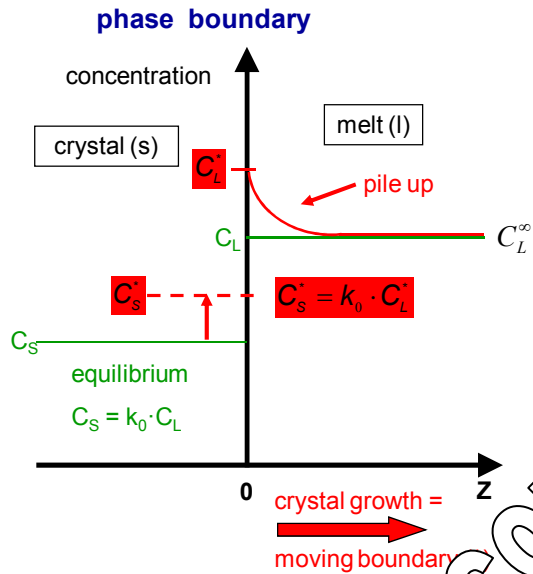


## Effektiver Verteilungskoeffizient $k_{\text{eff}}$



**problem:**  $C_s^*$  is unknown  
only  $C_L^{\infty}$  is known

$\Rightarrow C_s^* = k_{\text{eff}} \cdot C_L^{\infty}$

$k_{\text{eff}} = f(\text{growth rate and species transport in the melt})$

**models for  $k_{\text{eff}}$ :**

$k_{\text{eff}} = \frac{k_0}{1 + \frac{R \cdot \delta}{D}}$

(Burton, Prim, Trivedi, 1953)

$R$ : growth rate  
 $\delta$ : fit parameter  
 $D$ : diffusivity parameter

advanced model of  $k_{\text{eff}}$  without fit parameter, see Ostrogorski and Müller (1992)

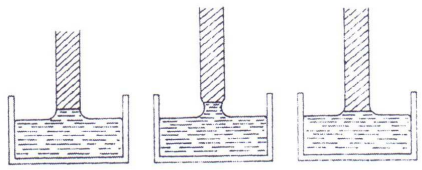
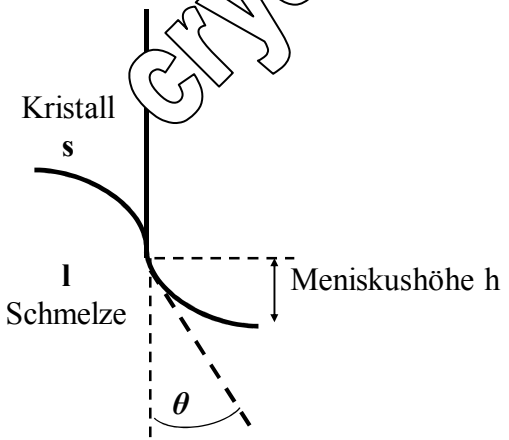
Kap. 4 - 9



CRYSTAL CONSULTING

## Durchmesserkontrolle beim Cz - Verfahren

Höhe  $h$  des Schmelzmeniskus bestimmt Durchmesser des wachsenden Kristalls



- $h = h_0, \theta = 12^\circ$  : konstanter Durchmesser
- $h > h_0, \theta < 12^\circ$  : Durchmesserabnahme
- $h < h_0, \theta > 12^\circ$  : Durchmesserzunahme

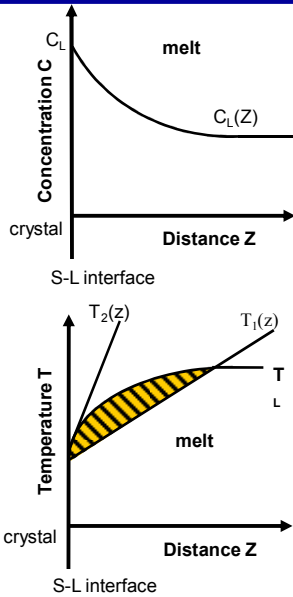
- Durchmesser wird durch Variation der Ziehgeschwindigkeit geregelt;
- Temperaturbeeinflussung ist zu träge  
die Heizleistung wird nur bei starker Abweichung vom Sollwert verändert

Kap. 2 -18



CRYSTAL CONSULTING

## Instabilität der Phasengrenze infolge von Segregation: konstitutionelle Unterkühlung



**case  $T_1(z)$**   
**constitutionally supercooled melt region**  
 $T(z) < T_m$  for  $z > 0$

→ any fluctuation would form a protuberance on the crystal, which would find itself in a region of supercooling and hence can grow very rapidly

