

重力對柴氏法坩堝內暫態流流場之影響

詹益聚¹ 阮岱珈^{1*} 陳進茂²

¹國立虎尾科技大學動力機械工程系 副教授

²國立虎尾科技大學動力機械工程系 學生

摘 要

本研究以數值模擬方法，針對矽溶液在柴氏法(Czochralski method)坩堝內之暫態流及溫度場，隨時間變化之情形加以分析，研究變數包含重力加速度之大小及晶棒之旋轉量。研究結果顯示，隨著重力加速度之降低，對流強度減弱但達穩態之時間縮短，尤以晶棒下方之對流減弱得最為明顯，若加入適當之晶棒旋轉則可加強晶棒下方之對流但會稍微延後達到穩定之時間。

關鍵詞：數值模擬、柴氏法、暫態流及溫度場、重力效應。

*連繫作者：國立虎尾科技大學動力機械工程系，雲林縣虎尾鎮文化路 64 號。

Tel: +886-5-6315410

Fax: +886-5-6312110

E-mail: juan@nfu.edu.tw

壹、前言

近年來隨著科技進步,資訊發達日新月異,電腦已是不可或缺的必要工具,而電腦最主要核心 CPU 及其週邊諸多零組件很多是半導體產品,而這些都是由晶圓加工而來,因此晶圓生長製程顯得格外重要,因為晶圓本身品質的好壞對後段半導體製程有著重大的影響。晶圓生長技術始於 1902,目前使用最多之晶圓為矽晶圓。矽晶圓(Silicon Wafer)之材料—矽之所以在諸多元素或化合物半導體材料中脫穎而出,成為超大型積體電路(ULSI)之基材,其原因大致可歸納為以下兩項:

- (1)矽元素乃地球表面存量最豐富的元素之一,價格相對較為便宜,而其本身的無毒性,以及具有較寬的能階差,即是早期半導體界轉向矽的重要考量。同時矽與氧形成一穩定的鈍態層(Passivation Layer)之二氧化矽,則是積體電路元件在電路設計加工時能否得到一穩定品質之重要變數,而在高頻需求的元件設計上,矽材料則沒有如化合物半導體砷化鎵般的具有高電子游動性而受到青睞。
- (2)從製造成本的考量上,矽晶圓之製造成本較為便宜,且由於矽的鑽石結構較不易發生斷裂的現象,故能發展出大尺寸之晶圓,在晶圓的量產上具有相當大之優勢。

目前生產大尺寸矽晶圓之主要技術為柴氏法(Czochralski method),此方法是由科學家 Polish 和冶金學家 J. Czochralski 以及一些化學家於 1902 年發展出來。在 1916 Jan Czochralski 創立公司生產金屬結晶,發展至今已成為電子業最常用來生產半導體晶片之方法,因為柴氏法生產出來之晶體為單晶的晶格排列,矽的鑽石結構較不易發生斷裂現象,故能大量生產。柴氏法之作用原理為首先對坩鍋加熱,使內部矽熔液保持液態然後在液面接觸低溫矽之種晶棒,與矽棒接觸之矽溶液因溫度到達凝固點而產生結晶,控制晶棒的提拉速率以配合結晶速率,以完成長成晶體之動作。

柴氏法過程會失敗之主要原因在於坩鍋內之溫度分佈及流場控制不當,使坩鍋內的矽沒有完全

熔解,或是初長成之結晶受到一個局部熱源影響再度熔化;也可能在坩鍋內另外產生一低溫區引起結晶化迅速發生,導致雙晶的形成,或者因流場溫度場之不平順導致晶體扭曲等其他缺點,故如何控制坩鍋內之流場及溫度分佈成為以柴氏法製造晶圓能否成功的主要因素。

最近幾年,已有許多研究針對坩鍋內矽溶液之流場加以分析[1-10],這些研究大大的幫助了我們對坩鍋內流場的了解。Sabhapathy and Salcudean[2] 以及 Watanabe, Yi, Hibiya & Kakimoto[4] 曾以實驗方法探討坩鍋之流場的變化情形, Kinney and Brown[5] 和 Muhe et al[6] 則分析柴氏法坩鍋內之對流、傳導與輻射之熱傳效應,另外也有一些學者探討坩鍋內之溫度分佈對晶體生長狀態的影響[7, 8],而余楚宇[9] 則針對坩鍋上方之形狀對長晶之影響加以分析,詹益聚[10] 針對坩鍋壁面溫度對流場與溫度場之影響做了詳細的探討,上述之研究發現晶棒下方之溫度梯度越小、等溫線與晶棒之截面越接近平的狀態、坩鍋之對流速度越慢或是晶棒下方之對流越平緩則可得較佳之晶棒的生長狀態。

