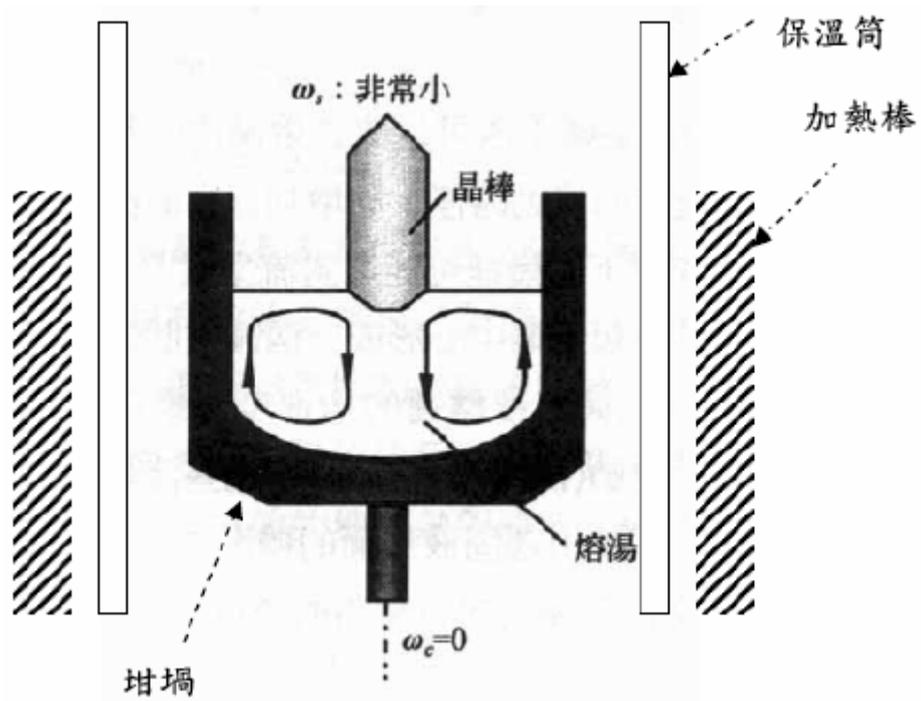


圖 1-3 傳統柴氏矽晶爐[32]

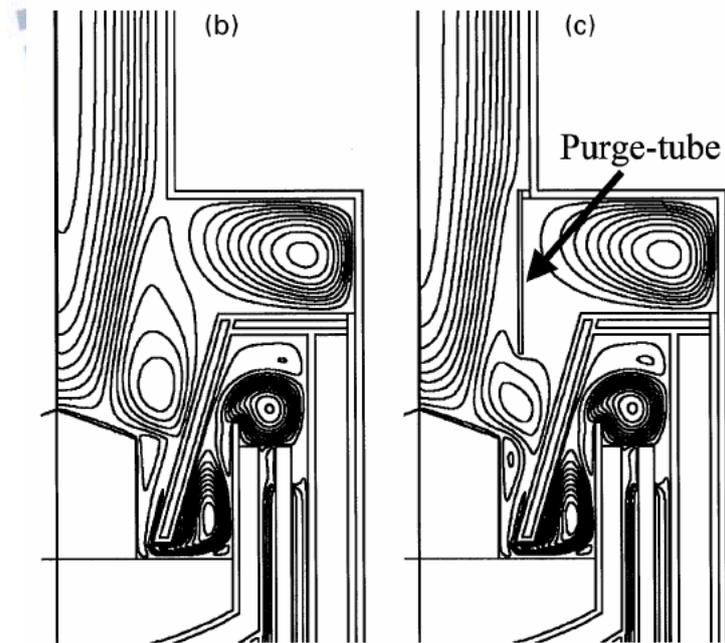


圖 1-4 Purge tube 影響整體流場圖[11]

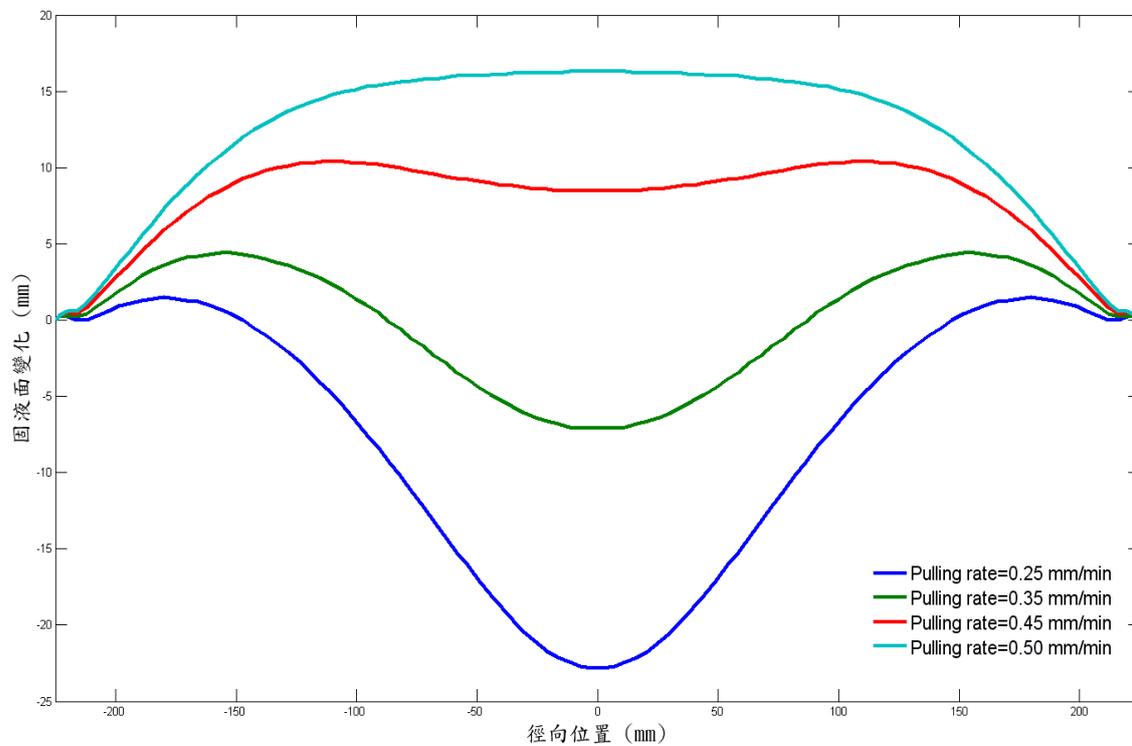


圖 1-5 400m 晶棒拉速與液固界面形狀[33]

第二章 物理模型與系統描述

就晶爐內熱場分析而言，石墨加熱器藉熱輻射效應將熱量傳遞到坩堝，坩堝再藉熱傳導來加熱矽熔湯，矽熔湯因溫度差使其內部產生密度梯度，進而產生自然對流的現象，若自然對流過於旺盛，此時可藉由坩堝的旋轉產生強制對流來壓抑自然對流的效應。晶棒內部的熱傳輸則是靠熱傳導；從晶棒表面及熔湯液面散失到外圍的熱則藉由熱輻射與熱對流作用，圖 2-1 為爐體熱傳示意圖，晶爐內部的溫度分佈會影響到最後長晶的結果，例如：液固界面形狀、晶棒差排的有無與氧濃度分佈。本文主要有三大研究方向，分別為動態長晶模擬、熱流場穩態模擬以及穩態氧濃度分佈，內部之系統描述如以下所示。

2.1 分析與假設

(1) 動態拉晶

- (1) 二維軸對稱系統
- (2) 長晶過程為暫態分析
- (3) 不考慮氫氣流動

(2) 柴氏長晶穩態分析

- (1) 熱傳過程左右對稱，設為二維軸對稱系統
- (2) 工作流體設定為不可壓縮流體
- (3) 長晶過程為穩態分析

(3) 氧濃度分析

- (1) 二維軸對稱穩態分析
- (2) 氫氣為理想氣體
- (3) 氧從石英坩堝壁析出、從矽溶湯表面蒸散

2.2 矽熔湯流動現象

矽熔湯的流動情形不僅會影響液固介面的形狀，還會影響熔湯內濃度分佈以及生成晶棒的品質，流動的形態上主要可分為自然對流與強制對流，其現象如圖 2-2 所示，以下為矽熔湯流場的相關分析。

(1) 自然對流

在一般的柴氏長晶法的系統中，是藉由坩堝的熱傳效應來加熱矽熔湯，所以熔湯外側溫度會比中心軸高，底部比液面高溫，底部較高溫的熔湯因浮力作用往上流動，產生自然對流的現象，其程度大小可由無因次參數 Grashof 常數來判定。

$$Gr = \beta \Delta T g d^3 / \nu^2 \quad (2-1)$$

其中：

β : 熱膨脹係數

ΔT : 溫度差

d: 坩堝直徑

g: 重力常數

Gr 值的物理意義為流場的浮力作用比上黏滯力，所以 Gr 值愈大，流場中的浮力作用就愈明顯，內部引起的自然對流程度較高，反之 Gr 值愈小矽熔湯黏滯力愈明顯，矽熔湯自然對流的現象愈緩和，就理論而言 Gr 的臨界值約為 10^5 ；然而根據實際的長晶結果，Gr 值達 10^8 左右，若不靠一些強制對流來壓制，矽熔湯的流場很容易出現不穩定性。

根據無因次參數 Pr 值的理論，其物理意義為流體的動量擴散率比上熱擴散率，其數值的大小可以判定流場的熱傳行為是由熱傳導(heat conduction)或熱對流(heat convection)所主導，若 Pr 值愈大熱傳便是由對流效應所主導，反之則為熱傳導。本研究中矽熔湯的運動黏滯係數為 $3.2 \times 10^{-6} \text{ m}^2 / \text{s}$ ，熱擴散係數為 8.338×10^{-4} ，Pr 值約為 3.838×10^{-3} ，所以熔湯的熱傳行為是由熱傳導主導。

$$\text{Pr} = \nu / \alpha \quad (2-2)$$

其中：

ν : 運動黏滯係數

α : 熱擴散係數

(2) 強迫對流

(1) 坩堝旋轉的影響

坩堝的旋轉使得靠近坩堝的熔湯往中心流動，坩堝的旋轉不只可以改善熔湯內的熱對稱性，也能使矽熔湯內的流場形成螺旋狀路，加徑向的溫度梯度。由坩堝旋轉所引起的對流程度可由無因次的 Taylor 參數表示：

$$\text{Ta} = (2\omega_c h^2 / \nu)^2 \quad (2-3)$$

其中：

h: 熔湯深度

ω_c : 坩堝轉速

(2) 晶軸旋轉的影響

晶軸旋轉會使緊臨液固界面下的熔湯往上流動，再藉由旋轉引起的離心力作用往外側流動，造成強制對流區。由晶軸旋轉引起的熔湯擾動程度，可由無因次的 Reynolds 常數表示：

$$Re = \omega_s r^2 / \nu \quad (2-4)$$

其中：

ω_s : 晶棒轉速

r : 晶棒半徑

ν : 運動黏滯係數

(3) 表面張力對流

因液面的溫度梯度，所造成表面張力的差異進而引起的對流，稱為表面張力對流。對流程度的大小可由無因次的 Marangoni 常數表示：

$$Ma = \frac{\Delta T d}{\rho \nu} \left(\frac{\partial \gamma}{\partial T} \right) \quad (2-5)$$

其中：

$\left(\frac{\partial \gamma}{\partial T} \right)$: 表面張力的溫度係數

而自然對流與表面張力對流的相對大小，可由動態的 Bond 常數表示

$$Bo^d = \frac{Ra}{Ma} = \frac{g \rho \alpha d^2}{(\partial \gamma / \partial T)} \propto d^2 g \quad (2-6)$$

其中：

$$Ra = Pr \times Gr \quad (2-7)$$

由上式可知， $Bo^d \propto d^2 g$ ，也就是說在地表上較大的長晶系統主要是受自然對流的影響。而表面張力對流則在小長晶系統及低重力狀態，才會突顯其重要性。

2.3 長晶過程熱傳現象

長晶爐內部的熱傳輸主要有三種模式，即傳導(conduction)、對流(convection)與輻射(radiation)，固體內部的熱傳導現象例如：石英與石墨坩堝的熱傳遞行為，晶棒內部的熱傳輸。熱對流主要發生於矽熔湯內部，由於熔湯內的底部溫度比液面高，鄰近坩堝內壁的熔湯溫度高於中心軸，內部溫度的差異使密度發生變化，便產生自然對流效應。石墨加熱器因熱輻射作用將熱傳遞至坩堝，坩堝再藉熱傳導將熱傳遞致熔湯。長晶過程為高溫狀態，因此熱輻射作用是影響熱場分佈最重要的因素之一，例如：晶身表面、熔湯液面與固體元件的表面，皆會有熱輻射效應。

2.4 熔湯內之氧元素

在長晶製程中，氧元素由石英坩堝析出至矽溶湯內，大部分的氧會從矽溶湯液面蒸發，氧元素於系統中傳輸路徑如圖 2-3，若留在矽溶湯中的氧析出物過量，可能會吸附過多的雜質而影響固體晶棒之機械性質。此外，氧在固液界面之間會導致本質點缺陷再結合過程，會決定殘留於晶棒之點缺陷型態與濃度。氧在系統中主要的傳輸途徑為以下四步驟：

- (1) 石英坩堝壁與矽溶湯間的熔解反應。
- (2) 由石英坩堝壁產生的氧原子，受自然對流攪拌作用而均勻分佈於矽溶湯內。
- (3) 隨對流運動而傳輸到矽溶湯液面的氧原子，會以 SiO 揮發至氫氣流場當中。
- (4) 固液界面前端擴散邊界層的氧原子，藉由偏析現象進入晶棒中。

2.5 統御方程式

本研究在模擬動態拉晶、柴氏長晶穩態分析和氧濃度分析時，若有考慮氫氣的流動，會視其為理想氣體，所使用的統御方程式有連續方程式、動量方程式、能量方程式和質傳方程式，由於本文包含穩態及暫態之模擬工作，若為穩態則對時間偏微分為零，方程式如以下所示。

1. 連續方程式：

當有考慮晶爐內部之氫氣流場時，本文視氫氣為理想氣體，則連續方程式可由以下表達。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (2-8)$$

$$\rho = \frac{p_0 m}{R_g T} \quad (2-9)$$

其中：

\vec{u} ：氫氣流速

P_0 ：參考壓力

$$R_g = 8314 \frac{J}{\text{kmol} \cdot K}$$

2. 動量方程式：

$$\frac{\partial (\rho \vec{u})}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \rho \vec{u} = -\nabla p + \nabla \cdot \vec{\tau} + (\rho - \rho_0) \vec{g} \quad (2-10)$$

$$\tau_{ij} = \mu_{\text{eff}} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu_{\text{eff}} \delta_{ij} \nabla \cdot \vec{u} \quad (2-11)$$

$$\mu_{eff} = \mu_{molecular} + \mu_t \quad (2-12)$$

3. 能量方程式:

$$\frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho c_p \vec{u} T) = \nabla \cdot (\lambda_{eff} \nabla T) - \nabla \cdot \vec{q}_{rad} \quad (2-13)$$

$$\vec{q}_{rad}(r) = \int_0^\infty \int_{4\pi} \Omega I_\lambda(r, \Omega) d\Omega d\lambda \quad (2-14)$$

$$\lambda_{eff} = \lambda + \frac{\mu_t}{Pr_t} \quad (2-15)$$

擴散方程式:

$$\frac{\partial(\rho \phi_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \phi_i) = \nabla \cdot (D_{\phi_i, eff} \nabla \phi_i) + S_{\phi_i} \quad (2-16)$$

$$S_{\phi_i} = S_{\phi_i}^u + \phi_i S_{\phi_i}^P \quad (2-17)$$

其中:

$D_{\phi_i, eff}$: 有效擴散係數

紊流動能方程式(one-equation):

$$\frac{dk}{dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k - \bar{\varepsilon} \quad (2-18)$$

其中:

$$P_k = 2\nu_t S^2 : \text{來源項} \quad (2-19)$$

$$\bar{\varepsilon} = \frac{k^{3/2}}{l \cdot F_\varepsilon} : \text{耗散項} \quad (2-20)$$

$$F_\varepsilon = f(\text{Re}_y) \quad (2-21)$$

$$\text{Re}_y = \frac{\sqrt{k} y}{\nu} \quad (2-22)$$

4. 質傳方程式：

(1) 從石英坩堝析出至矽熔湯當中之氧濃度

$$\nabla \cdot (\rho \bar{u} C_o) = \nabla \cdot (D_o \nabla C_o) \quad (2-23)$$

其中：

D_o : 氧的有效擴散係數

C_o : 氧質量濃度

(2) 從矽熔湯表面揮發至氣體流場之氧化物濃度

$$\nabla \cdot (\rho \bar{u} C_{SiO}) = \nabla \cdot (D_{SiO} \nabla C_{SiO}) \quad (2-24)$$

其中：

D_{SiO} : SiO 的有效擴散係數

C_{SiO} : SiO 的質量濃度

2.6 邊界條件

本研究在模擬時採用的圖形皆為二維軸對稱，三項模擬工作中之系統內的邊界條件設定分別如下：

(1) 流場邊界條件

1. 動態拉晶：

(1) 無氣體進口與出口，即忽略氬氣的影響

(2) 晶棒為可移動固體表面

2. 柴氏長晶法之熱流場與氧濃度穩態分析：

(1) 晶爐入口端設定為氣體進口 (velocity inlet)

- (2) 晶爐出口端設定為氣體出口(outlet)
- (3) 固體表面設定為無滑移條件(no-slip condition)

(2) 熱場邊界條件

- (1) 爐體外部皆定溫為 300K
- (2) 爐體表面皆設為絕熱(insulation)狀態
- (3) 熱傳經固體元件表面之邊界條件

$$\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial n}\right)_1 = \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial n}\right)_2 \quad (2-25)$$

$$(T)_1 = (T)_2 \quad (2-26)$$

- (4) 考慮熱輻射效應時石墨加熱器到石墨坩堝熱傳的邊界條件為

$$\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial n}\right)_{opaque} = \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial n}\right)_{transparent} + (\sigma_b \varepsilon_{rad} T_w^4 - \varepsilon_{rad} Q_{rad}^{in}) \quad (2-27)$$