### recommendation for melt growth:

avoid constitutional supercooling by:

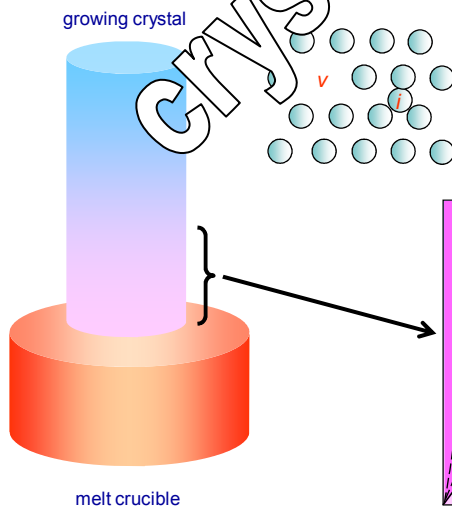
- (i) high temperature gradients in the melt [profile  $T_2(z)$ ]
- (ii) removal of segregated species in front of the interface (e.g. by convection, buoyancy, time-dependent magnetic fields, vibration etc.)

Kap. 4 - 13



## Bildung der Si-Frenkelfekte bei Kristallisation

### Si-Frenkel Cz-Prozess



$V_{Si}$  und  $I_{Si}$  werden beim Kristallwachstum an der Phasengrenze mit der jeweiligen Gleichgewichtskonzentration  $C_{O}^V$ ,  $C_{O}^I$  bei  $T_m = 1420^\circ\text{C}$  gebildet

$C_i > C_v$   
I-reich

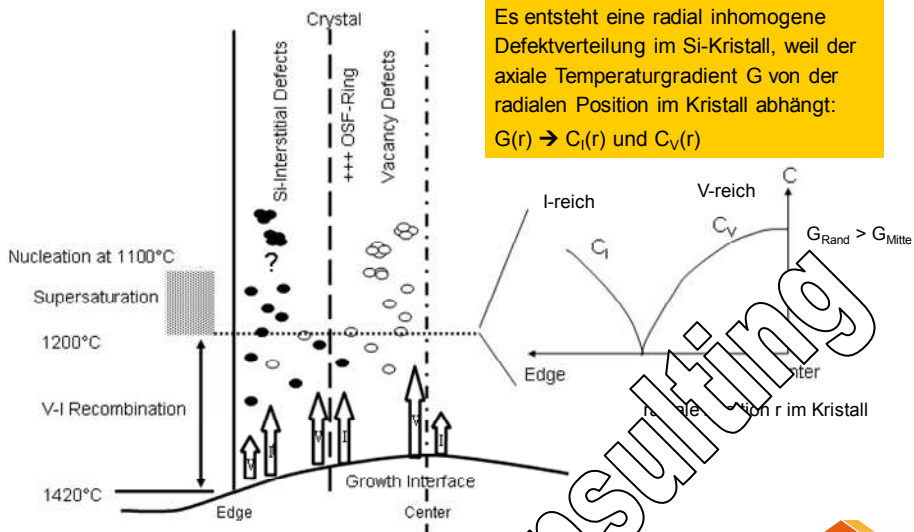
Typisches Ergebnis  
(Erklärung später)