無論如何,上述的研究均未針對坩鍋之非穩定之流場及溫度場加以分析,本文即針對坩鍋之晶棒接觸初期之非穩態流場加以分析,並分別探討在微重力場下其流場及溫度場之變化,討論之變數並擴及晶棒和坩鍋之旋轉,期能增進吾人對坩鍋內部對流情形與溫度分佈之控制能力,進而得到較佳之晶圓生長條件。

貳、本文

由於晶體成長之邊界條件、坩鍋之形狀及加熱件均為軸對稱之形式,故本分析模型採用二維軸對稱配合旋轉成一圓桶之條件加以分析,並假設流場為之不可壓縮層流,即流體密度僅隨溫度發生變化,其他物理性質均視為常數。研究之模型尺寸如圖(一)所示。坩鍋內矽溶液之物理性質如表(一)所示。晶棒之溫度維持在矽之結晶溫度 1683 K,坩鍋壁面之溫度則介於 1690°C 和 1710°C 之間,其

溫度分佈根據[10]之研究結果，採用底部之變化由中心之 1710 K 線性往外遞減至 1692 K，垂直壁面變化由下方之 1692 K 往上線性遞減至上方的 1690 K，晶棒及坩鍋之旋轉則加入 Z 方向之切線速度加以呈現，自由液面設定壓力自由度為零。

本文採用數值分析軟體 ANSYS 進行數值解之主要架構，以分析坩鍋內晶棒長晶之溫度場及流場隨時間、重力、晶棒及坩鍋之旋轉等變數之影響。加入控制坩鍋形狀、坩鍋底部及垂直壁面溫度分佈及坩鍋與晶棒旋轉部分之程式設計，採用數值方法為有限元素法，容許之最大誤差定為 1×10^{-6} ，所建構成功之程式架構，除完成本文之分析以外，尚可輕易改變各種不同之坩鍋尺寸、壁面溫度分佈及旋轉狀態以探討其坩鍋內部流場及溫度場之變化。

本研究在前處理方面，以半徑 3.7 cm、高 3.6 cm 之基本尺寸加以分析，此尺寸乃根據 Sabhapathy and Salcudean[2] 之研究文獻而定，期能與其結果做一初步比較。元素形式選內建之 Fluid 141，格點之選定經各種不同格點數加以分析比較後，設定邊緣長度為 0.04，網格數 8046，其計算格點如圖(二)所示。求解部分主要設定為暫態狀態下密度隨溫度變化而發生變化，其它如比熱、重力加速度、外界溫度、出口之壓力自由度、熔點、熱傳導係數、黏度、膨脹率等性質設為常數，在執行上設定其收斂條件為 1×10^{-6} 。研究之初始條件設定為熔液溫度 1690 K，在時間 $t=0$ 時，晶棒溫度為 1683 K，且壁面溫度如前所述開始進行數值分析之求解過程。

求解完成後，最後進入後處理階段，使用最後的結果，利用此結果畫出流場溫度圖和流線圖，對於某些流場，吾人使用流體軌跡的方式，針對坩鍋內的渦流所產生的流場附近作放大觀察，可看出流體分子之流動軌跡。

將本研所得之結果與 Sabhapathy and Salcudean[2] 之結果作一比較，發現本文以數值模擬方法的結果和其誤差均在 5% 以內，為一可接受之結果。並進一步針對各種不同之變數加以分析比較，以求得所需之結果。

參、結果與討論

本研究首先針對柴氏法在非穩定態之發展加以分析。圖三(a、b、c、d) 分別代表在重力為 9.81 m/s^2 之狀態下在 $t=1$ 、10、20 及達到穩定狀態 $t=61$ 之流場及溫度場。由圖三(a) 可知在 $t=1$ 時，由於坩鍋壁加熱面積大，故形成了一個大的逆時針渦流，而晶棒下方，由於晶棒之低溫亦產生了一個小的順時針渦流，其溫度場則在晶棒下方形成一很大之溫度梯度，在靠近垂直壁面處，則有一近乎平行於垂直壁面之溫度分佈。