$\sigma_b = 5.67 \cdot 10^{-8} W / (m^2 K^4)$: 波茲曼常數

其中:

ε_{rad} : 放射率

T_w : 壁面溫度

Q_{rad}^{in} : 進輻射熱通量

- (5) 熱傳經矽熔湯或晶棒與空氣接觸表面和邊界條件為

$$\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial n}\right)_1 = \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial n}\right)_2 + (Q_{rad}^{in} - Q_{rad}^{out})_1 - (Q_{rad}^{in} - Q_{rad}^{out})_2 \quad (2-28)$$

$$(Q_{rad}^{in})_{1,2} = \int_{k_\lambda} q_{\lambda 1,2}^{in}(r, z) d\lambda ; (Q_{rad}^{out})_{1,2} = \int_{k_\lambda \neq \infty} q_{\lambda 1,2}^{out}(r, z) d\lambda \quad (2-29)$$

(6)液固界面可由晶棒生長速度與熱平衡方程式得以下熱平衡邊界條件

$$V_{crys} = \frac{1}{|n_x| \rho_{crys} \Delta H} \left(\lambda_{crys} \frac{\partial T_{crys}}{\partial n} - \lambda_{melt} \frac{\partial T_{melt}}{\partial n} + (Q_{rad}^{in} - Q_{rad}^{out})_{crys} - (Q_{rad}^{in} - Q_{rad}^{out})_{melt} \right) \quad (2-30)$$

其中：

ΔH 為結晶熱

λ 為熱傳導係數

r 為晶體生長速度。

(3)質傳之邊界條件

在此針對液固界面、矽熔湯與石英坩堝接觸之界面以及熔湯與氬氣接觸之液面定義氧濃度之邊界條件，根據參考文獻[34]再帶入參數後，邊界條件的設定方法如下所示。

(1)在固液界面考慮氧原子因偏析進入晶棒，即矽熔湯進入液固界面的氧濃度和從液固界面進入固體晶棒的氧濃度相等

$$D_o \frac{dC_o}{dn} = V_{crys} \rho C_o (1 - k_o) \quad (2-31)$$

其中：

V_{crys} :晶棒生長速度

ρ : 矽溶湯密度

k_o : 氧的偏析係數

- (2) 石英坩堝析出氧元素到矽溶湯當中，因此在坩堝與矽溶湯接觸面之氧原子濃度可由以下關係表示

$$C_o = \frac{m_o}{m_{Si}} \times 2.4 \times 10^{-4} \exp\left(\frac{-3.2 \times 10^{-3}}{T}\right) \quad (2-32)$$

其中：

m : 物質分子量

- (3) 矽溶湯內部的氧，大部分會從矽溶湯表面以氫化矽的型態揮發至氣體流場之中，因此矽溶湯與氫氣接觸之液面根據參考文獻可由以下關係式表示

$$C_o = C_{SiO} \left(\frac{m_o}{m_{Si}} \times \frac{m_{Ar}}{m_{SiO}} \times 2.4 \times 10^{-9} \right) \times P_{Ar} \exp\left(\frac{34470}{T} - 17.62\right) \quad (2-33)$$

其中：

P_{Ar} : 氫氣分壓

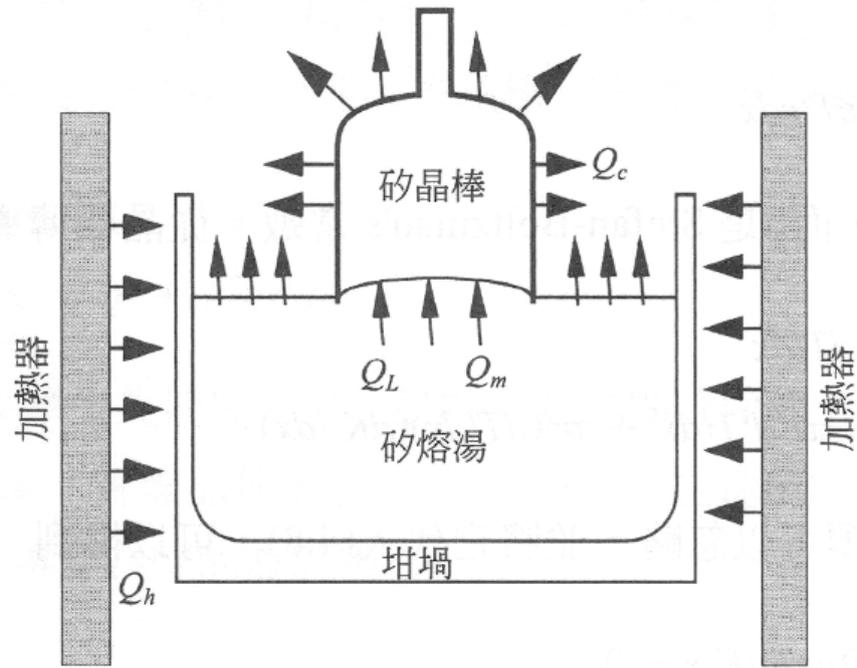


圖 2-1 柴氏長晶法熱傳示意圖[32]

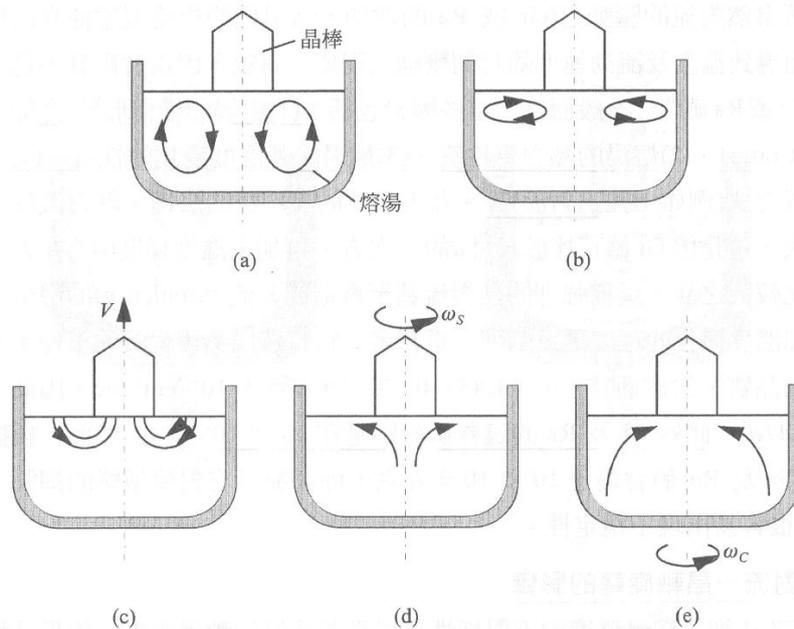


圖 2-2 矽熔湯流動現象(a)垂直自然對流(b)水準自然對流(c)晶棒拉速影響的強制對流(d)晶棒旋轉影響的強制對流(e)坩堝旋轉影響的強制對流[32]

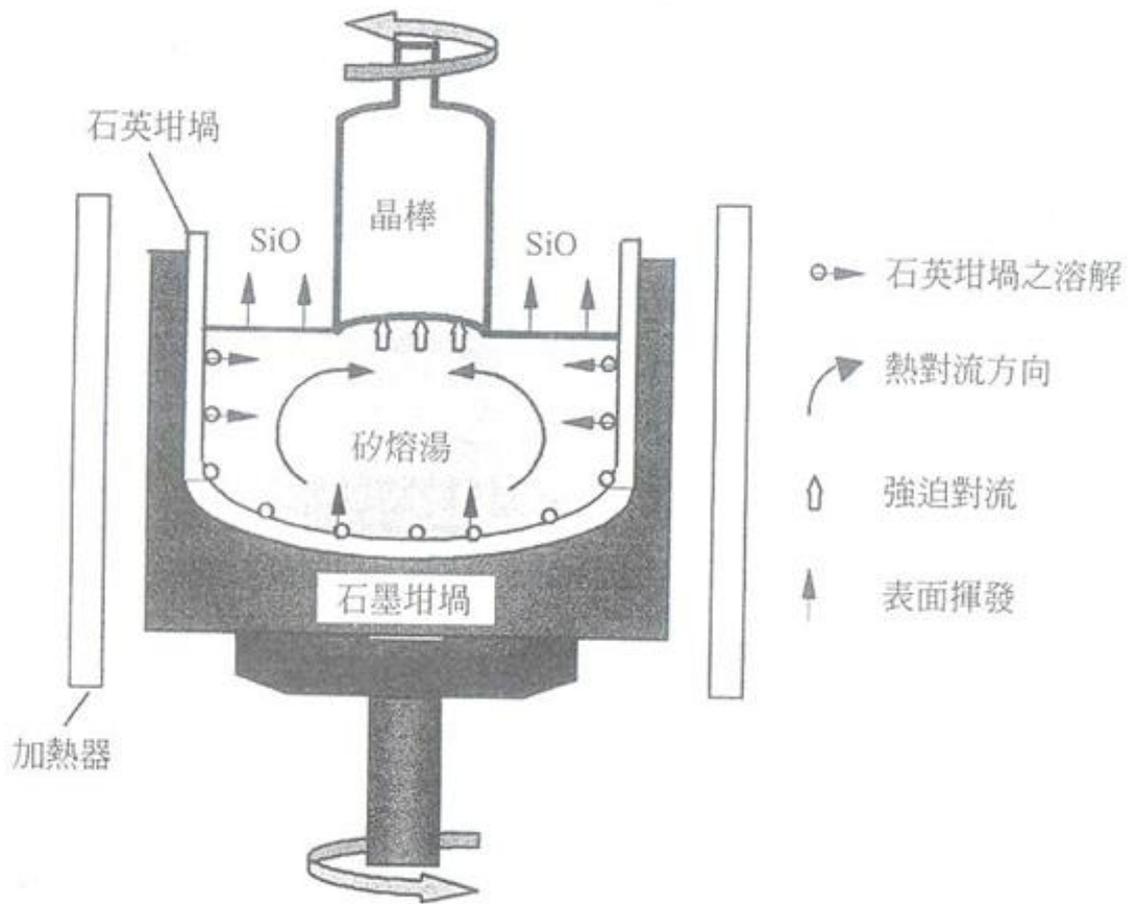


圖 2-3 氧於系統中的傳輸示意圖[32]

擴散項用中點近似法可下列來表示：

$$D_j \approx \Gamma_{\phi,j} [f_j^l (\phi_N - \phi_P) + \{ \text{grad}(\phi) \cdot \vec{S} - f_j^l \text{grad}(\phi) \cdot \vec{d}_{PN} \}_j] \quad (3-4)$$

其中 f_j 為幾何因子， \vec{d}_{PN} 為 P 到 N 之向量， $\Gamma_{\phi,j}$ 為面擴散係數。

2. 等號右邊 T_3 為來源項(source term)

$$T_3 \approx s_1 - s_2 \phi_P \quad (3-5)$$

對流項以 Upwind Differencing Scheme 處理，根據(3-3)式的推導，對流項可由下列表示：

$$C_j^{UD} \equiv F_j \begin{cases} \phi_P, & F_j > 0 \\ \phi_N, & F_j < 0 \end{cases} \quad (3-6)$$

其中：

$$F_j \equiv (\rho \vec{v}_r \cdot \vec{S})_j \quad (3-7)$$

F_j 為通過面 j 和 Φ_j 的質通量如圖 3-1 所示，輔助值 ρ 和 Γ 由線性內插得到。

總和上述，(3-2)式可表示為：

$$\frac{(\rho V)^n - (\rho V)^0}{\delta t} + \sum F_j = 0 \quad (3-8)$$

或

$$A_P \phi_P^n = \sum_m A_m \phi_m^\phi + s_1 + B_P \phi_P^0 \quad (3-9)$$

和

$$A_P \equiv \sum_m A_m \phi_m^n + s_2 + B_P \quad (3-10)$$

3.2 液固界面計算

(1)CGSim

CGSim 在初始會先定義熔湯與晶棒交界線已為液固界面，界面之運算點的晶棒生長速度與熱平衡關係示如下：

$$V_{crys} = \frac{1}{|n_x| \rho_{crys} \Delta H} \left(\lambda_{crys} \frac{\partial T_{crys}}{\partial n} - \lambda_{melt} \frac{\partial T_{melt}}{\partial n} + (Q_{rad}^{in} - Q_{rad}^{out})_{crys} - (Q_{rad}^{in} - Q_{rad}^{out})_{melt} \right) \quad (3-11)$$

$$(Q_{rad}^{in})_{crys/melt} = \int_{K_\lambda \neq \infty} q_{crys/melt,\lambda}^{inc} d\lambda \quad (3-12)$$

$$(Q_{rad}^{out})_{crys/melt} = \int_{K_\lambda \neq \infty} q_{crys/melt,\lambda}^{out} d\lambda \quad (3-13)$$

λ_{crys} 、 λ_{melt} 為矽晶棒與矽熔湯熱傳導係數， n 為沿固液界面的法向量。相對生長速度：

$$V_{crys}^{relative} = V_{crys}^* - V_{crys} \quad (3-14)$$

V_{crys}^* 為固液界面上的平均生長速度

由 ΔX 值修正初始之液固界面高度後得到液固界面形狀：

$$\Delta X = V_{crys}^{relative} \cdot \Delta t \quad (3-15)$$

(2)Fluent

計算流體力學軟體 Fluent 在求解相變化時，採用的數值方法為 enthalpy-porosity technique，在初始時假設晶棒與熔湯皆為液態，並在此區域定義一參數 β 與溫度、焓、能量方程式之關係，其計算方法如下：

$$H = h + \Delta H \quad (3-16)$$

$$h = h_{ref} + \int_{T_{ref}}^T C_p dT \quad (3-17)$$

其中：

h_{ref} : 固體矽之參考焓

T_{ref} : 矽熔湯熔點

C_p : 矽熔湯比熱容

定義一 liquid fraction 參數 β ， β 和溫度的關係表示如下

$$\beta=1 \quad T > T_{liquidus} \quad (3-18)$$

$$\beta=0 \quad T < T_{solidus} \quad (3-19)$$

$$\beta = \frac{T - T_{solidus}}{T_{liquidus} - T_{solidus}} \quad T_{solidus} < T < T_{liquidus} \quad (3-20)$$

此時 β 與 ΔH 的關係可寫為

$$\Delta H = \beta L \quad (3-21)$$

其中：

L: 矽熔湯潛熱

根據 3-16 與 3-21 此時能量方程式可寫為：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho H) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} H) = \nabla \cdot (k \nabla T) + S \quad (3-22)$$

