

图 2 半导体硅片直径随年代的变化

Fig. 2 Change of diameter of semiconductor silicon wafer with age

## 2 单晶制备需要解决的问题

### 2.1 热场和装料量的选择

**装料量选择** 表 1 中比较了 750, 900, 1 050 kg 3 种装料量下产品单晶棒的理论收率。计算表明, 要做到与现在的 300 mm 直径单晶同样的产品收率, 450 mm 单晶必须提高装料量, 装料量小了, 单晶棒长度与硅片直径比(见表 1)就会下降, 这样对经济地生长晶体是不利的, 一般认为, 这个比值最好超过 4.5, 但不能小于 3, 否则在去除晶体头部一定长度(这个部分晶体质量一般不是很好)和可能的尾部滑移, 将不会有多少可用的晶体。这样看来, 450 mm 单晶的投料量应在 700 kg 以上。

表 1 不同热场和投料量下, 200, 300, 450 mm 直径单晶生长效率的理论计算结果

Table 1 Theoretic calculating results of growth efficiency of silicon single crystal of 200, 300, 450 mm in diameter under various hot zone and material input

Wafer diameter/mm	200	300	450		
Plan code	1 <sup>#</sup>	1 <sup>#</sup>	1 <sup>#</sup>	2 <sup>#</sup>	3 <sup>#</sup>
Wafer net area/cm <sup>2</sup>	314	707	1 590	1 590	15 90
Diameter of sa-grown ingot/mm	205	305	456	456	456
Hot zone Size/inch	24	32	40	40	40
Material input/kg	150	320	750	900	1 050
Weight of ingot top/kg	1.52	5	16.7	16.7	16.7
Weight of equi-diameter ingot/kg	117.33	249.57	513.5	663.5	813.5
Weight of tail ingot/kg	6.15	20.43	69.8	69.8	69.8
Scrap in crucible/kg	18.85	24.57	80.24	80.24	80.24
Total weight of ingot/kg	125	275	600	750	900
Total length of ingot/cm	190.48	203.4	221.5	261	300
Length of equi-diametral ingot/cm	160.57	158.6	153.3	192.7	232.1
Theoretical yield of ground ingot/%	78.4	81.6	75.7	79.3	81.9
Ratio of equi-diametral length to wafer diameter	7.8	5.2	3.4	4.2	5.1

**热场尺寸的选择** 图 3 是不同坩埚尺寸及不同投料量下, 所计算的熔体深度, 投料量在 (450 ~ 1 050) kg 时, 石英坩埚尺寸范围在 (36 ~ 48) 英寸。如果在相同

直径的石英坩埚内装更多的硅料, 熔体的深度将会增加, 深的熔体除增加单晶棒无位错生长难度外, 对晶体的质量参数控制也是不利的, 对大直径单晶棒, 一般认为熔体深度超过 400 mm 后, 工艺调节的难度会显著增加。相同装料量下, 大直径石英坩埚中的硅熔体更浅, 由此推测, 使用 44, 48 英寸或更大尺寸的石英坩埚是必然的趋势。图 3 是使用不同尺寸的坩埚所计算的熔体深度与投料量的关系。图 4<sup>[1]</sup> 是生长 450 mm 直径硅单晶时, 理论单晶收率与多晶硅投料量关系。如果要达到 60% 的理论单晶收率, 投料量最小为 500 kg。如果理论单晶收率要达到 80%, 则投料量要超过 1 000 kg。这与表 1 的计算结果相近。

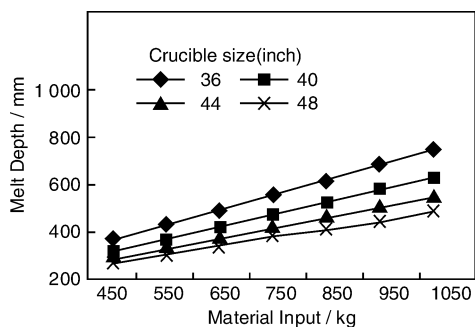


图 3 使用不同尺寸的坩埚所计算的熔体深与投料量的关系

Fig. 3 Effect of Material input on melt depth using different size crucible

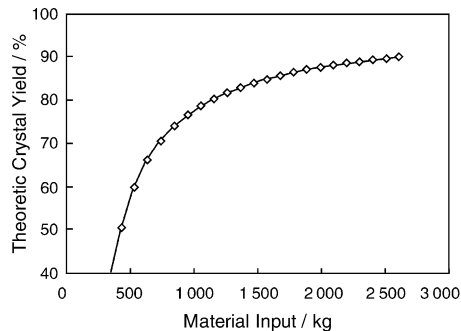


图 4 硅单晶理论成品率和投料量的关系

Fig. 4 Relationship between theoretic crystal yield and material input for growing silicon single crystal of 450 mm in diameter

### 2.2 籽晶承重问题

直径 450 mm 硅片的厚度将在 950  $\mu\text{m}$  以上。要维持并降低单晶制备的成本, 450 mm 单晶收率(合格单晶重量除以总装料量)则要维持在与 200 mm 或 300 mm 单晶收率相当的水平, 晶棒的重量将接近 900 kg。目前的 Dash 技术缩颈工艺为 3 mm 细颈已不能承受这个重量, 一般认为, 3 mm 细硅颈最大只能承受重 (140 ~ 160) kg<sup>[2]</sup>。寻找既能消除位错又能安全承重的缩颈方法, 是首先要

解决的问题。目前解决的方案有两种(见图 5<sup>[2]</sup>), 1 种是加大最小安全细颈的值(最小为(6~9) mm, 图 5a 所示), 原来的细颈直径一般为(3~5) mm; 另 1 种是采用双夹持的晶体提升装置(图 5b 所示)。目前在国外这两种方法都有使用。