隨著時間的推移在 $t=10$ 時晶棒下方之溫度梯度漸次降低，而在流線圖則呈現上方之渦流漸次擴大，下方之逆時針渦旋則漸漸縮小之趨勢，此一現象在 $t=20$ 時已形一上下兩渦旋分庭抗禮之現象，上方渦旋之流線函數已由 $t=10$ 之 $0.382 \text{ cm}^2/\text{s}$ 增至 $t=20$ 之 $1.223 \text{ cm}^2/\text{s}$ ，下方渦旋之流線函數則由 $t=10$ 之 $-2.012 \text{ cm}^2/\text{s}$ 減少至 $t=20$ 之 $-1.639 \text{ cm}^2/\text{s}$ ，溫度梯度則愈顯平滑，此一變化之現象持續發展至 $t=61$ 其流場之消長趨於穩定，上方之渦旋強度增至 $1.639 \text{ cm}^2/\text{s}$ 下方渦旋則減至 $-1.964 \text{ cm}^2/\text{s}$ ，若將時間再次增加，則不再有明顯之變化，故吾人可斷定，重力為 9.81 m/s^2 時，其達到穩態之時間為 $t=61$ ，若仔細觀察溫度場之變化，可發現其收斂之時間較流場快， $t=20$ 和 $t=61$ 之溫度場幾乎是相同的可見在 $t=20$ 時溫度場即已接近收斂。

現若吾人將重力加速度縮小至 0.0981 m/s^2 以研究在微小重力下之流場及溫度場之變化情形，圖四(a、b、c、d) 分別代表其 $t=1$ 、10、20 及達到穩定態之 $t=21$ 的流場及溫度場之變化圖。則可發現在 $t=1$ 之流場及溫度場如圖四(a) 與 $g=9.81 \text{ m/s}^2$ ， $t=1$ 時之圖三(a) 非常相似，只是其渦旋強度明顯因重力加速度之降低而大幅度的下降，其降幅甚至大於重力加速度之降幅，而當時間增加時，其上方之渦旋亦呈小幅增強之態勢，其中心點漸往外移，不過與 $g=9.81 \text{ m/s}^2$ 相較，上方渦旋之發展顯然較為緩慢，且在整個過程當中，上方渦旋之發展並未抑制下方渦旋之成長，由圖四(b、c) 二圖相

較即可知下方渦旋仍由 $t = 10$ 之 $0.0329 \text{ cm}^2/s$ 增強至 $t = 20$ 之 $0.0433 \text{ cm}^2/s$ ，若與 $g = 9.81 \text{ m/s}^2$ 相較，其下方渦旋強度減弱為 $1/40$ ，而上方渦旋強度則減弱為 $1/123$ ，可見重力加速度之降低，大幅降低晶棒下方流場的流動，其達穩定狀態之時間則為 $t = 21$ ，此一時間較 $g = 9.81 \text{ m/s}^2$ 提早許多如圖四(d) 所示。

現若再將重力加速度降至 0.00981 m/s^2 ，則其現象與 $g = 0.0981 \text{ m/s}^2$ 類似，其收斂時間仍為 $t = 21$ ，下方渦旋較上方渦旋之範圍明顯擴大如圖五所示，若與 $g = 9.81 \text{ m/s}^2$ 相較，重力減為 $1/1000$ ，下方渦旋強度減為 $1/490$ ，上方渦旋強度減為 $1/1600$ ，可見重力對上方渦旋之強度有較大之影響。在溫度場之變化上，若仔細觀察在三個不同重力下，其收斂至穩態之溫度場如圖三(d)，圖四(d)，圖五，可發現當重力下降時其溫度場之分佈較為均勻，且在晶棒下方之等溫線近乎與晶棒底部平行之情形，此一現象對長晶顯然較為有利。

接著本研究針對晶棒之旋轉對坩堝內部之溫度場及流場的影響加以分析。圖六(a、b、c、d) 為重力加速度為 0.0981 m/s^2 晶棒旋轉 15 rpm 時，坩堝內之流場及溫度場隨時間變化之情形，圖六 a 為 $t = 5$ 之等溫線與流線圖，由圖可知，由於受到晶棒旋轉之影響，在晶棒附近形成了一個大的渦旋，此一大渦旋隨著時間的增加有漸次外移的現象，此一外移亦壓縮小下方渦旋使其漸漸縮小如圖六(b)，且隨著時間的增加，晶棒下方之溫度梯度亦隨之減少，在當 $t = 20$ 時之圖六(c)，上方之渦旋已經佔據了整個上半部之空間，此時可明顯的看出上下二渦旋之消長，若與不旋轉時之結果如圖四(c)相較，可發現因旋轉產生之效益是非常明顯的。

對同一轉速，但重力加速度分別為 9.81 m/s^2 及 0.00981 m/s^2 之穩定流場及溫度場的影響如圖七(a、b)所示，由圖可知在 $g = 0.00981 \text{ m/s}^2$ 時，此一旋轉明顯的加大上方順時針渦旋之強度，與不旋轉之狀況如圖(五) 相較其強度增加了 170 倍，但此舉也壓抑了逆時針渦旋的成長，使其強度只剩原有的一半，但反觀 $g = 9.81 \text{ m/s}^2$ 之情形，此一晶棒旋轉之效應則不甚明顯，比較圖七(a)與圖三(d)就可