其中：

H: 焓

ρ : 密度

\bar{v} : 流場速度

S: 熱源項

當 β 為 1 時，計算之區塊為液態，當 β 等於 0 時為固態，所以液固介面線 β 值之範圍可由下式表示：

$$0 < \beta < 1$$

3.3 收斂條件

本研究計算溫場及流場判斷收斂條件是以下列兩項：

1. 每個時間步階(time step)的疊代次數
2. 每次疊代後所有控制容積內的殘值改變率小於給定值，即：

$$C_{\phi}^k = \sum (|B_p^n \phi_p^n| - |B_p^0 \phi_p^0|) < \text{給定值}$$

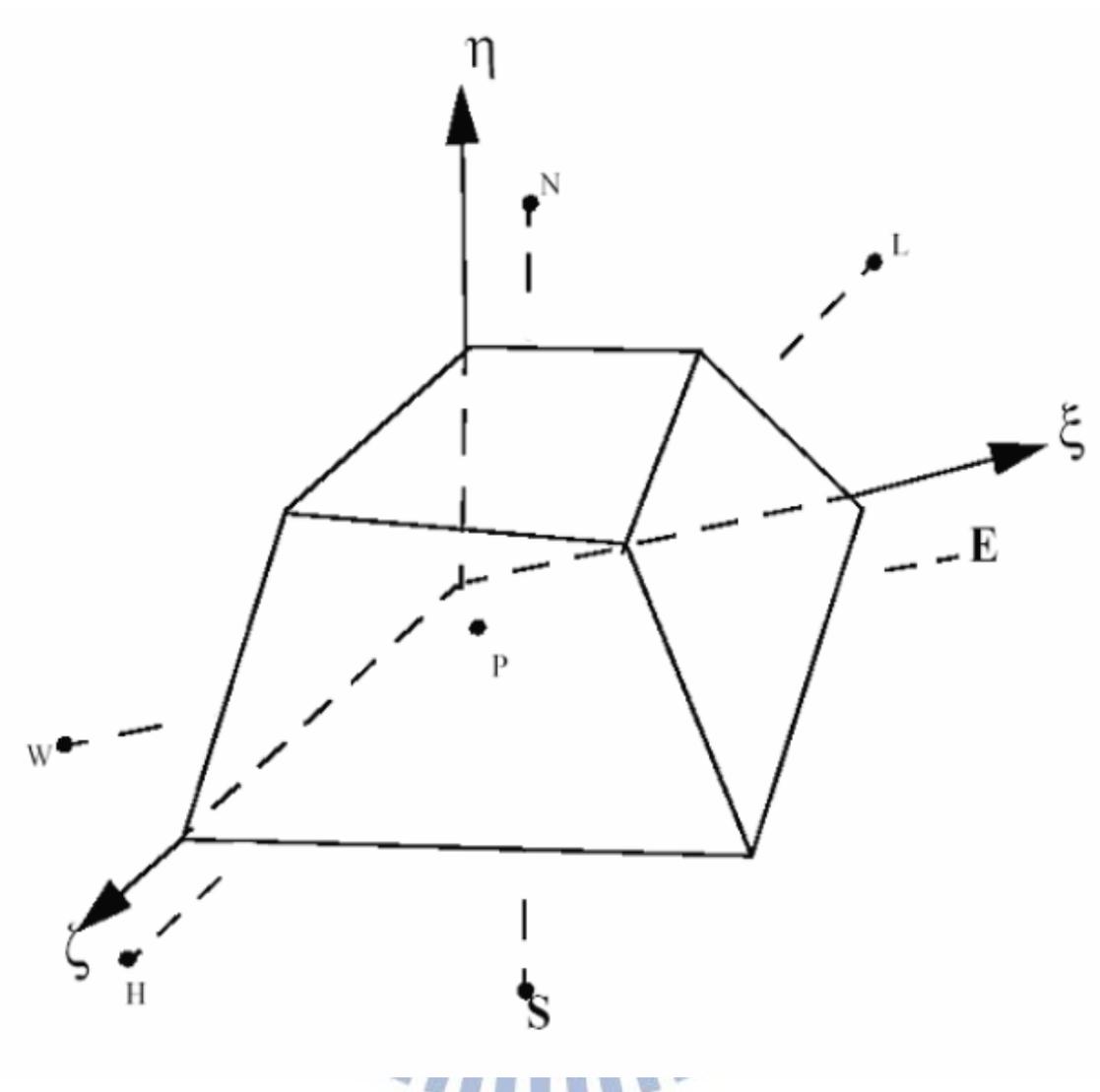


圖 3-1 網格中心點及離散面相關位置示意圖

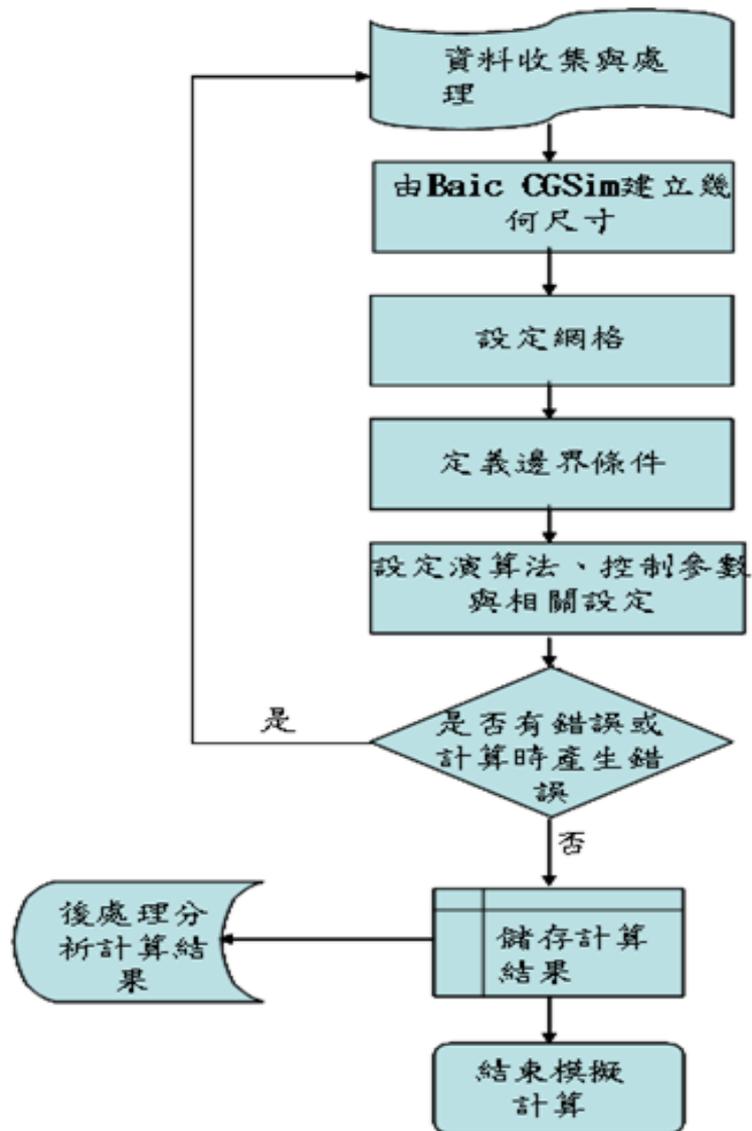


圖 3-2 CGSim 研究流程圖[33]

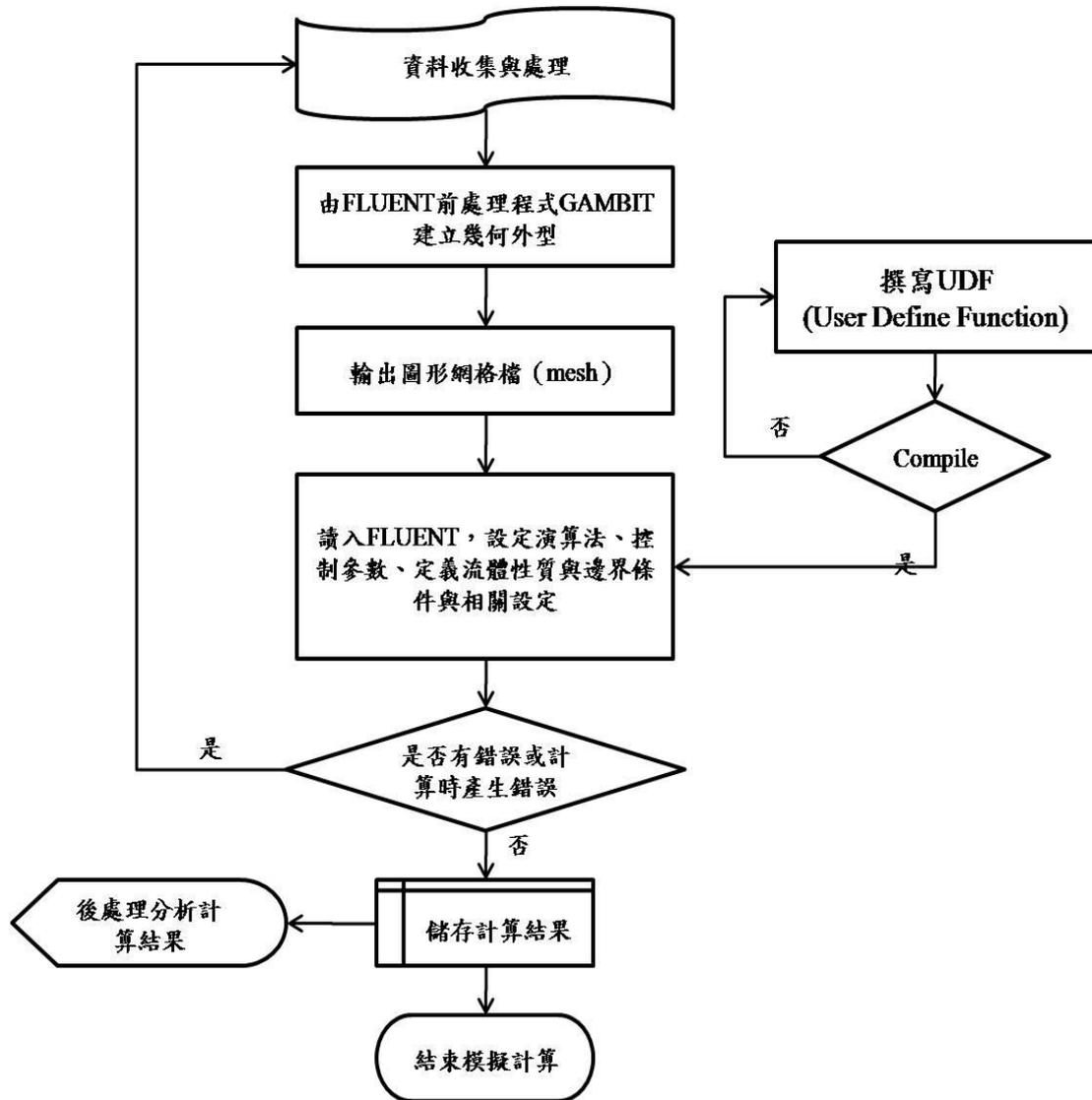


圖 3-3 Fluent 研究流程圖

表(3-1) 材料參數

材料	狀態	性質	參數	單位
氫	氣態	Conductivity	$0.01 + 2.5 \times 10^{-5}T$	W/m · K
		Heat capacity	521	J/kg · K
		Molar	40	g/mol
		Dynamic viscosity	$8.46 \times 10^{-6} + 5.365 \times 10^{-8}T - 8.682 \times 10^{-12}T^2$	Pa · S
		Emissivity	0.8	
		Crucible pressure	4000	Pa
石墨	固態	Conductivity	Graphite function	W/m · K
		Emissivity	0.8	
鉬	固態	Conductivity	Piecewise-linear function	W/m · K
		Emissivity	0.18	
石英	固態	Conductivity	4	W/m · K
		Emissivity	0.85	
		Heat capacity	1232	J/kg · K
		Density(RHO)	2650	Kg/ m^3
鋼	固態	Conductivity	15	W/m · K
		Emissivity	0.45	
矽單晶	晶體	Conductivity	Piecewise-linear function	W/m · K
		Emissivity	$0.9016 - 0.00026208T$	
		Heat capacity	$836 + 0.108T - 1.04 \times 10^{-5}T^2$	J/kg · K
		Density(RHO)	$2330 - 2.19 \times 10^{-2}T$	Kg/ m^3
矽	液態	Conductivity	$-2.001 + 0.0349T$	W/m · K
		Emissivity	0.27	
		Heat capacity	925.7	J/kg · K
		Density(RHO)	$2966.635 - 0.271T$	Kg/ m^3
		TMELT	1685	K
		Latent heat	1720000	J/kg
		Surface tension	0.777	N/m
		Wetting angle	11	deg
		Dynamic viscosity	0.0008	Pa · S

第四章 結果與討論

本研究是藉由商用軟體 Basic CGSim 來模擬柴氏長晶法的動態拉晶過程，以及相同晶爐型號之爐內氧濃度分佈的穩態分析。CGSim 使用有限體積法(finite volume method)作二維軸對稱計算，在方程式中，CGSim 使用二階差分法(second order approximations)對全域進行離散，並使用三階差分和二階差分針對統御方程式(governing equations)中的對流項與傳導項進行離散，CGSim 收斂條件的相對殘值為 10^{-4} 。

在動態長晶模擬與氧濃度分佈研究時所採用的晶爐型號為 KX150 型，其構造如圖 4-1(a)所示，針對生產大尺寸晶棒之長晶爐作熱場分佈、晶身長度的生長速度變化的模擬與研究。長晶爐的高度為 2790mm，晶爐內石英坩堝的半徑為 11 英吋，晶棒直徑為 8 吋。至於控制系統與輸入源部分，加熱器功率大小為 105800W，晶棒和坩堝轉速為 12rpm(逆時鐘)及 13rpm(順時鐘)，晶棒拉速為 62.7mm/hr，本文在動態長晶模擬不考慮氬氣流動的影響，但在模擬氧濃度分佈時會考慮，其氬氣流量為 92SLM，晶爐外部壁面溫度為 300K。

除了 CGSim 的動態長晶過程與氧濃度模擬之外，本文也使用商用軟體 Fluent 模擬柴氏長晶法之穩態熱流場和固液界面形狀，並將 Fluent 的模擬結果與 CGSim 作比較。採用的晶爐型號為 CG6000 型，長晶爐高度為 2790mm，石英坩堝的半徑為 9 英吋，對直徑 400 公厘與長度 500 公厘的晶棒進行二維穩態軸對稱穩態模擬。加熱器功率為 87000W，晶棒和坩堝轉速分別為 16rpm(順時鐘)和 10rpm(逆時鐘)，晶棒拉速為 39mm/hr，晶爐內初始壓力為 5999.49Pa，工作流體氬氣於進口端的流量為 245SLM，晶爐外部壁面溫度為 300K。

4.1 動態長晶模擬

在柴氏長晶爐的控制系統中，最重要的項目為加熱器功率、坩堝與晶棒的轉速及晶棒的拉伸速度。適當得調整加熱器功率大小，不但能使爐內溫度場更為穩定，也有助於減低製程時所消耗的能量。坩堝轉速、晶棒的轉速及拉伸速度是影響液固界面形狀、熔湯溫度場分佈和熔湯流動穩定性的主要因素。由於實際製程的時間相當漫長，且熔湯內部流場及液固界面形狀不易觀測，若能藉由電腦模擬來預先估算生成晶身的長度，不但可以降低生產成本，亦可作為長晶爐控制系統的最佳化設計。

動態拉晶是以 CGSim 作為計算平台，在此模擬中本文暫時不考慮氬氣流動所造成的影響，我們著重於石墨加熱器和坩堝系統之熱輻射與內部的熱傳導現象，並針對 CGSim 在動態模擬功能中的加熱器功率和晶棒拉速的影響來分以下三組模擬工作，分別為只設定加熱器功率、只設定晶棒拉速以及同時設定加熱器與晶棒拉速，當只設定加熱器功率時，CGSim 會自行設定拉速的初始值再來作運算，相對當我們只設定拉速時，CGSim 會自行設定加熱器功率的初始值再來作運算。

由於晶頸、晶冠相對於晶身，它們的長度非常短，且在實際製程中也不易量測，加上長晶過程中最注重的環節為晶身生長，諸如以上原因為了方便將模擬的結果與實際製程量測值作比較，在動態長晶模擬工作中只著重於晶身的生長過程，後續本文將針對上述三種設定方法進行模擬，針對晶身長度的與晶身生長速度隨拉伸時間變化的模擬結果與實際製程的量測值作比較，模擬工作中所輸入的加熱器功率及晶棒拉速大小皆與實際製程的參數一致，材料參數如表 3-1。

4.1.1 同時設定加熱器功率與晶棒拉速

在 CGSim 動態模擬中設定與實際製程參數相同的加熱器功率 (105800W) 和晶棒拉速 (62.7mm/hr) 時，熱場分佈隨拉伸時間的變化如圖 4-2(a) 所示，隨著晶身長度的增長，矽熔湯的量慢慢減少，拉伸過程中晶身的上半部因熱輻射的散熱作用使其溫度慢慢降低，且如圖 4-2(b) 可看出液固界面的形狀到了拉伸後期有變平緩的趨勢，顯示出晶棒中沒有殘餘的熱應力存在。晶身長度隨拉伸時間的變化趨勢如圖 4-3(a) 所示，由圖可看出模擬結果和實際測量值非常吻合，且誤差值皆小於 10%，從圖 4-3(b) 便可發現晶身的生長速度在模擬初期較不穩定，因此前期誤差較大，但到了模擬的後期誤差皆非常小。由圖 4-3(b) 也可看出隨著拉伸時間的增加，晶身生長速度有減小的趨勢，由於晶棒生長過程中，液面會逐漸下降等因素，使晶棒的散熱速率隨晶棒長度的增加而遞減，如此一來液固界面處的溫度梯度減小，進而使晶棒的最大拉速減小，而晶棒拉速的大小會直接影響到晶身的生長速度，總結上述原因之影響，愈到拉伸的後期，晶棒的生長速度會呈遞減的趨勢。

由於晶身長度隨時間變化之模擬結果和實際量測值非常吻合，藉此來當本文動態長晶模擬之模式驗證，接著為了進一步測試 CGSim 的動態長晶功能以及探討加熱器功率、晶棒拉速對長晶的影響，在 CGSim 的動態長晶模擬工作中，其控制參數可以只設定加熱器功率或晶棒拉速其中一項參數來模擬，例如當我們只設定晶棒拉速來模擬時，便代表加熱器功率是由 CGSim 內部自動設定初始值並自行運算，倘若在此設定方法進行模擬時，晶身長度變化的模擬結果也和實際量測值接近，便表示未來製程即使改變拉速，也能透過此模擬方法計算出相對應之最佳化加熱器功率大小，並作為製程上的建議。

4.1.2 只設定加熱器功率

在只設定加熱器功率為 105800W 來模擬的情況下，表示晶棒的拉伸速度是由 CGSim 內部自動設定初始值再來作運算，熱場分佈在拉晶時間為十小時內的變化如圖 4-4(a)所示，若取較久的拉伸時間來和實際製程的晶身長度的量測值作對照的話，由圖 4-5(a)可看出在拉伸後期，模擬之晶身長度的量測值會隨拉伸時間的增加而遞減，推測是 CGSim 自行運算拉速較不準確，換句話說在沒有適當的晶棒拉速初始值進行模擬時，CGSim 計算過程中拉速與晶身的生長速度在拉伸後期會下降過快，此變化趨勢可由圖 4-5(b)看出。根據文獻[33]與圖 1-5 得知在低拉速進行模擬時，易增加液固界面的高低差，由圖 4-4(b)可看出到了拉伸後期液固界面除了高低差會增加之外，形狀也會有向下凸的變化趨勢，此種液固界面形狀會導致該界面上的溫度梯度過高，並由液固界面的生長速度與熱平衡的關係式可看出曲度過高的液固界面就是導致晶身長度到後期會變短的原因之一。

4.1.3 只設定晶棒拉速

與 4.1.2 之概念雷同，只設定晶棒拉速為 62.7mm/hr 時，CGSim 會自行設定加熱器功率的初始值再來作運算，模擬出的熱場分佈隨時間變化如圖 4-6(a)所示，同樣藉由熱輻射作用使晶身上半部溫度場慢慢降低，矽熔湯的量也因晶棒的生長而慢慢減少。晶身長度和生長速度隨拉伸時間的變化如圖 4-7 所示，不同於只設定加熱器功率的情況，此設定的模擬結果也與實際測量值非常接近，於是我們推測只要有適當的拉速作設定時，CGSim 內自行運算加熱器功率會很準確，因此本文把三項模擬工作之加熱器功率隨模擬時間之變化來做比較，由圖 4-8 可看出在只設定拉速的情形下，CGSim 內部自行運算加熱器功

率的變化也和同時設定兩相控制參數之模擬結果非常接近，因此未來實際製程中若改變拉速時，便可透過只設定拉速的模擬方法來找出相對應的加熱器功率大小，達成製程最佳化設計之目的，而這結果也顯示出比起加熱器功率的影響，晶棒拉速對長晶的影響是比較大的，由於適當的拉速、晶棒生長速度有助於減緩液固界面的陡峭程度，若生長速度下降過快，可能會增加液固介面的高低差，此時該介面處徑向的溫度變化會愈為激烈，可能導致固體晶棒再熔入矽熔湯之中。