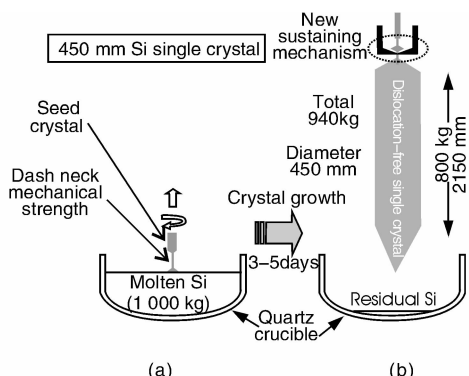


图 5 新的硅单晶籽晶细颈工艺示意图: (a) 加大最小安全细颈法, (b) 双夹持晶体提升法

Fig. 5 Schematic diagram of new necking processing for silicon single crystal seed: (a) magnifying minimum safe fine-neck and (b) elevating seed by bi-clamping

### 2.3 单晶炉装备方面的考虑

单晶炉如果以 40 英寸热场计算, 每炉多晶硅投料量达到(600~1 100)kg, 经计算, 炉筒的内径将超过 68 英寸(1 727 mm)。为了稳定熔体温度, 需配备更强的磁场。因生产周期长和投料量大, 对设备稳定性和安全性要求极高。我国目前的硅单晶炉装备应从以下几个方面重点考虑: ①系统的安全保障系统。主要考虑一氧化硅防爆、升降系统的可靠性以及防止漏硅; ②籽晶与石英坩埚提升系统。籽晶提升装置可以选择硬轴系统, 或增加籽晶夹持装置(见图 5b); 现在的晶升及坩埚电机系统的运行精度不能满足晶体缺陷控制的要求; ③加紧对装料、取拆晶体和热场部件精确定位机械手的设计; ④改进单晶炉的控制系统以满足先进的拉制工艺功能的实现以及生产数据自动采集的要求。在上述研发中, 要重视计算机仿真软件的利用。

### 2.4 单晶生长工艺、相关耗材及测试

单晶生长工艺方面, 应深化研究的有以下几个重点: ①单晶体缺陷的控制。当前先进器件设计线宽在(32~45)nm。根据 2009 ITRS Road Map 估计, 450 mm 直径硅片的应用线宽将小于 22 nm(见图 6<sup>[6]</sup>), 要控制晶体缺陷小到几个 nm 尺寸的缺陷的密度变得更加困难(它们可影响衬底材料 GOI、栅漏电流以及器件其它性能特征)。直径加大以后, 晶体界面附近的径向和纵向温度梯度都会增加, 若要想整个表面保持富空位缺陷,

且中心缺陷密度及尺寸不要过大, 或控制整个表面尽可能富间隙缺陷且保持无位错生长, 温度梯度调节以及界面形状控制变得更加困难。此外, 晶体直径加大后, 必须降低生长速度才能保持晶体正常生长, 这样会延长晶体热态时间(热历史), 更容易产生次生缺陷, 因此, 要探索更先进的缺陷控制方法; ②体金属的控制。主要是控制硅中的 Fe, Ni 等元素; ③热场设计。每套 40 英寸以上的大热场的制造费用超过 500 万元人民币, 加快计算机模拟软件的开发应用, 可减少通过实验获取数据而降低成本; ④掺杂元素分布及氧分布的控制技术、单晶生长参数的调整、晶体收尾技术、晶体应力控制技术<sup>[5]</sup>。

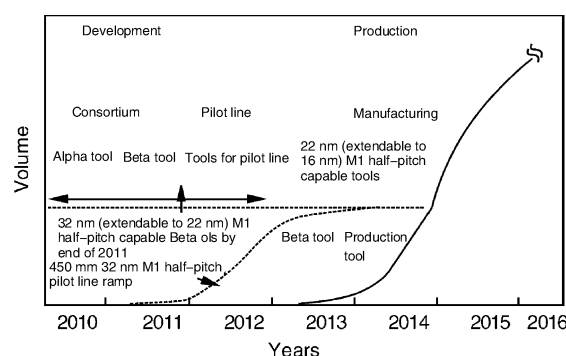


图 6 450 mm 硅片生产与应用预测曲线图  
Fig. 6 Prediction curve of production and application for 450 mm silicon wafer

以上诸问题都是研制 450 mm 直径硅单晶所面临的挑战。我国与先进国家差距很大, 亟须加大力度研发跟进。

### 2.5 硅单晶制备其他要求

**质量参数获取与预测** 现在已经可以利用硅晶体生长的专业商用计算机模拟软件, 部分地替代通过拉晶实验来获取数据预测晶体生长后质量的可能性。德国、比利时和美国都有这种商用软件。模拟结果的误差主要来源于不准确的边界条件输入和过分的简化模型(真实的温场不是轴对称的)。目前可以在两天内完成一道不复杂的二维的模拟计算, 比几年前的 2~4 周的时间缩短了许多。随着计算机运算速度的提升, 预期不久的将来会开发出三维动态模拟软件。

**石英坩埚** 石英坩埚要求能够经受更长的高温时间(内表面不异常析晶、坩埚不变形、坩埚不漏硅、使用期间不破裂)。我国目前可得到的商用石英坩埚直径是 32~34 英寸, 系国外制造。目前国外 34 英寸以上直径的石英坩埚限制对中国出口, 且国外能制作这种石英坩埚的也只有少数几家公司, 它们是: JSQ, Covalent, Momentive Performance Materials (Formerly GE Quartz), Heraeus Quarzglas and Shin-Etsu Quartz Products。当前国内只有少