知二者之差異不大。

綜觀上述針對晶棒旋轉對流場影響之分析，可明顯的看出，當 $g = 9.81 \text{ m/s}^2$ 時，由於因重力影響而產生之對流強度大，故晶棒的旋轉對其流場之影響並不明顯，但當重力之影響減弱時，由於其本身之對流強度亦隨之減弱，故此時所加入晶棒之旋轉，即可有效的控制其流場的變化，明顯的加強其接觸面處之對流強度，而此一晶棒之擾動對流場由暫態至穩態之時間有明顯的影響。

由分析結果觀之，由於晶棒之擾動，加大了對流之強度，故不管在何種重力加速度之狀態下，其達到穩定態之時間均延長了，在圖八(a、b、c)分別顯示在晶棒旋轉 5 rpm 時，三種重力加速度達到穩定時之流場及溫度分佈圖，由圖可知，其收斂時間延後之程度與初始流場之強度有關，在 $g = 9.81 \text{ m/s}^2$ ，由於其原始對流強度大，故受到 5 rpm 之干擾只使收斂時間 $t = 61$ 小延至 $t = 62$ ，而在 $g = 0.0981 \text{ m/s}^2$ 時，其收斂時間，則由 $t = 21$ 延長至 $t = 27$ ，但在 $g = 0.00981 \text{ m/s}^2$ ，則收斂時間大幅度的增加(由 $t = 21$ 增至 $t = 51$)，故吾人可知，在微重力狀況下，晶棒之旋轉會使非穩定態之時間拉長。

肆、結論

本文以數值模擬方法，使用 ANSYS 軟體，針對以柴氏法生產矽晶圓之坩堝內部矽溶液的非穩定對流場及溫度場加以分析，研究變數包含重力加速度之大小及晶棒轉速。

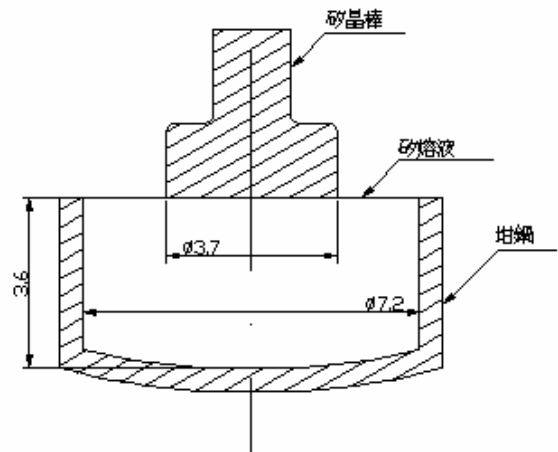
研究結果顯示，加熱初期，首先產生一逆時針旋轉之渦旋，但隨著時間的增加，晶棒下方產生之順時針渦旋漸次加大，最後形成兩個旋轉方向相反之渦旋相互抗衡之狀態。當重力加速度減少，達到穩定流之時間減少，對流強度隨之減弱，尤以晶棒下方之渦旋大幅之減弱形成上小下大之兩個不同方向的渦旋，加入晶棒之旋轉則可加大上方之對流效應。尤以在微重力狀態下最為明顯，但晶棒之旋轉會拉長非穩定流之時間。