4.2 柴氏長晶熱流場模擬結果

由於 Basic CGSim 在設定上所受的限制較多，且無法利用使用者定義函數(User defined function)，當內部設定無法達成與實際製程的環境相似時，相對模擬出來的結果可信度就較低，所以本文嘗試用計算流體力學軟體 Fluent 進行柴氏長晶法的穩態熱流場模擬，利用其可外掛使用者定義函數以及諸多邊界條件、數值模型等特性，若證實 Fluent 可以模擬出液固界面，便表示對該軟體而言，柴氏長晶法的模擬工作也是可行之方向，若 Fluent 有取代長晶軟體 CGSim 的可能性，如此一來便利用 Fluent 的特性來針對長晶過程中多變的環境做設定。首先基於 CGSim 是業界廣泛使用的專業長晶軟體這項原因，在結果的比較工作中本文暫時假設 CGSim 的模擬是正確的，接著再針對兩套軟體的氣體流場、溫度場、液固界面形狀和矽熔湯流場的模擬結果來作比較，探討 Fluent 是否可運用於長晶模擬之工作，假設在所有參數皆相同的情況下，Fluent 能模擬出與 CGSim 相似的結果，便能推測 Fluent 有取而代之的可能性，若無法得到類似的結果，將就其原因作為未來模擬之改善方向。

本文穩態熱流場模擬使用的材料參數如表 3-1 所示，晶爐型號和

邊界條件如本章節前半部所介紹，模擬使用的晶爐型號為 CG6000 型，圖形為二維軸對稱系統，其晶爐架構如圖 4-1(b)所示，晶爐的網格如圖 4-9 和圖 4-10 所示，為求模擬出的液固界面形狀能較為精準，在液固界面可能出現的位置皆作網格加密之設計。

4.2.1 氣體流場

不同於動態長晶的模擬，本文在此研究中有考慮氫氣的流動，並且假設氫氣為理想氣體。在求解流場時採用紊流模式，其中 CGSim 和 Fluent 的紊流模型分別為 one equation 以及 k- ϵ 模式，為比較晶爐內氣體的流動現象，本文先由氣體流線圖來探討晶爐內部主要的流動方向，在相同加熱器功率下兩套軟體所模擬出之爐內氣體流線如圖 4-11 所示，由圖可看出兩者模擬出的流動現象非常相似，本文也利用 Fluent 模擬出與 CGSim 類似的窩流特徵，接著為進一步探討爐內氣體流場的速度大小，便可從徑向與軸向的速度分佈圖來作比較，模擬的結果如圖 4-13 與圖 4-14 所示，由圖可看出流場速度值的大小也非常接近，且由圖可看出在流道較狹窄的區域皆有流場加速的特徵，以及兩套軟體皆模擬出相似的速度分佈特徵，由徑向速度分佈可看出矽熔湯液面正上方的徑向速度較快，若有考慮氧濃度於氣場中的分佈時，流速快的區域氧化物濃度會較低，有關氧濃度的分析會在 4.3 章節再做細部介紹。

4.2.2 溫度場

兩套軟體在相同加熱器功率為 87000W 進行模擬時，雖然 CGSim 的模擬結果可以產生液固界面，但 Fluent 在該熱源下暫時無法模擬出液固界面，探討其原因後便發現在該加熱器功率為 87000W 模擬的情

況下，Fluent 溫度分佈的模擬結果顯示出熔湯與石英坩堝交界面之平均溫度值過低，幾乎低於固體矽的熔點 1685K，由於矽熔湯主要是藉由坩堝的熱傳效應來加熱，因此在該條件下達不到加熱矽熔湯之效果，此時由 Fluent 中的 liquid fraction 參數 β 與溫度的關係可得知矽熔湯與晶棒區域皆會被 Fluent 判斷為固體狀態，因而無法模擬出液固界面，但本文為了測試 Fluent 產生液固界面的可能性，以及探討是否為加熱器到坩堝、熔湯之熱輻射和熱傳導等環節出了差錯，本文先單方面提高 Fluent 中的加熱器功率為 95000W 來進行模擬，先藉由提高熱通量的方法來增加坩堝之溫度場，以期望能達到加熱矽熔湯之效果，倘若此方法依然無法模擬出液固界面，就必須由 Fluent 計算液固界面的方法 enthalpy porosity technique 來作分析。

在 Fluent 模擬中提高加熱器功率的設定方法，其溫度場模擬結果如圖 4-15 所示，由於此模擬結果是由不同加熱器功率所模擬出的溫度分佈圖，在 Fluent 加熱器功率較高的情況下，首先由圖可看出在加熱器周圍之區域 Fluent 的溫度明顯比 CGSim 高出許多，在證實提高加熱器功率確有其功用後，接著再來比較坩堝區域之溫度，由圖 4-15 可看出在此設定方法的幫助下，坩堝區域之溫度 Fluent 和 CGSim 的大小已有相近的結果，因此我們便可開始分析晶棒與熔湯區域之溫度大小，由圖 4-16 可看出 Fluent 熔湯區域之溫度大小已和 CGSim 有相近的趨勢，接著我們便可來觀測 Fluent 液固界面的模擬結果，其液固界面形狀如圖 4-17 所示，在藉由提高 Fluent 中的加熱器功率來模擬穩態熱流場時，本文證實 Fluent 是可以模擬出液固界面，代表對 Fluent 而言，柴氏長晶法是未來可行的模擬工作。總結以上之結果，推測未來要用與 CGSim 相同加熱器功率大小，模擬出相似之液固界面形狀，加熱器到坩堝以及矽熔湯之熱輻射和熱傳導是首要解決的課題之一。

4.2.3 矽熔湯內流場

在證實 Fluent 可模擬出液固界面後，代表 Fluent 可區分出固體晶棒區域和液體矽熔湯區域，雖然溫度之邊界無法相同，但是為探討本文未來要改善之方向，接著本文由定性分析的角度來比較 Fluent 與 CGSim 之矽熔湯內部流場的模擬結果有何差異，就其軸向速度、徑向速度和流線圖來作比較，藉此判斷兩套軟體模擬出之自然對流程度大小。

晶爐內部的徑向速度與軸向速度分佈模擬結果如圖 4-18 和圖 4-19 所示，由分佈圖可看出目前以 Fluent 求解熔湯內之速度場時，計算出的速度大小之數值結果遠不及 CGSim 模擬出的速度值，探究其原因便發現是 Fluent 模擬出的熔湯底部平均溫度較低，而 CGSim 所模擬出的溫度約比 Fluent 高出 5K 到 10K，由於自然對流程度會受溫度梯度影響，且本文之矽熔湯的密度大小會受溫度改變而發生變化。受到 Fluent 模擬出的熔湯底部溫度和熔湯之熔點、液固界面的溫差較小的影響之下，導致熔湯內的自然對流程度不夠旺盛，所以 Fluent 模擬出的速度場才有較低的現象，但由圖 4-12 之流線圖可看熔湯內部之流動現象非常相似，也用 Fluent 模擬出與 CGSim 相似的渦流特徵，證實流動方向無明顯差異後，未來研究若要改善熔湯內部速度過小之問題，就必需探討 Fluent 在求解矽熔湯區域內的熱傳導時，和同時用 enthalpy porosity technique 求解熔湯區域之相變化有何關聯性。

4.3 晶爐內氧濃度分析

柴氏長晶法的過程裡，由於石英坩堝(SiO_2)表面與矽熔湯接觸的區域會因高溫而慢慢溶解，導致大量的氧析出並存在於矽熔湯中，這

些氧小部分會因偏析現象由液固界面進入固體晶棒，一旦固體晶棒含氧量過高，便會對後續的製程造成影響，進而降低矽晶圓的良率，但其實絕大部分的氧會以 SiO 的形態從矽熔湯表面揮發到氣體流場當中，因此在矽熔湯液面上方之氣體流場區域亦有氧化物的存在，熔湯內部因為強大的對流效應引起攪拌作用，熔湯內的氧濃度幾乎只在以下區域存在差異性，分別為石英坩堝與矽熔湯接觸面、矽熔湯與氬氣接觸之液面和晶棒與熔湯之液固界面。

Basic CGSim 在求解紊流流場時是利用 one equation 模式，本研究先針對方程式中的數值參數 turbulent Prandtl number 作探討，發現適當調整 Prandtl number 大小可使液固界面和實際測量的界面趨於吻合，由圖 4-20 可看出當 $\text{Pr}=0.3$ 時其模擬結果和實際測量結果非常接近，由於我們在穩態的長晶模擬中最重視液固界面的形狀，因此本研究便以 $\text{Pr}=0.3$ 來做爐內氧濃度分佈之穩態分析。此研究所模擬的晶爐架構與網格如圖 4-21 所示，圖形採二維軸對稱模式，使用的材料參數如表 3-1 所示，此研究主要探討矽熔湯內部以及氣體流場的氧濃度分佈，以及因偏析現象熔湯內的氧元素會由液固界面傳入固體晶棒，因此也分析液固界面上之氧濃度分佈。

4.3.1 矽熔湯內氧濃度分佈

以 Basic CGSim 做爐內氧濃度分佈之模擬所採用的晶爐架構如圖 4-22 所示，主要分析的區域為矽熔湯內部以及氣體流場，考慮偏析現象模擬氧在矽熔湯內的濃度分佈如圖 4-22(b)所示，由於矽熔湯內的氧主要是來自於石英坩堝的熔解，所以鄰近石英坩堝內壁之矽熔湯區域的氧濃度較高，而熔湯內的氧大部分會從矽熔湯表面以 SiO 的型態揮發至氣體流場，因此矽熔湯表面的氧濃度較低。偏析

(segregation)代表液固界面處之熔湯和晶棒會有氧傳輸的現象，從石英坩堝析出的氧會藉由內部對流的流動帶到液固界面來作傳輸，液固界面之氧濃度分佈如圖 4-23 所示，由圖中可看出沿著液固界面之徑向位置，愈到晶棒外側氧濃度會愈低，其原因是愈遠離中心軸之氧元素，愈容易擴散至矽熔湯表面揮發，以及由熔湯內之流線圖可看出其流動方向也是造成此分佈現象的原因之一，至於熔湯內部因強大的對流引起攪拌作用，所以此區域的濃度差異性較小。

由於矽熔湯中的氧要排除到外界只有兩個管道，其一就是經液固界面進入到固體晶棒當中，然而此現象是我們比較不希望發生的結果，理由是晶棒含氧量過高的情況下，在後續的製程中會降低矽晶圓的良率，其二就是從矽熔湯表面揮發至氣體流場當中。因此本文便想從氣體流場的氧濃度分佈情形來初步探討是否有方法能讓熔湯內部的氧大部分都從矽熔湯表面揮發到氣體流場，而非進入固體晶棒中。

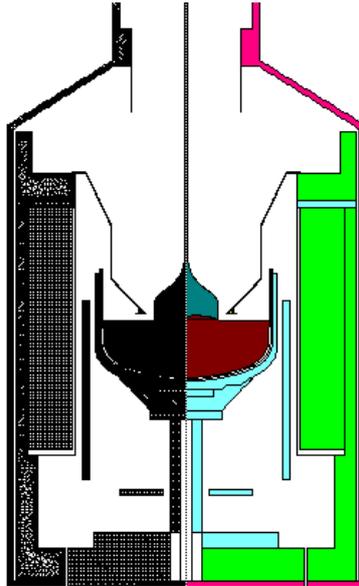
4.3.2 氣體流場中氧濃度分佈

矽熔湯內的氧大部分會以氧化矽的型態揮發至氣體流場中，因此氣體流場也會有氧化矽存在，氣體流場中的氧濃度分佈模擬結果如圖 4-22(a) 所示，關於此濃度的分佈趨勢可同時跟該區域之徑向速度分佈圖來做對照，其中該區域徑向速度分佈的模擬結果如圖 4-24 所示，由上述兩張圖可看出在矽晶棒、矽熔湯與氬氣之三相點濃度較高，其原因是氣體不容易流過此區域，造成該區域速度場較小，所以氧化矽不易被氣體流場帶走，造成較高的氧濃度分佈現象，另一側之矽熔湯與坩堝、氬氣交會處的氧濃度較低亦為相同的因素，在流速較慢的影響之下有較高的氧濃度分佈。另一方面，在遮蔽器下方與左右兩側則是因為氣體流速較快，該區域之氧化矽容易被氣體流場帶走，所以氧

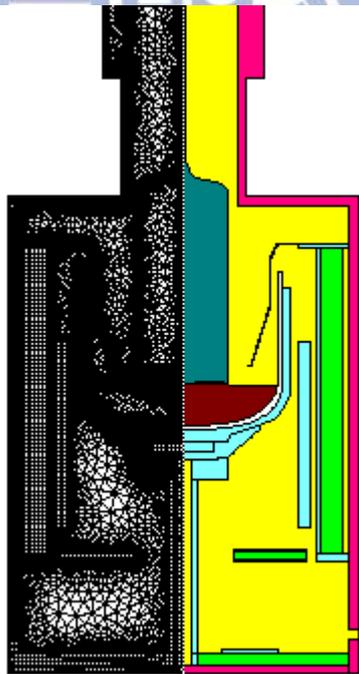
化物濃度較低。

長晶過程中矽熔湯內部流動非常旺盛，由圖 4-22(b)的熔湯內流線可看出從石英坩堝熔解出的氧元素會被流場帶到液固界面處，而這些氧會因偏析現象進入固體晶棒中，因此若氧濃度過高的話，除了會使液固界面處的氧濃度升高外，就會有過多的氧因偏析而從液固界面進入矽晶棒，而攙入固體矽晶的氧濃度，可能會在某些溫度範圍內超過溶解度，而在接下來的熱處理中形成氧析出物，可能會導致低矽晶圓的良率降低。

由於物質會有高濃度往低濃度的擴散趨勢，因此未來若能在氣體流場中加裝導流設計，使氣體能流過圖 4-24 中速度場較慢之區域，進而帶走這些區域之氧化物，便可降低圖 4-22(a)中氧濃度分佈較高之區域的氧化矽質量濃度，如此一來便能降低整體氣體流場的氧濃度分佈。根據物質的擴散趨勢得知在氣體流場之氧濃度降低後，就會有更多的氧從矽熔湯表面揮發到氣體流場，進而降低進入固體晶棒之氧元素。

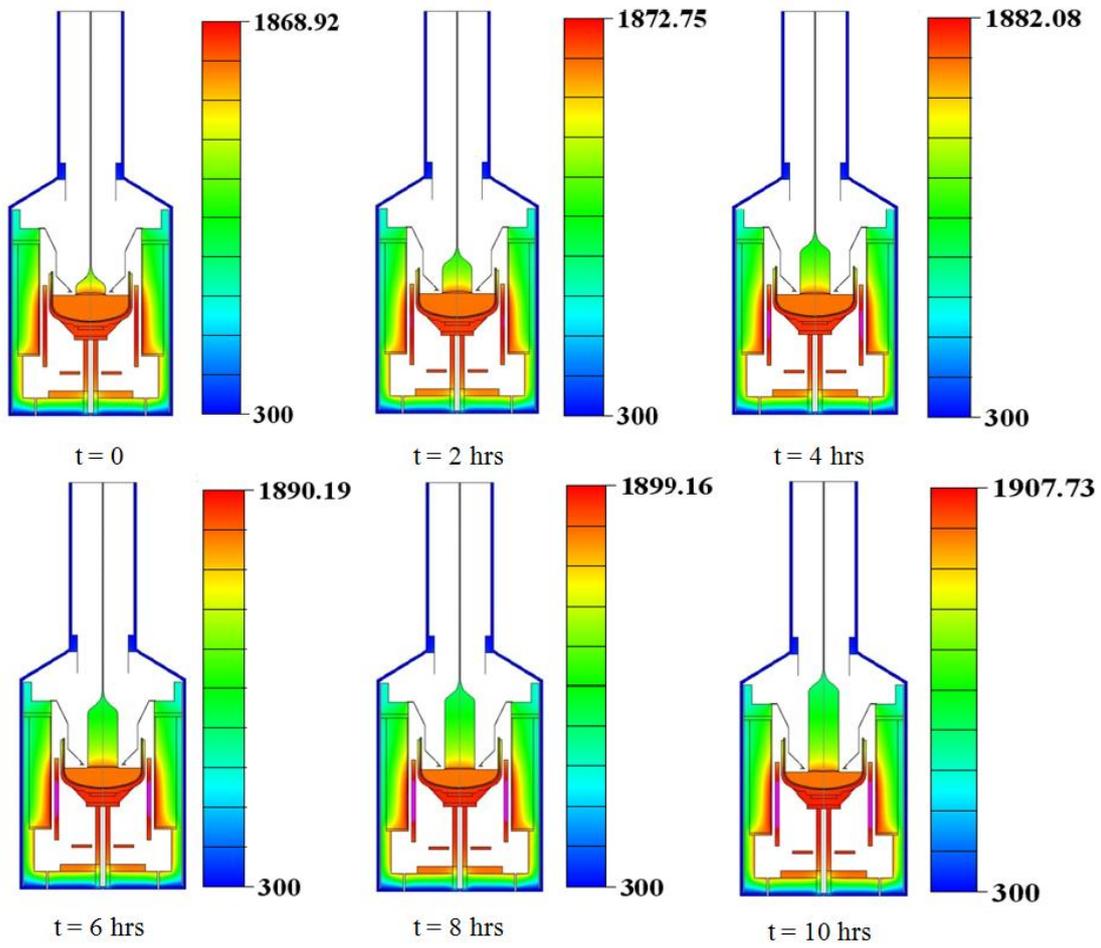


(a)



(b)