參考文獻

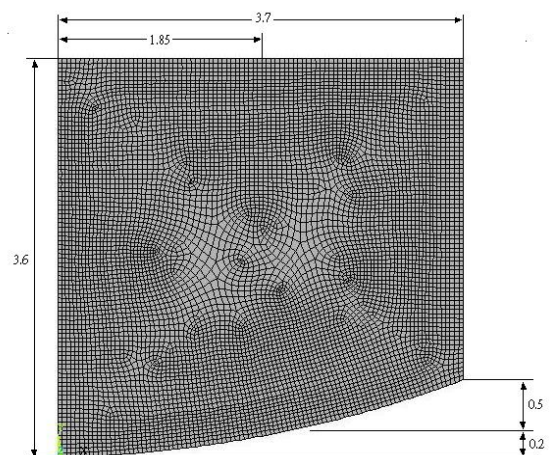
1. N. Kobayashi, J., Oxygen transport under an axial magnetic field in Czochralski silicon growth, Crystal Growth, Vol.108, pp.240-199.
2. P. Sabhapathy, M. E. Salcudean, Numerical study of Czochralski growth of silicon in an axisymmetric magnetic field, J. Crystal Growth, Vol.113, pp.164, 1991.
3. H. Hirata, K. Hoshikawa, Three-dimensional numerical analyses of the effects of a cusp magnetic field on the flows, oxygen transport and heat transfer in a Czochralski silicon melt, J. Crystal Growth, Vol.125, pp.181, 1992.
4. M. Watanabe, K. W. Yi, T. Hibiya, K. Kakimoto, Direct observation and numerical simulation of molten silicon flow during crystal growth under magnetic fields by X-ray radiography and large-scale computation. Prog. Crystal Growth Characterization Mater, Vol.38, pp.215, 1999.
5. T. A. Kinney, R. A. Brown, Application of turbulence modeling to the integrated hydrodynamic thermal-capillary model of Czochralski crystal growth of silicon, J. Crystal Growth, Vol.132, pp.551, 1993.
6. A. Muhe, R. Backofen, J. Fainberg, G. Muller, E. Dornberger, E. Tomzig, W. Von Ammon, Oxygen distribution in silicon melt during a standard Czochralski process studied by sensor measurements and comparison to numerical simulation, J. Crystal Growth, Vol.198-199, pp.409, 1999.
7. K. Kakimoto, K. W. Yi, M. Eguchi, Oxygen transfer during single silicon crystal growth in Czochralski system with vertical magnetic fields, J. Crystal Growth, Vol.163, pp.138, 1996.
8. K. W. Yi, K. Kakimoto, M. Eguchi, H. Noguchi, Oxygen transport mechanism in Si melt during single crystal growth in the Czochralski system, J. Crystal Growth, Vol.165, pp.358, 1996.
9. 余礎宇, Czochralski 長晶爐流場之數值模擬分析, 國立清華大學動力機械研究所, 碩士論文, 2002。
10. 詹益聚、李龍育、徐健祥、彭耀麟, 矽溶液在柴氏法坩堝內之流場分析, 第二十八屆全國力學會議, 2004。

表一：矽的性質表

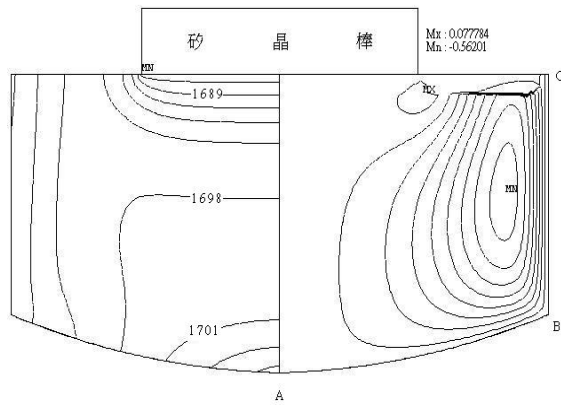
密度	$2530 \frac{kg}{m^3}$
熔點	$1683 ^\circ C$
熱傳導係數	$64.0 \frac{W}{m \cdot K}$
黏度	$7.0 \times 10^{-8} \frac{N \cdot S}{m^2}$
膨脹率	$1.5 \times 10^{-4} K^{-1}$
比熱	$1000 \frac{J}{kg \cdot K}$



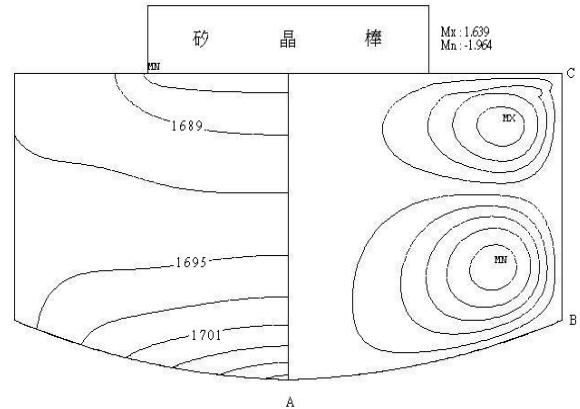
圖一 微重力柴氏法坩堝模型尺寸示意圖(單位：cm)



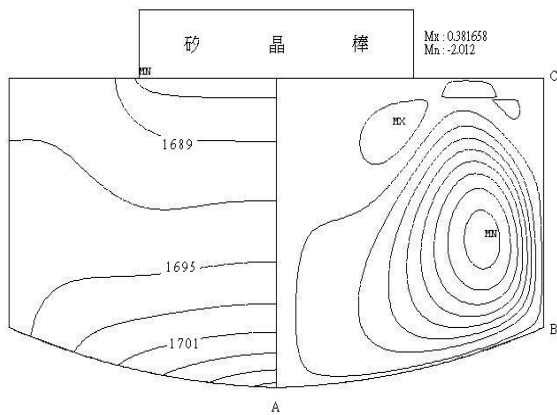
圖二 計算格點分佈圖(單位：cm)



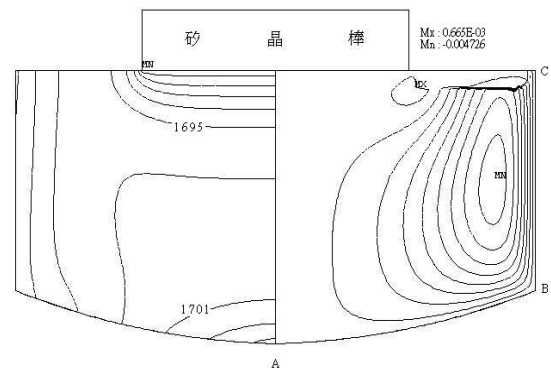
圖三 a 矽晶棒和坩堝皆不轉動，重力 9.81 m/s^2 ，時間 1 秒之等溫線圖(左)及流線函數圖(右)



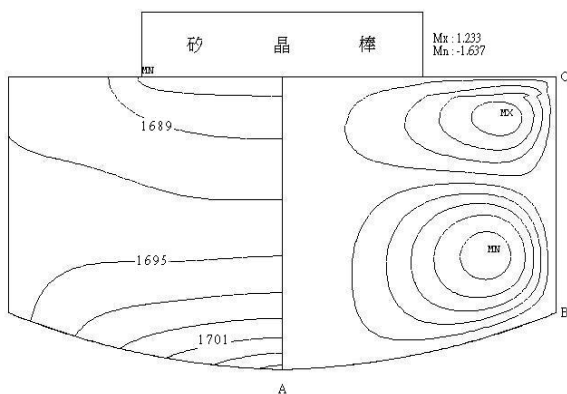
圖三 d 矽晶棒和坩堝皆不轉動，重力 9.81 m/s^2 ，時間 61 秒之等溫線圖(左)及流線函數圖(右)



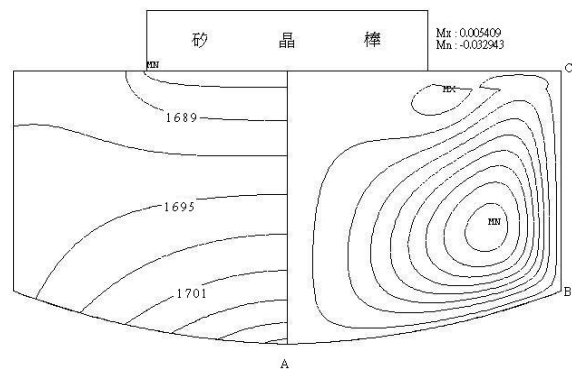
圖三 b 矽晶棒和坩堝皆不轉動，重力 9.81 m/s^2 ，時間 10 秒之等溫線圖(左)及流線函數圖(右)



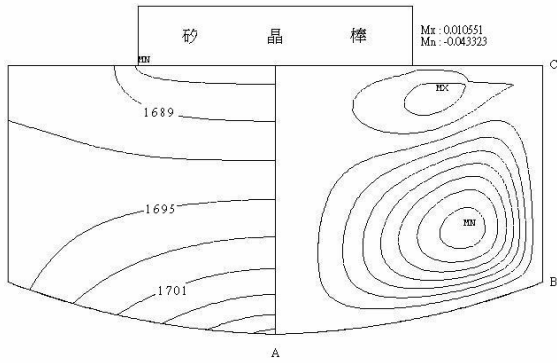
圖四 a 矽晶棒和坩堝皆不轉動，重力 0.0981 m/s^2 ，時間 1 秒之等溫線圖(左)及流線函數圖(右)



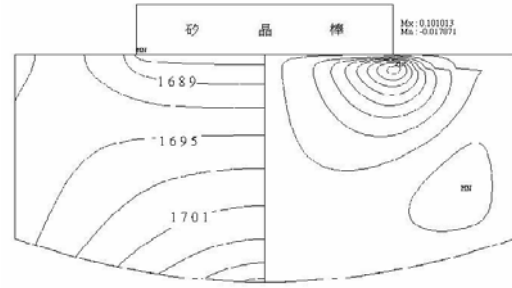
圖三 c 矽晶棒和坩堝皆不轉動，重力 9.81 m/s^2 ，時間 20 秒之等溫線圖(左)及流線函數圖(右)