圖 4-1 長晶爐構造與網格示意圖(a)KX150(b)CG6000



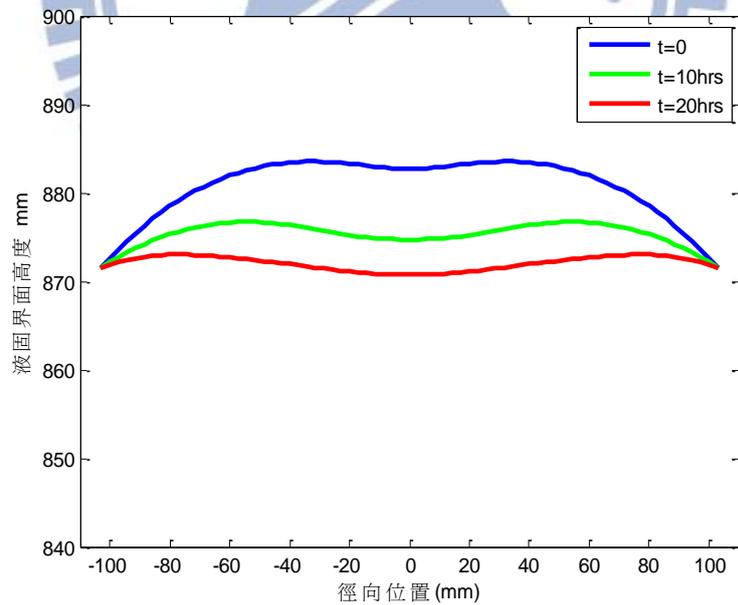
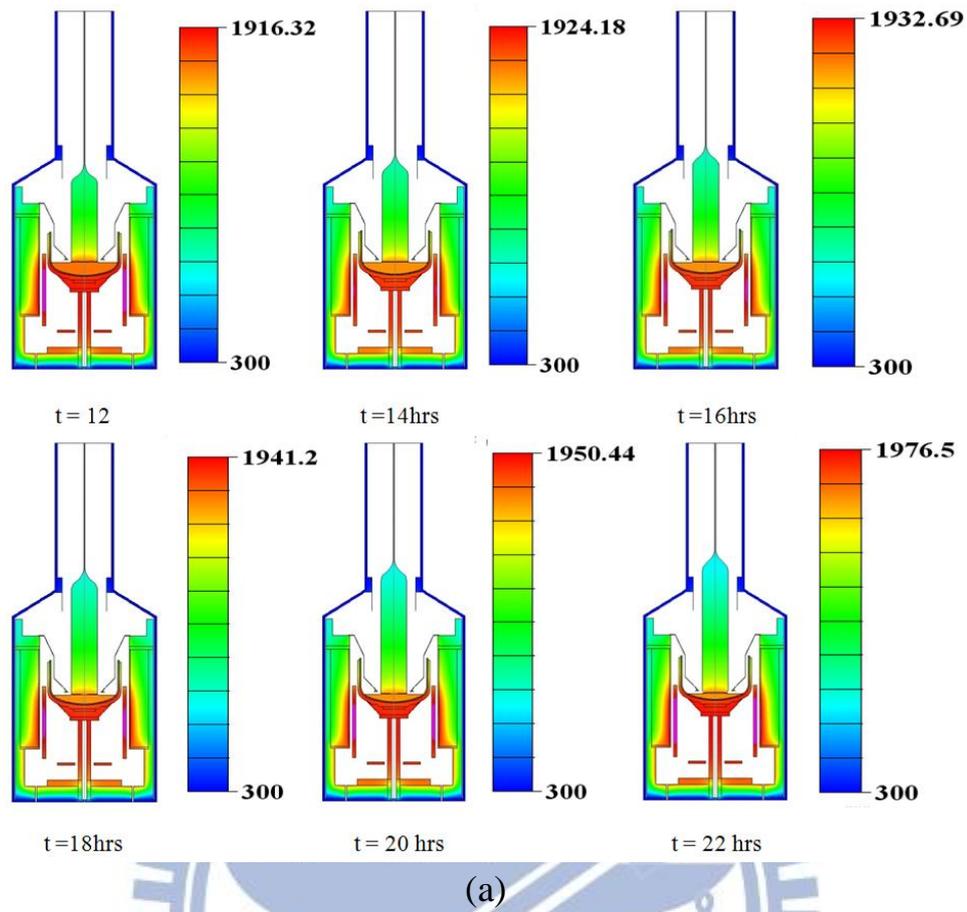


圖 4-2 (a)設定晶棒拉速與加熱器功率之動態長晶過程熱場示意圖(b)
液固界面形狀變化趨勢

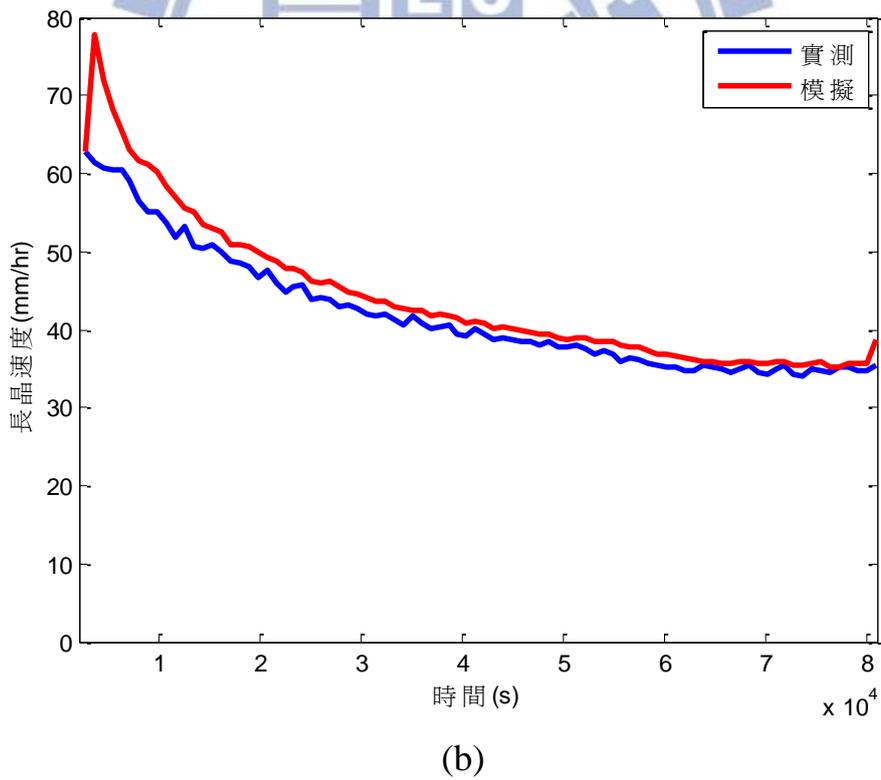
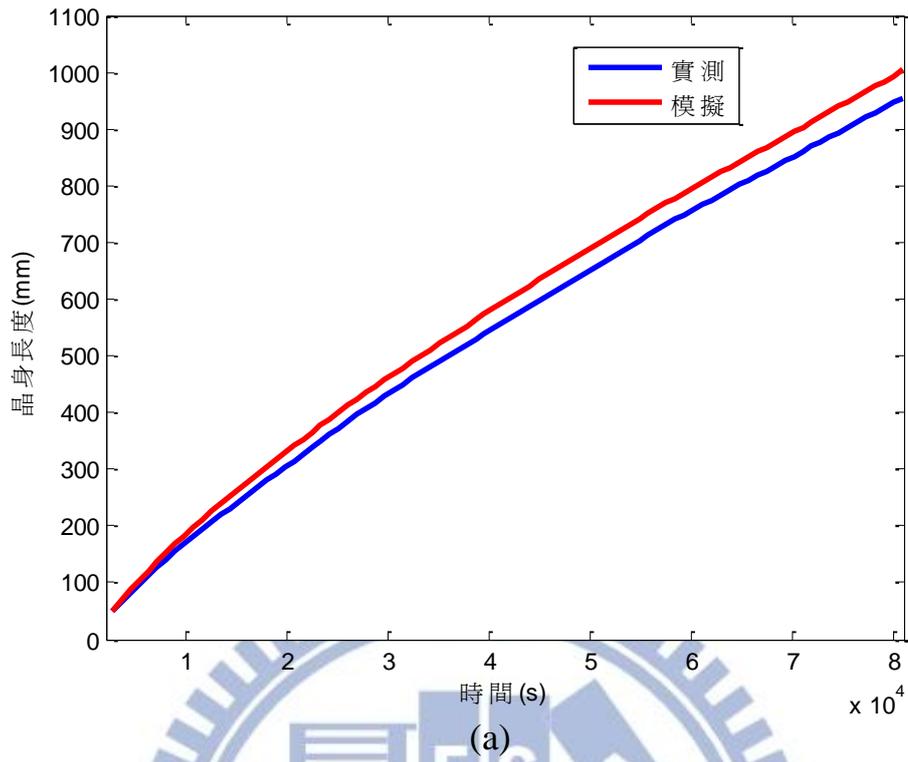
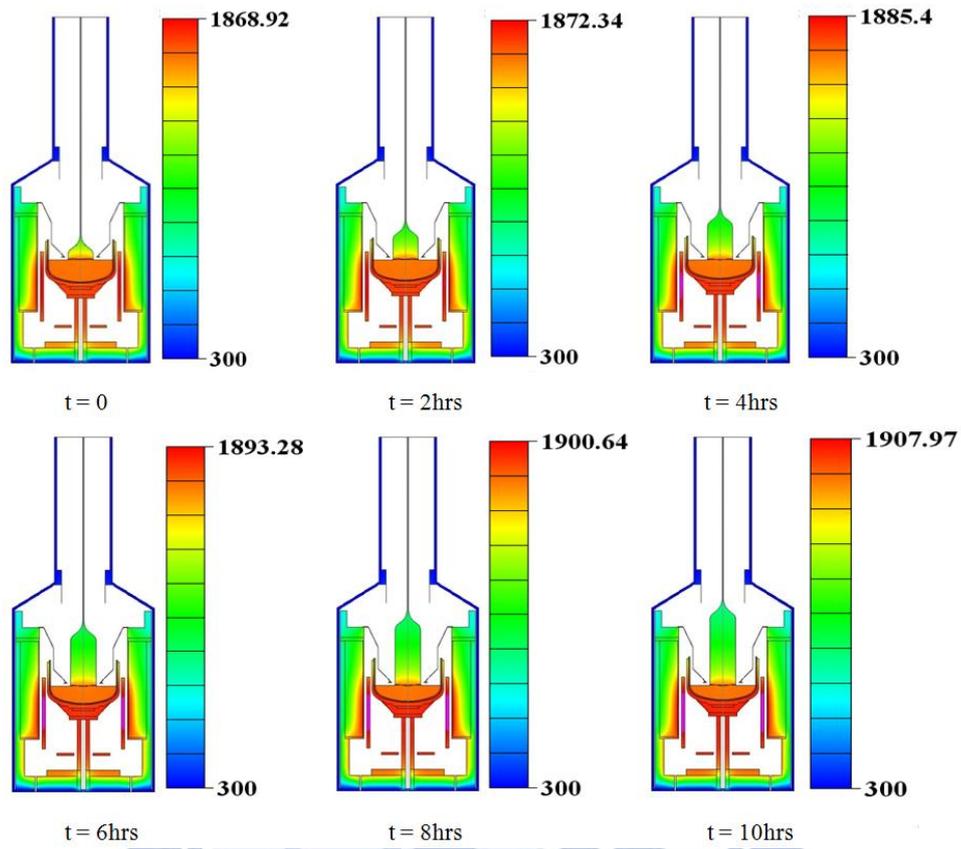
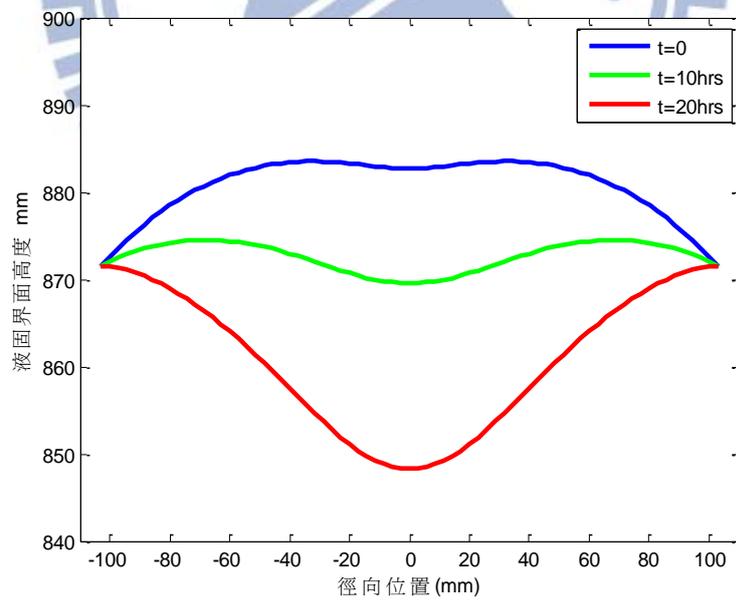


圖 4-3 (a)設定晶棒拉速與加熱器功率時晶身長度變化與時間之關係

圖(b)晶身生長速度與時間之關係圖

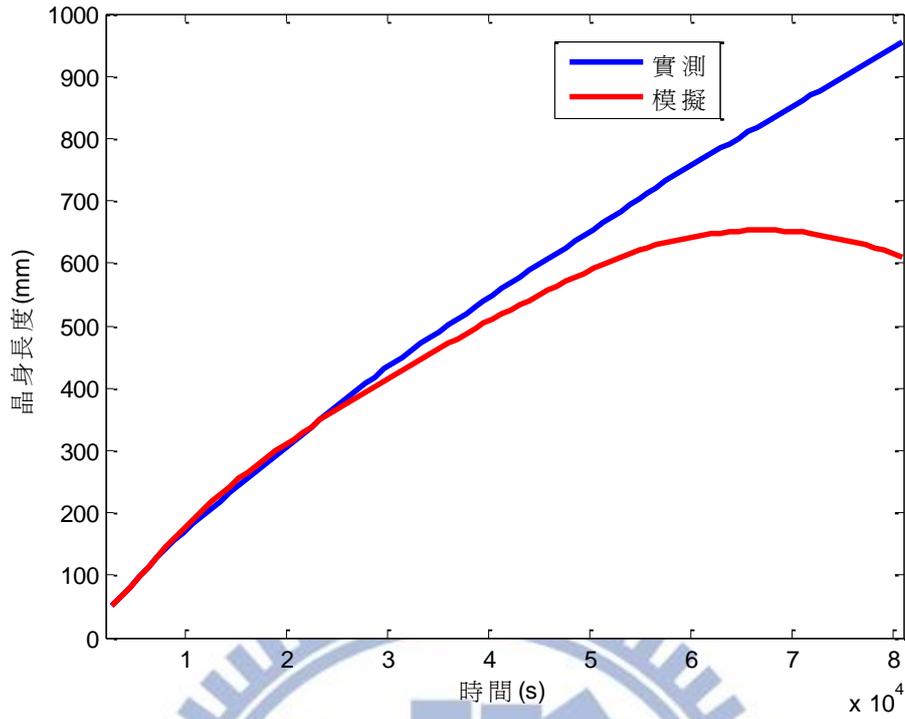


(a)

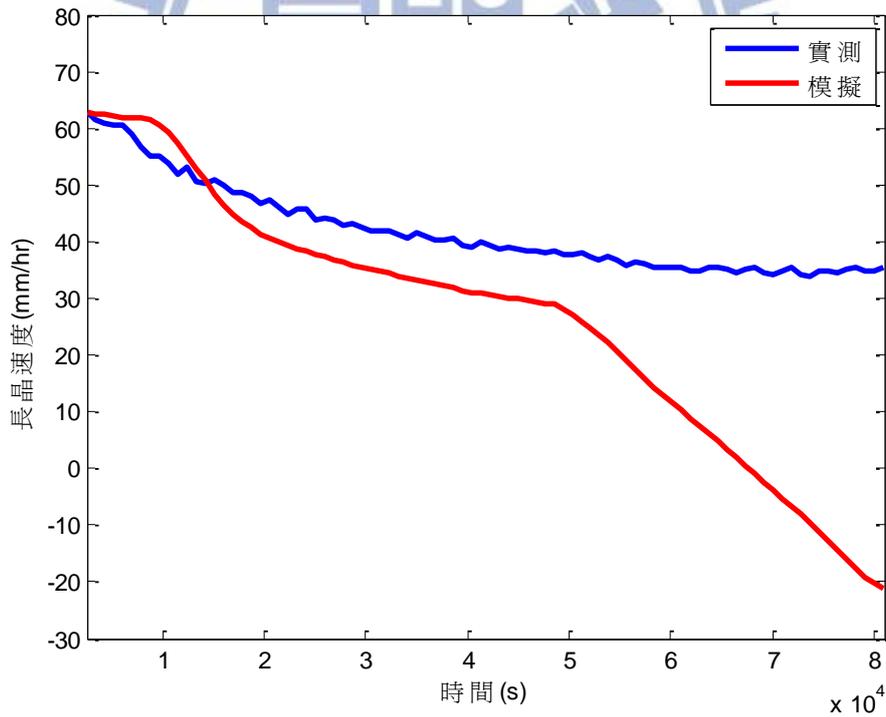


(b)

圖 4- 4 (a)設定加熱器功率之動態長晶過程熱場示意圖(b)液固界面形狀變化趨勢

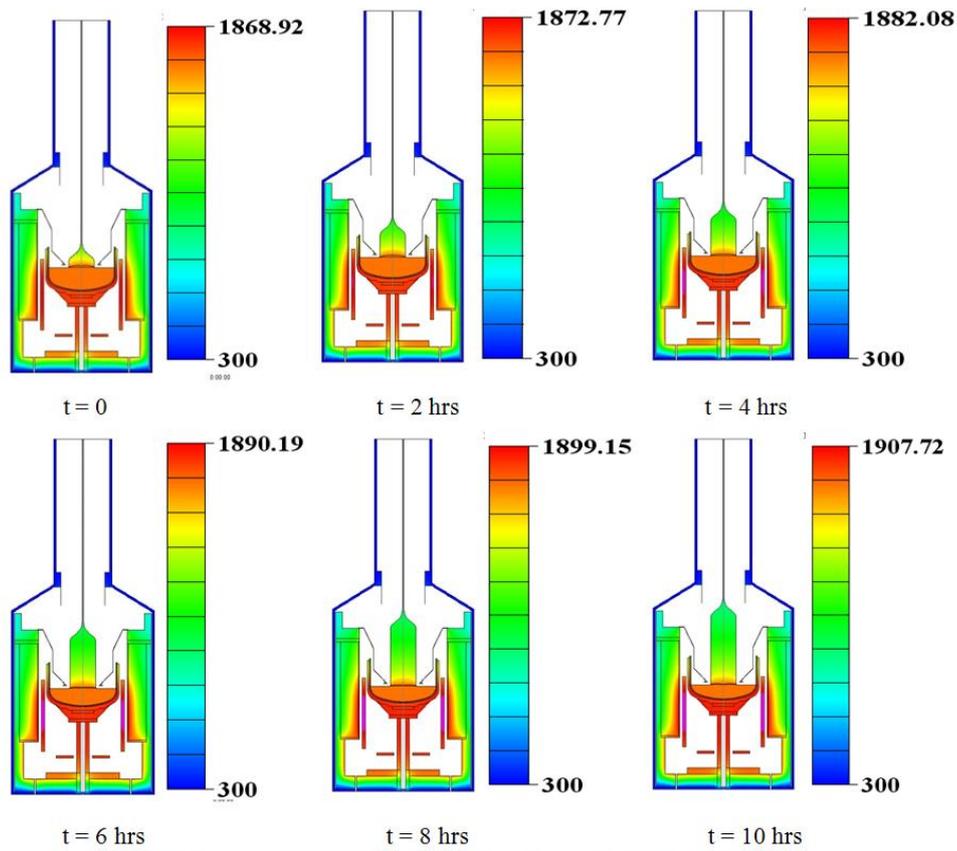


(a)

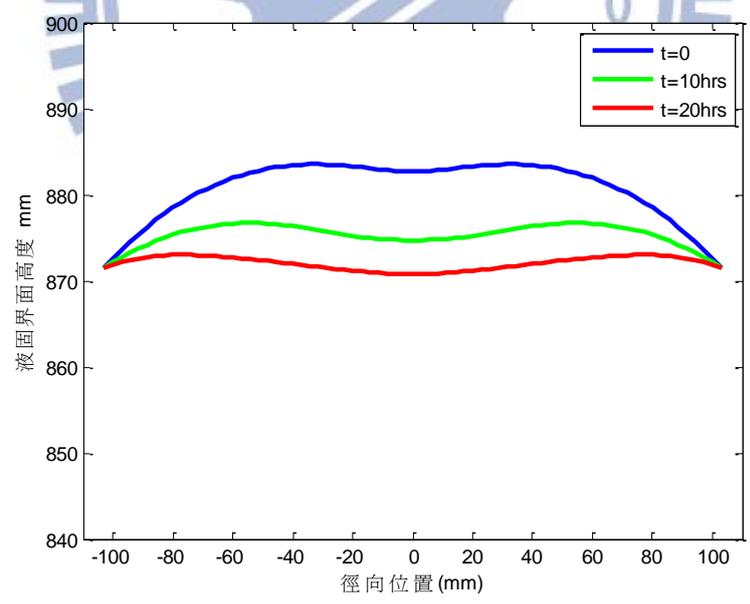


(b)

圖 4-5 (a)設定加熱器功率時晶身長度變化與時間之關係圖(b) 晶身生長速度與時間之關係圖

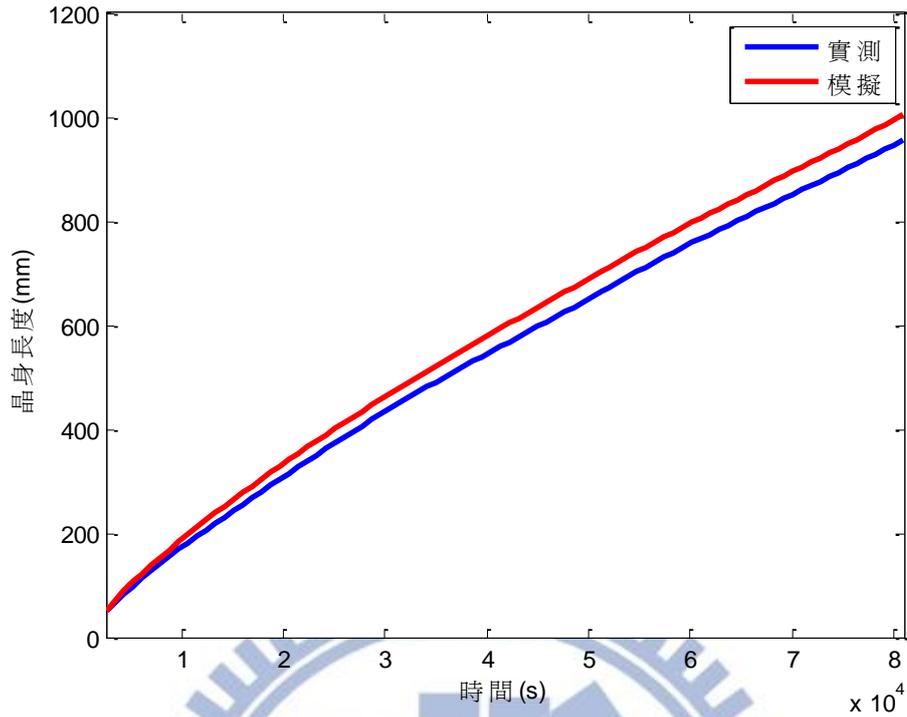


(a)

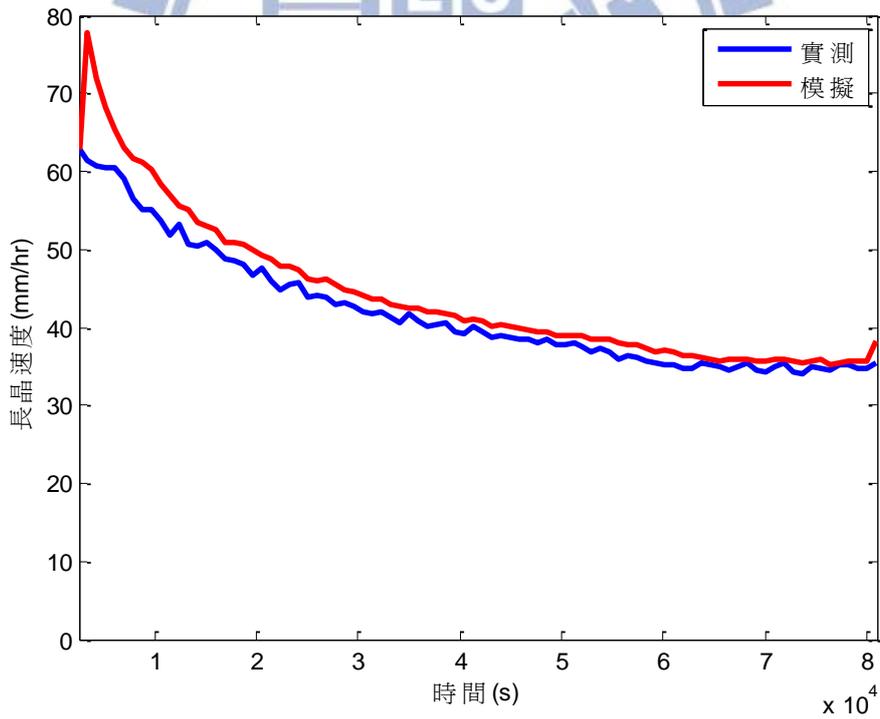


(b)

圖 4-6 (a)設定晶棒拉速之動態長晶過程熱場示意圖(b)液固界面形狀變化趨勢



(a)



(b)

圖 4-7 (a)設定晶棒拉速時晶身長度變化與時間之關係圖(b) 晶身生長速度與時間之關係圖

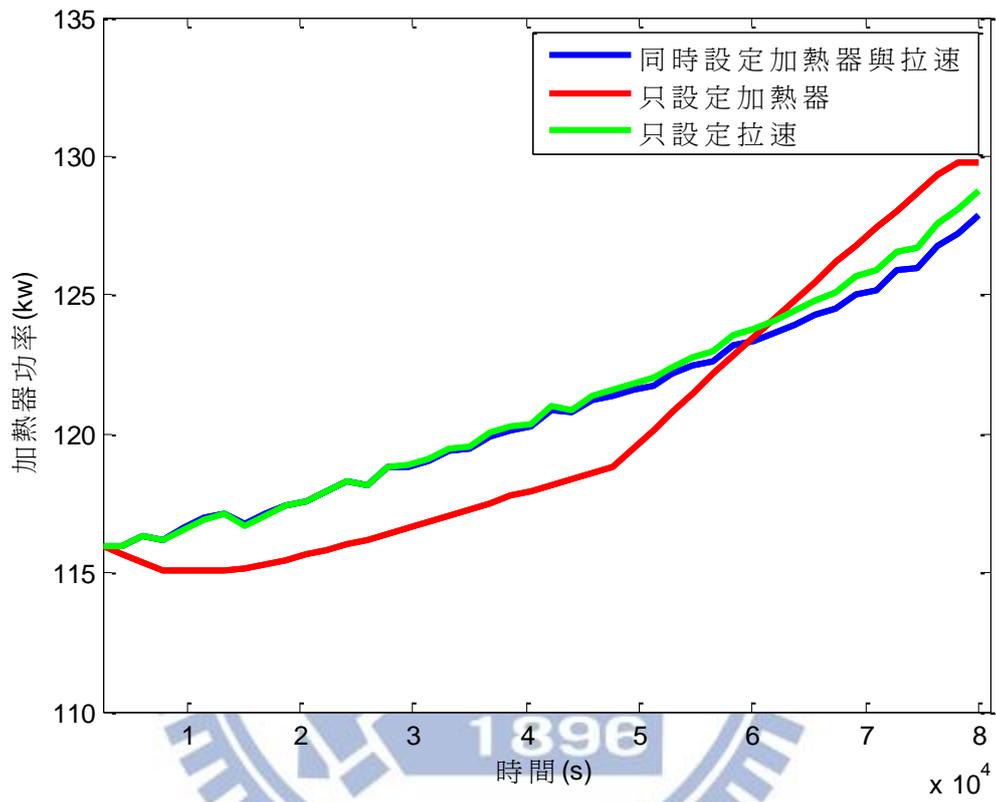


圖 4-8 加熱器功率隨拉晶時間變化圖

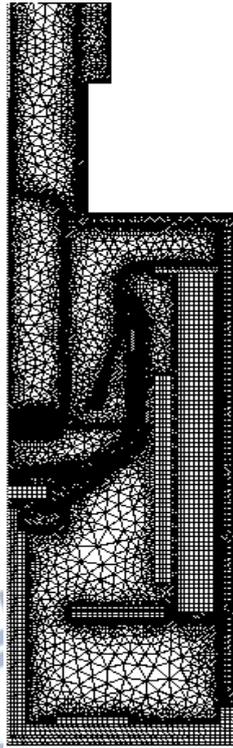


圖 4-9 CGSim 網格示意圖

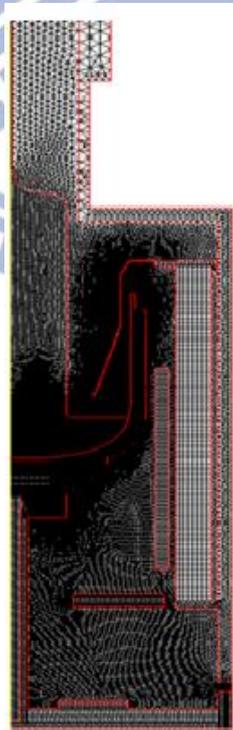
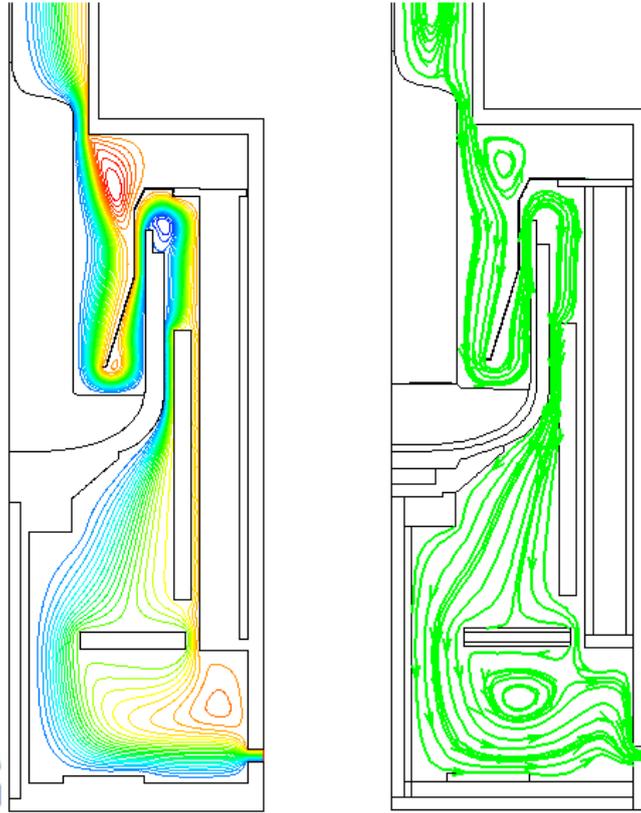


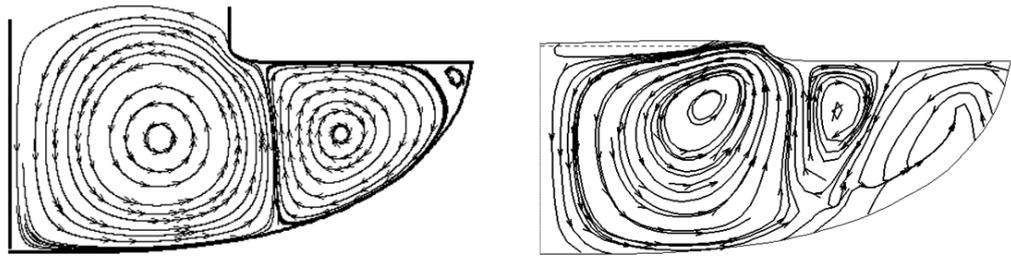
圖 4-10 Fluent 網格示意圖



(a)

(b)

圖 4-11 氣體流線示意圖(a) Fluent (b)CGSim



(a)

(b)