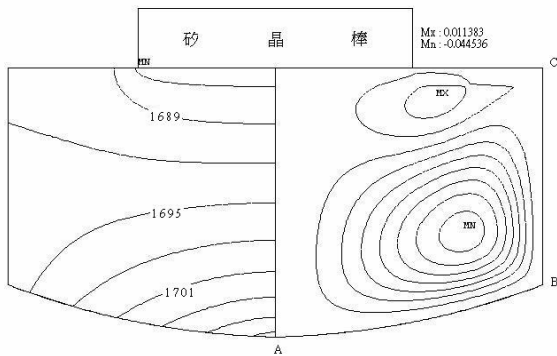
圖四 b 矽晶棒和坩堝皆不轉動，重力 0.0981 m/s^2 ，時間 10 秒之等溫線圖(左)及流線函數圖(右)



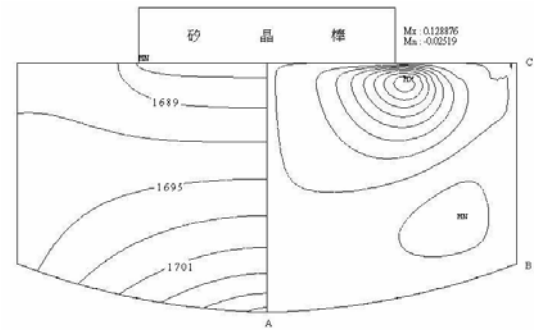
圖四 c 矽晶棒 和坩堝皆不轉動，重力 0.0981 m/s^2 ，時間 20 秒之等溫線圖(左)及流線函數圖(右)



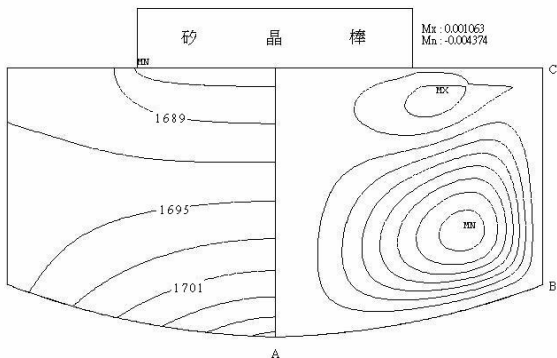
圖六 a 矽晶棒旋轉 15 rpm 和坩堝不轉動，重力 0.0981 m/s^2 ，時間 5 秒之等溫線圖(左)及流線函數圖(右)



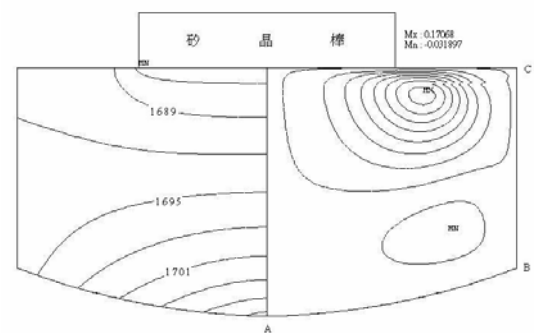
圖四 d 矽晶棒和坩堝皆不轉動，重力 0.0981 m/s^2 ，時間 21 秒之等溫線圖(左)及流線函數圖(右)



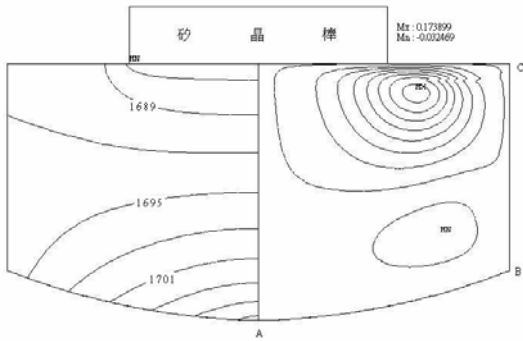
圖六 b 矽晶棒旋轉 15 rpm 坩堝不轉動，重力 0.0981 m/s^2 ，時間 10 秒之等溫線圖(左)及流線函數圖(右)



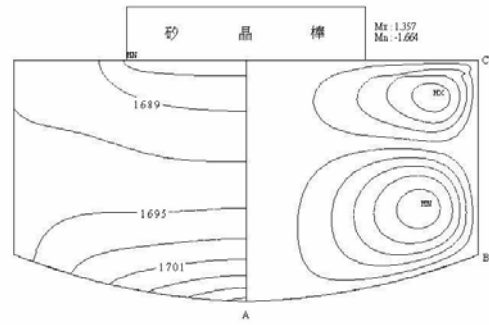
圖五 矽晶棒和坩堝皆不轉動，重力 0.00981 m/s^2 ，時間 20 秒之等溫線圖(左)及流線函數圖(右)