圖 4-12 矽熔湯內部流線示意圖(a) Fluent (b) CGSim

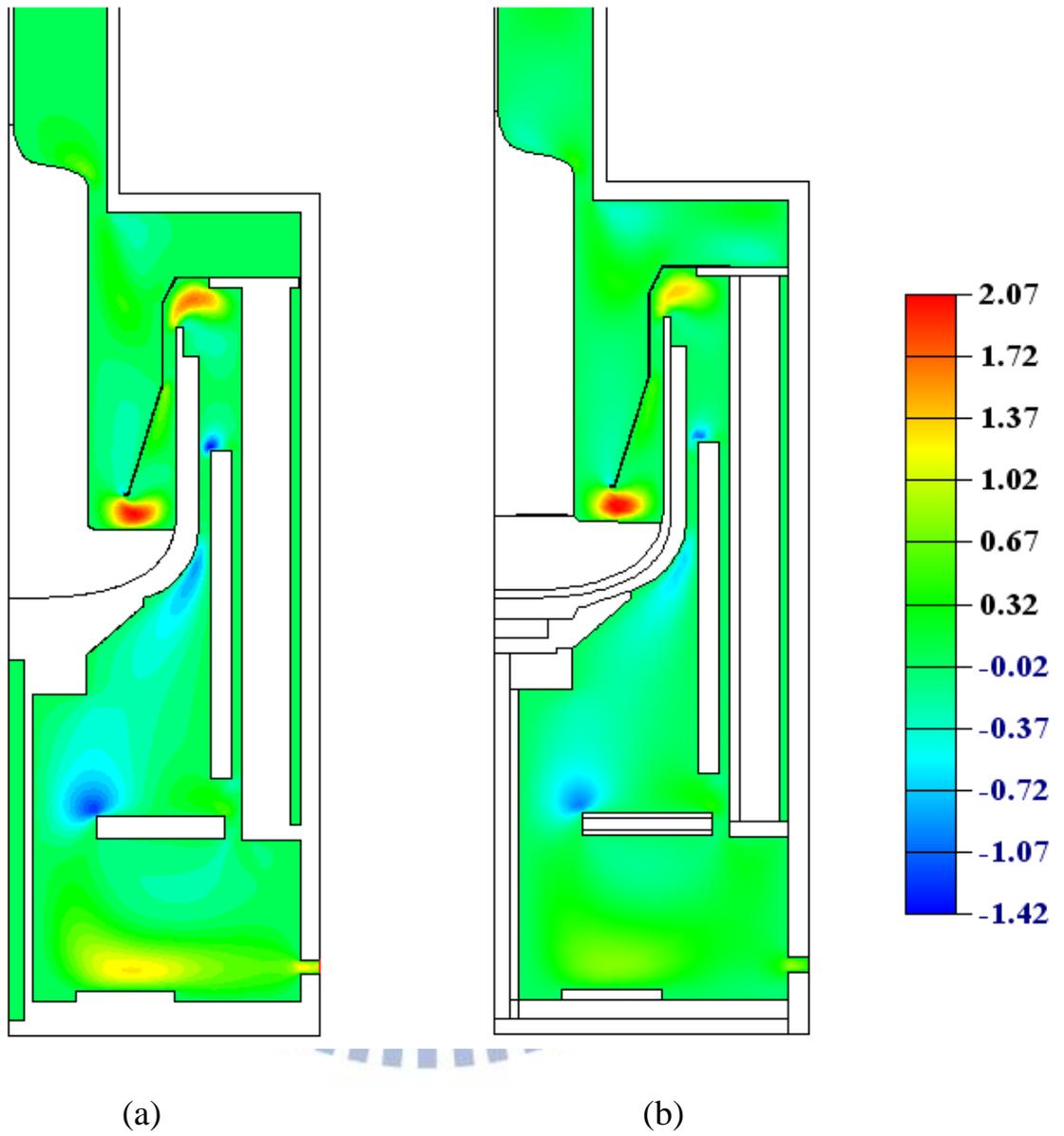


圖 4-13 晶爐徑向速度(m/s)分佈圖(a)Fluent(b)CGSim

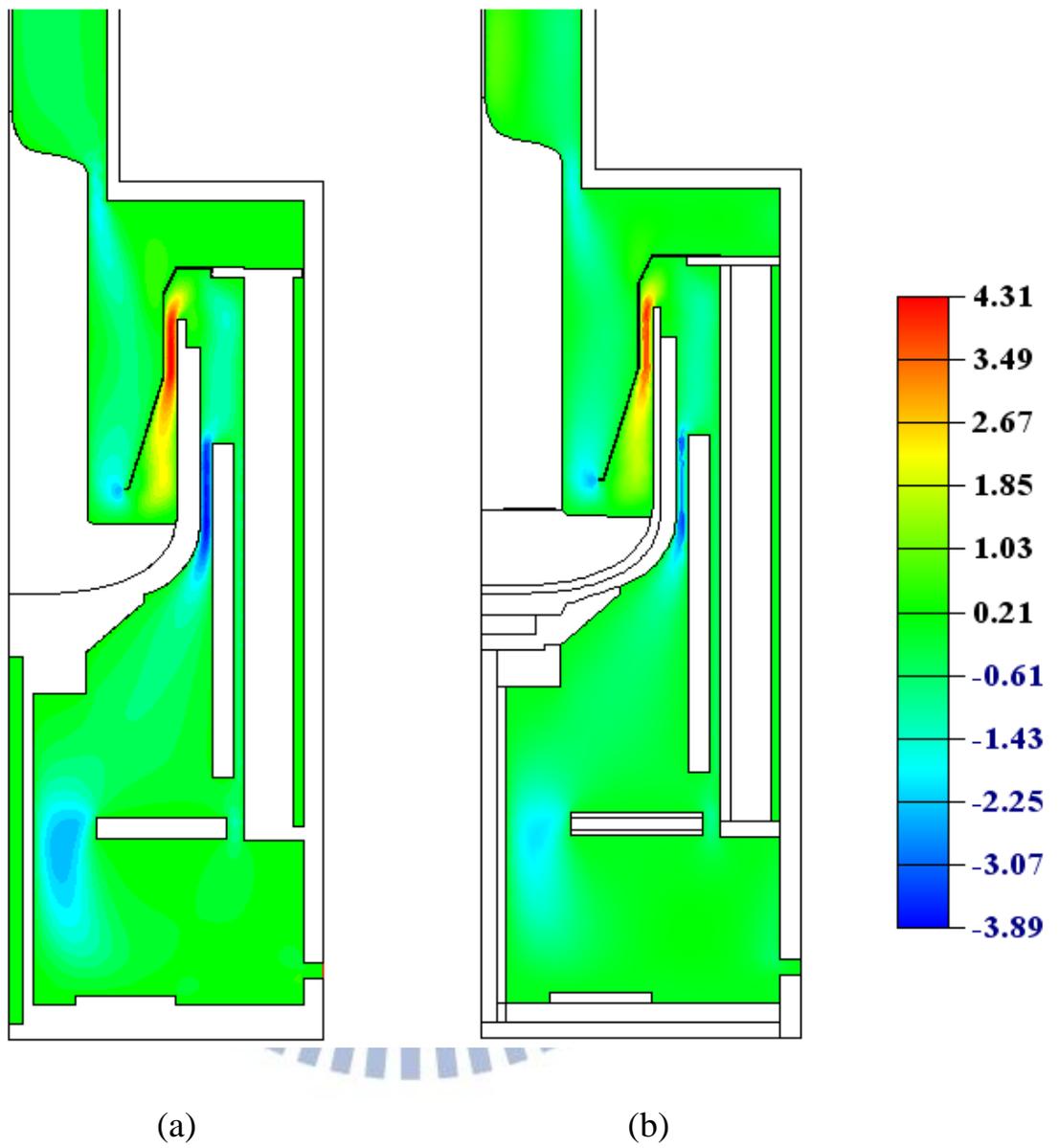
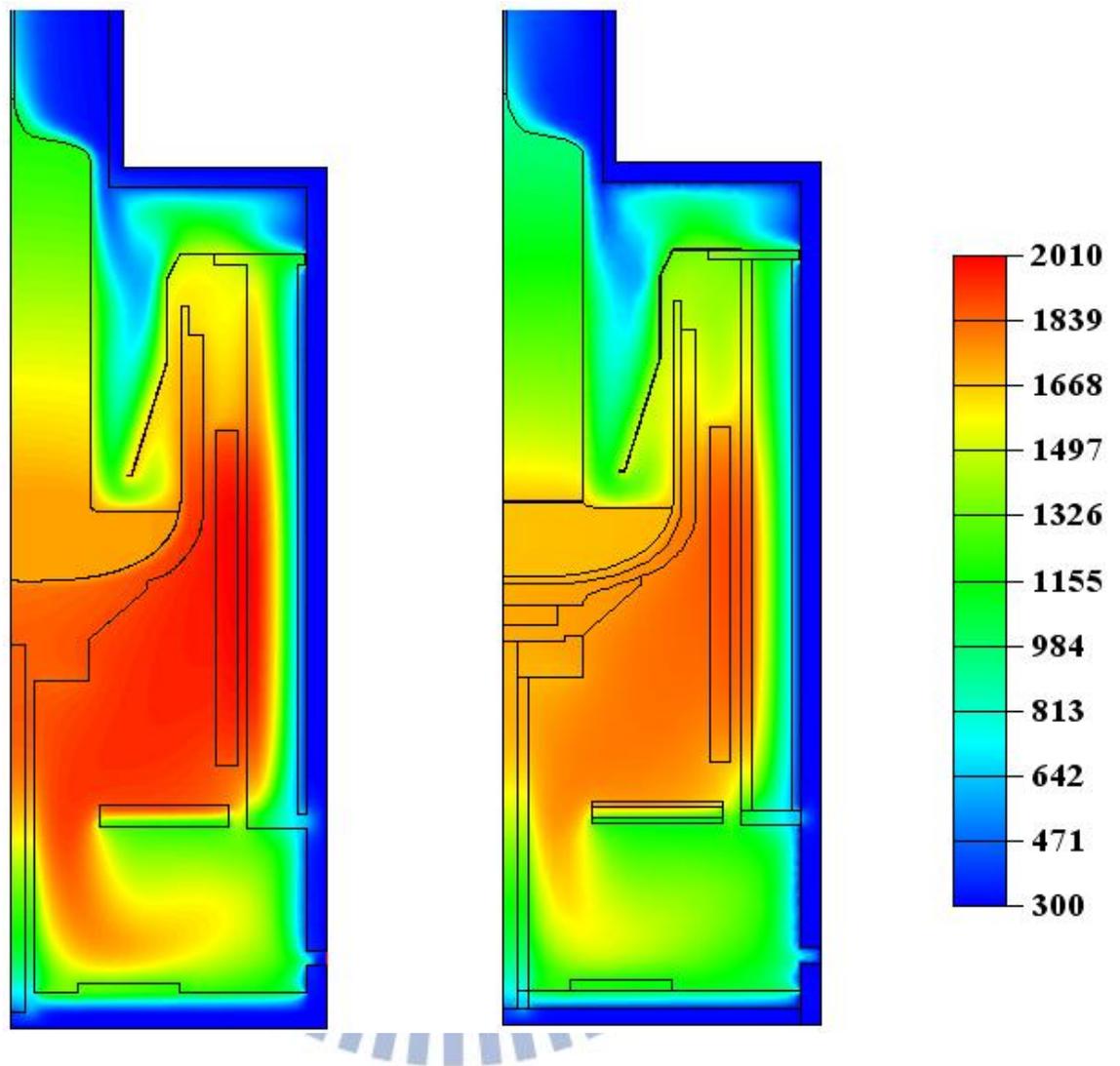


圖 4-14 晶爐軸向速度(m/s)分佈圖(a)Fluent(b)CGSim



(a)

(b)

圖 4-15 晶爐溫度場(K)分佈圖(a)Fluent(b)CGSim

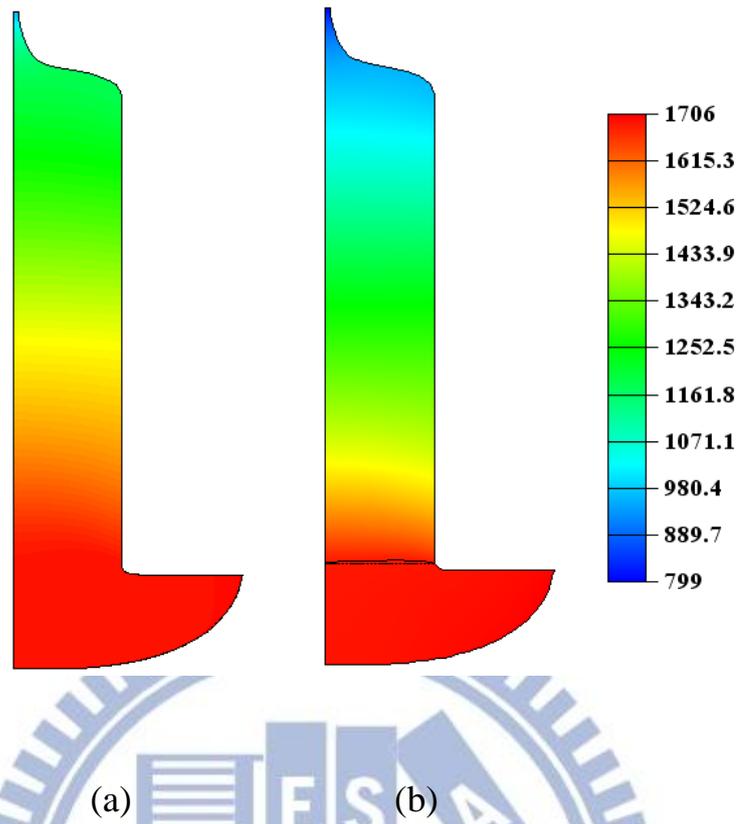


圖 4-16 矽熔湯與矽晶棒溫度(K)分佈圖(a)Fluent(b)CGSim

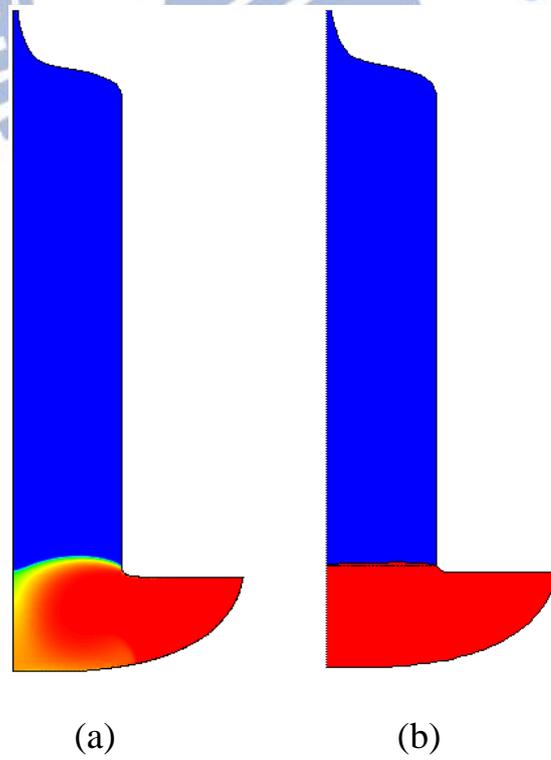


圖 4-17 液固介面圖(a)Fluent(b)CGSim

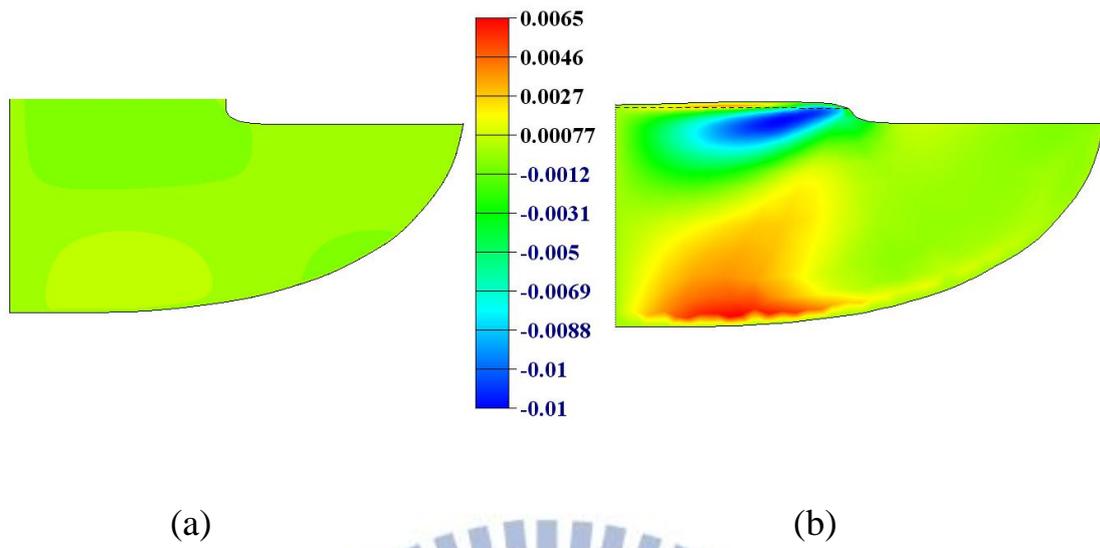


圖 4-18 矽熔湯內徑相速度分佈(m/s)(a)Fluent(b)CGSim

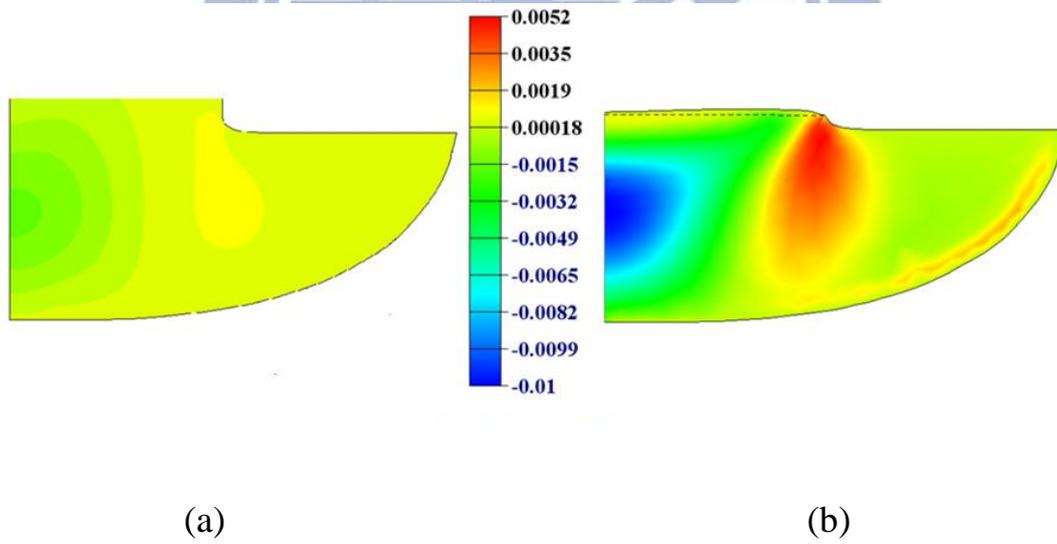


圖 4-19 矽熔湯內軸相速度分佈(m/s)(a)Fluent(b)CGSim

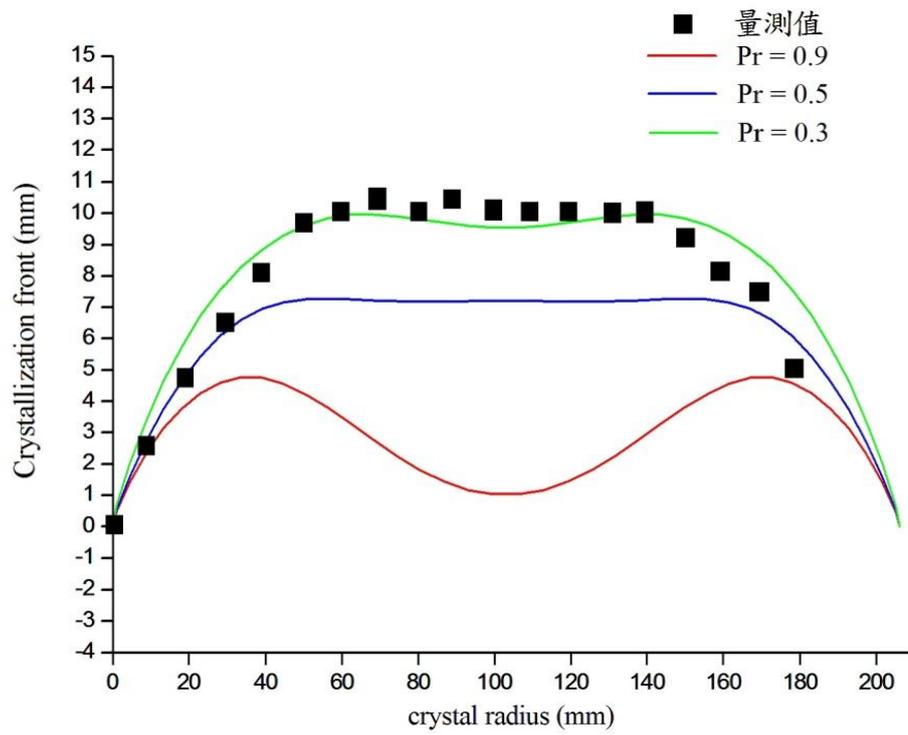


圖 4-20 Prandtl number 與液固界面關係圖

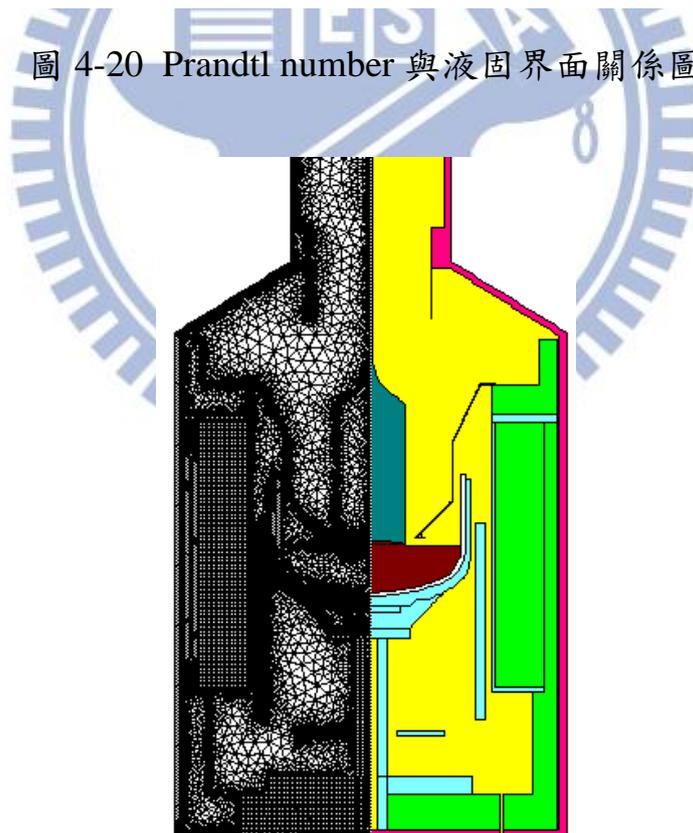
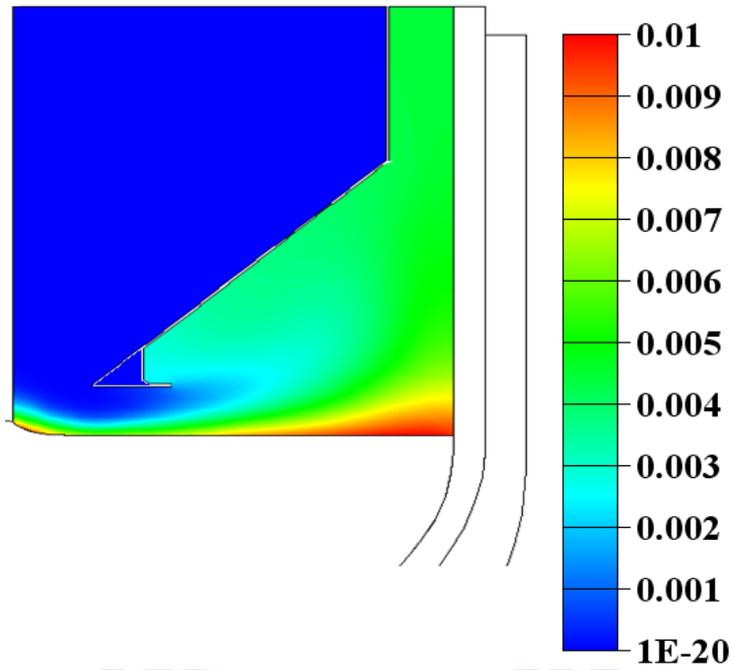
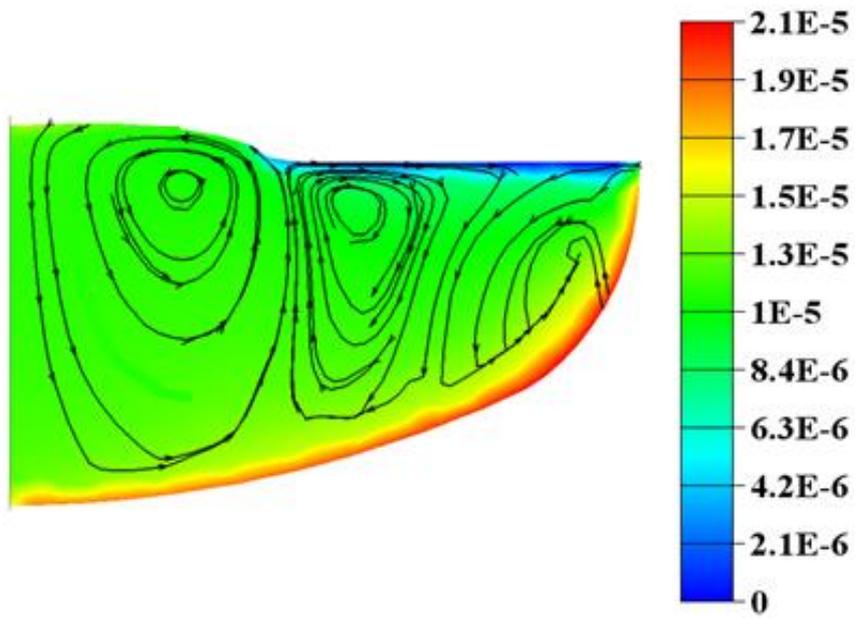


圖 4-21 KX150 架構與網格示意圖



(a)



(b)

圖 4-22 氧化物濃度分布圖(a)氣體流場(b)熔湯內

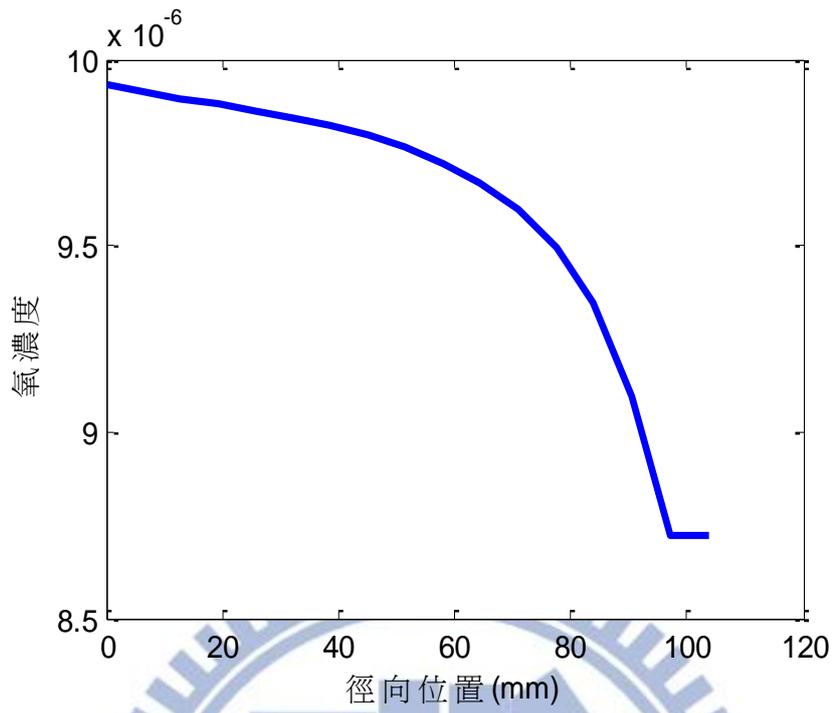


圖 4-23 液固界面之氧濃度分佈

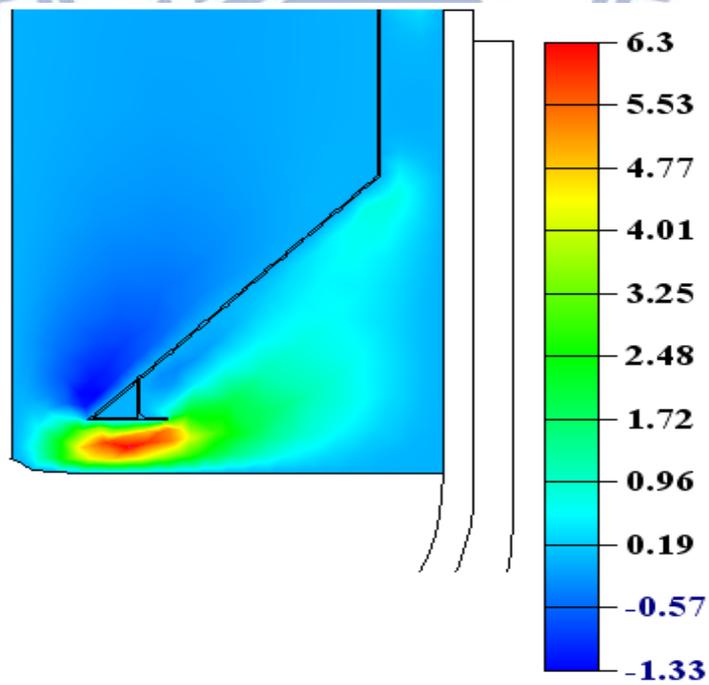


圖 4-24 氣體流場之徑相速度分佈圖(m/s)

第五章 結論

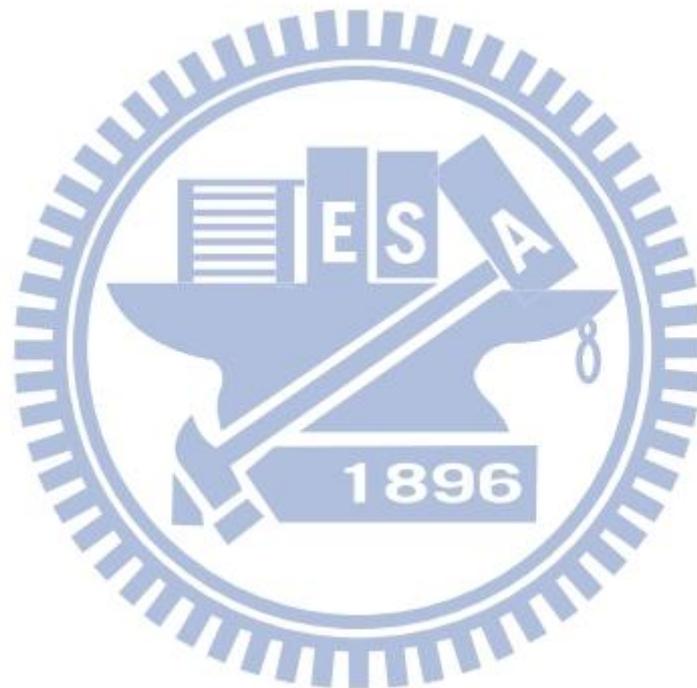
本研究成功利用 CGSim 完成動態長晶的模擬工作，以及穩態的氧濃度分佈。根據文獻[33]在模擬時發現 Chien k- ϵ 紊流模式與實驗數據較為吻合，所以在用 Fluent 模擬二維穩態長晶之熱流場時便採用 Chien k- ϵ 紊流模式，但由於此版本 CGSim 為了考慮氧偏析的影響，在求解流場時 CGSim 是採用 one equation 紊流模式。

在動態長晶模擬的研究中，同時設定晶棒拉速和加熱器功率大小來模擬時，晶身長隨拉伸時間之變化和實際測量值非常接近，且誤差小於 10%，因此本文成功利用 CGSim 完成動態長晶模擬工作，亦發現只設定拉速進行模擬的情況下，CGSim 自行運算加熱器功率也很準確，因此便推測未來製程即使變化拉速，便能透果此模擬方法得到相對應的加熱器功率大小，達成最佳化設計之目的。

以 Fluent 模擬二維穩態長晶之熱流場分析而言，本文成功利用 Fluent 模擬出與 CGSim 相似的爐內氣體流場，為探測 Fluent 產生液固界面之可能性，便透過提高加熱源的設定方法來提高溫度場，也證實 Fluent 是能夠模擬出液固界面，雖然目前還無法用與 CGSim 相同的加熱器功率來模擬出準確的溫度場與熔湯內部的流場，這也提供我們未來用 Fluent 模擬柴氏長晶法之改善的方向，將朝石墨加熱器到熔湯之熱輻射問題來改善。

本文也成功利用 CGSim 模擬出晶爐內之氧濃度分佈，氣體流場的氧濃度也符合速度大小對其分佈的影響，流場速度大則濃度較低，流場速度小則濃度較高，矽熔湯內的氧主要是來自於石英坩堝的熔解，所以鄰近石英坩堝的熔湯氧濃度較高，大部分的氧會從矽熔湯表

面揮發，因此靠近矽熔湯表面之氧濃度較低。偏析主要是說明在晶棒與熔湯之液固界面處會有氧的傳輸現象，因此氧會藉由內部流場被帶到液固界面處後，再傳輸到固體晶棒中，如此一來液固界面和矽熔湯表面變會有很大的濃度差異。實際製程中晶棒中心的氧濃度會大於外圍的氧濃度，若為改善此濃度分佈不均的現象，除了液固界面要平整之外，由流線圖可以了解還可透過改變坩堝與晶棒的轉速等方法來改善熔湯的內部對流程度，藉其攪拌效使熔湯內氧濃度分佈更為均勻。



參考文獻

- [1] G.K. Teal and J.B. Little, "Growth of Germanium Single Crystals Containing p-n Junctions," *Phys. Rev.*, **78**, 647(1950).
- [2] J.Z. Czochralski, *Phys. Chem.*, **92**, 219(1918).
- [3] W.C. Dash, *J. of Applied Physics*, **30**, 4, 459(1959).
- [4] J.J. Derby and R.A. Brown, "Thermal-capillary analysis of Czochralski and liquid encapsulated crystal growth I. Simulation," *Journal of Crystal Growth*, **74**, 605-624(1986).
- [5] J.J. Derby and R.A. Brown, "Thermal-capillary analysis of Czochralski and liquid encapsulated crystal growth II. Processing strategies," *Journal of Crystal Growth*, **75**, 227-240(1986).
- [6] F. Dupret, et al. "Numerical calculation of the global heat transfer in a Czochralski furnace," *Journal of Crystal Growth*, **79**, 84-91(1986).
- [7] N. Van den Bogaert and F. Dupret, "Dynamic global simulation of the Czochralski process I. Principles of the method," *Journal of Crystal Growth*, **171**, 65-76(1997).
- [8] N. Van den Bogaert and F. Dupret, "Dynamic global simulation of the Czochralski process II. Analysis of the growth of a germanium crystal," *Journal of Crystal Growth*, **171**, 77-93(1997).
- [9] Xiao-Bo Wu and Xu Geng, "Fundamental study of crystal/melt interface shape change in Czochralski crystal growth," *Journal of Crystal Growth*, **169**, 786-794(1996).
- [10] A. Lipchin and R. A. Brown, "Hybrid finite-volume/finite-element simulation of heat transfer and melt turbulence in Czochralski crystal growth of silicon," *Journal of Crystal Growth*, **216**, 192-203(2000).
- [11] K. Takano, et al., "Global simulation of the CZ silicon crystal growth up to 400mm in diameter," *Journal of Crystal Growth*, **229**, 26-30(2001).
- [12] Y.R. Li, et al., "Global simulation of silicon Czochralski furnace in an axial magnetic field," *Journal of Heat and Mass Transfer*, **46**, 2887-2898(2003).
- [13] Shiraishi, Y., et al., "[Growth of silicon crystal with a diameter of 400 mm and weight of 400 kg](#)," *Journal of Crystal Growth*, **229**, 17-21(2001).
- [14] Gorbunov, et al., "Melt flow instability and vortex structures in Czochralski growth under steady magnetic fields," [Energy Conversion and Management](#), **43**, 317-326(2002).
- [15] Gräbner, et al., "Analysis of turbulent flow in silicon melts by optical temperature measurement," [Materials Science and Engineering: B](#), **73**, 130-133(2000).
- [16] Klein, et al., "Numerical simulations of the influence of a traveling magnetic

- field”, *Magnetohydrodynamics* **45**, 557-567(2009).
- [17] Krauze, A., et al., “Unsteady 3D LES modeling of turbulent melt flow with AC travelling EM fields”, *Magnetohydrodynamics* **45**, 605-611(2009).
- [18] Klein, et al., “Numerical simulation of Czochralski crystal growth under the influence of a traveling magnetic field generated by an internal heater-magnet module (HMM)”, *Journal of Crystal Growth*, **310**, 1523-1532(2001).
- [19] Rudolph, P., “Travelling magnetic fields applied to bulk crystal growth from the melt: The step from basic research to industrial scale”, *Journal of Crystal Growth*, **310**, 1298-1306(2008).
- [20] Lechner, C., et al., “Development of a software for the numerical simulation of VCz growth under the influence of a traveling magnetic field”, *Journal of Crystal Growth*, **303**, 161-164(2008).
- [21] Kalaev, V. V., “Combined effect of DC magnetic fields and free surface stresses on the melt flow and crystallization front formation during 400 mm diameter Si Cz crystal growth”, *Journal of Crystal Growth*, **303**, 203-210(2007).
- [22] Kishida, Y., et al., “Geostrophic turbulence in CZ silicon melt under CUSP magnetic field”, *Journal of Crystal Growth*, **273**, 329-339(2005).
- [23] Munakata, T., et al., “Effect of high frequency magnetic field on CZ silicon melt convection”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **47**, 4525-4533(2004).
- [24] Shiraishi, et al., “Prediction of solid-liquid interface shape during CZ Si crystal growth using experimental and global simulation”, *Journal of Crystal Growth*, **266**, 28-33(2004).
- [25] Krauze, A., et al., “Numerical 2D modelling of turbulent melt flow in CZ system with dynamic magnetic fields”, *Journal of Crystal Growth*, **266**, 40-47(2004).
- [26] Ivanov, N. G., et al., “Analysis of magnetic field effect on 3D melt flow in CZ Si growth”, *Journal of Crystal Growth*, **250**, 183-188(2003).
- [27] Vizman, D., et al., “3D numerical simulation and experimental investigations of melt flow in an Si Czochralski melt under the influence of a cusp-magnetic field”, *Journal of Crystal Growth*, **236**, 545-550(2002).
- [28] Virbulis, J., et al., “Numerical investigation of silicon melt flow in large diameter CZ-crystal growth under the influence of steady and dynamic magnetic fields”, *Journal of Crystal Growth*, **230**, 92-99(2001).
- [29] Vizman, D., et al., “Comparison of the predictions from 3D numerical simulation with temperature distributions measured in Si Czochralski melts under the influence of different magnetic fields”, *Journal of Crystal Growth*, **230**, 73-80(2001).
- [30] Wetzel, T., et al., “Numerical model of turbulent CZ melt flow in the presence of AC and CUSP magnetic fields and its verification in a laboratory facility”, *Journal of Crystal Growth* **230**, 81-91(2001).

[31] Lukanin, D. P., et al., “Advances in the simulation of heat transfer and prediction of the melt-crystal interface shape in silicon CZ growth”, Journal of Crystal Growth, 266, 20-27 (2004) .

[32] 林明獻，矽晶圓半導體材料技術，全華圖書，台北，民國九十六年

[33] 陳柏璋，“數值模擬晶棒成長之熱流分析”，國立交通大學，新竹，中華民國九十九年

[34] A.D. Smirnov , V.V. Kalaev, “Development of oxygen transport model in Czochralski growth of silicon crystals”, Journal of Crystal growth,310(2008)2970-2976