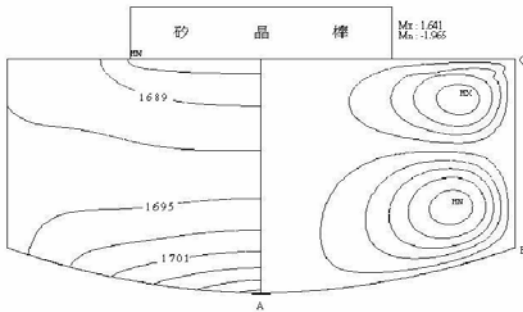
圖六 c 矽晶棒旋轉 15 rpm 和坩堝不轉動，重力 0.0981 m/s^2 ，時間 20 秒之等溫線圖(左)及流線函數圖(右)



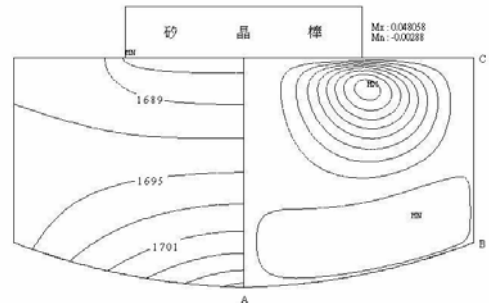
圖六 d 矽晶棒旋轉 15 rpm 和坩堝不轉動，重力 0.0981 m/s^2 ，時間 21 秒之等溫線圖(左)及流線函數圖(右)



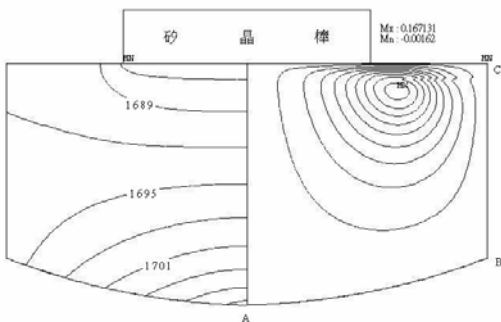
圖八 a 矽晶棒旋轉 5 rpm 和坩堝不轉動，重力 9.81 m/s^2 ，時間 62 秒之等溫線圖(左)及流線函數圖(右)



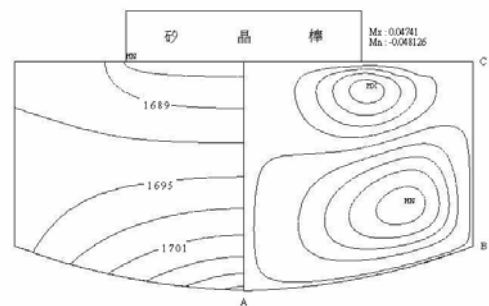
圖七 b 矽晶棒旋轉 15 rpm 和坩堝不轉動，重力 0.00981 m/s^2 ，時間 21 秒之等溫線圖(左)及流線函數圖(右)



圖八 b 矽晶棒旋轉 5 rpm 和坩堝不轉動，重力 0.0981 m/s^2 ，時間 27 秒之等溫線圖(左)及流線函數圖(右)



圖七 a 矽晶棒旋轉 15 rpm 坩堝不轉動，重力 9.81 m/s^2 ，時間 21 秒之等溫線圖(左)及流線函數圖(右)



圖八 c 矽晶棒旋轉 5 rpm 和坩堝不轉動，重力 0.00981 m/s^2 ，時間 51 秒之等溫線圖(左)及流線函數圖(右)

The gravity effect on unsteady convection of Czochralski crucible

Chu-Chan I¹ Jia-Juan Dai^{1*} Mao-Chen Jin²

¹ Association professor, Department of Power Mechanical Engineering, National Formosa University

² College student, Department of Power Mechanical Engineering, National Formosa University

Abstract

The numerical methods are used to analyze flow field and temperature field change by time in the Czochralski crucible. The variables in the study include rotation crystal and acceleration of gravity. The result shows that the decrease of the acceleration of gravity will weaken the intensity of convection, especially the area below the crystal, but the time of unsteady state will be shorter. If the rotation of the crystal in the crucible is joined, the convection below crystal will be strengthened but steady time will postpone.

Key Words: Numerical 、 Czochralski method 、 unsteady convection 、 gravity effect.

*Corresponding Author: Department of Power Mechanical Engineering, National Formosa University, NO. 64, Wen-Hua Road, Hu Wei, Yun Lin, 63208, Taiwan.

Tel: +886- 5-6315410

Fax: +886- 5-6312110

E-mail: juan@nfu.edu.tw