$C_i < C_v$   
V-reich

Kap. 6 - 10



## Defektverteilung im wachsenden Si-Kristall

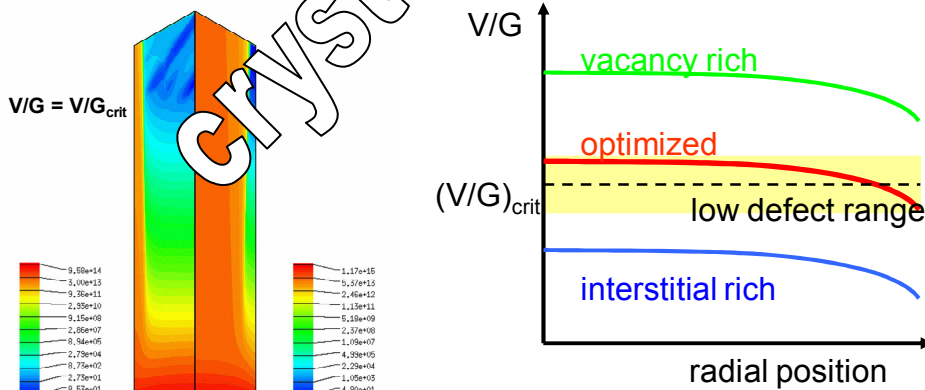


Kap. 5 - 13



## Beispiel für Prozessoptimierung Cz - Si

Goal:  $V/G \approx (V/G)_{crit}$  für alle  $r$  positions

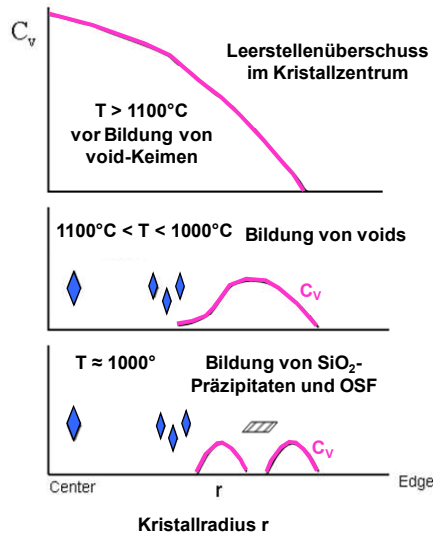


$V$  = growth rate  
 $G$  = axial temperature gradient near the interface

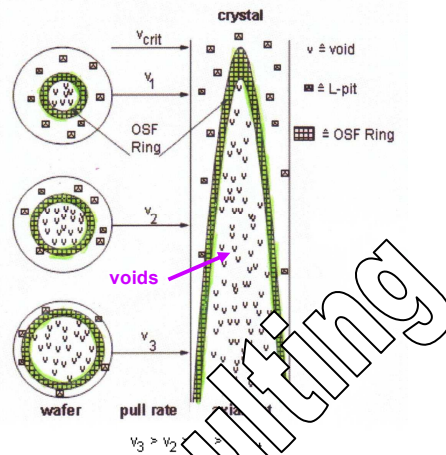
Kap. 5 - 17



## Kinetik der Entstehung von Sauerstoff - korrelierten Defekten in Si, z.B. OSF



Quer- und Längsschnitte durch Si-Cz-Kristall gezüchtet mit unterschiedlichen Raten  $v_1 < v_2 < v_3$



## Quellen und Transportwege für Verunreinigung von Si mit C

### Quelle/Ursache\*

Kontakt von  $\text{SiO}_2$ -Tiegel mit Graphit-Anbauten

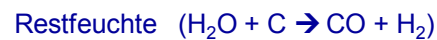


**Transport** von C über gasförmiges CO

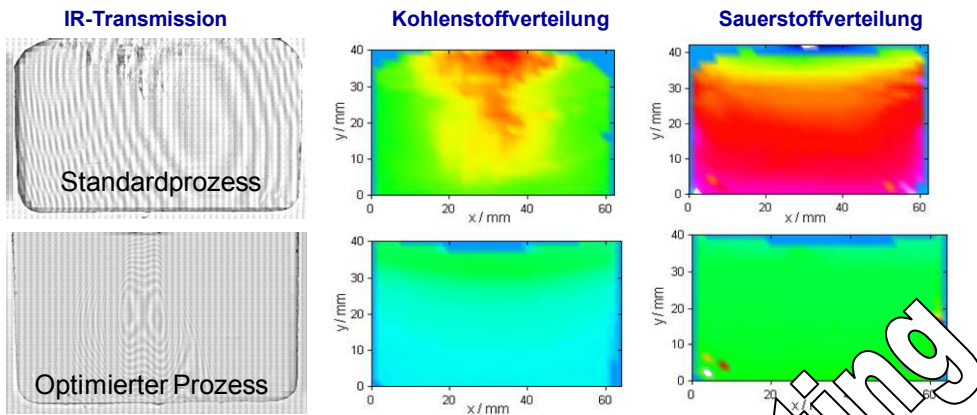
### Vermeidungsstrategien

- Kontakt von  $\text{SiO}_2$  und Graphit vermeiden
- Abtransport von CO (und SiO) mit Gasspülung
- Verhinderung des Einbaus von SiC in Kristall

### \*weitere Quellen



## Reduktion der Konzentration von C und O in der Schmelze durch geeignete Prozessführungen bei Si - VGF (vgl. Kap.7)



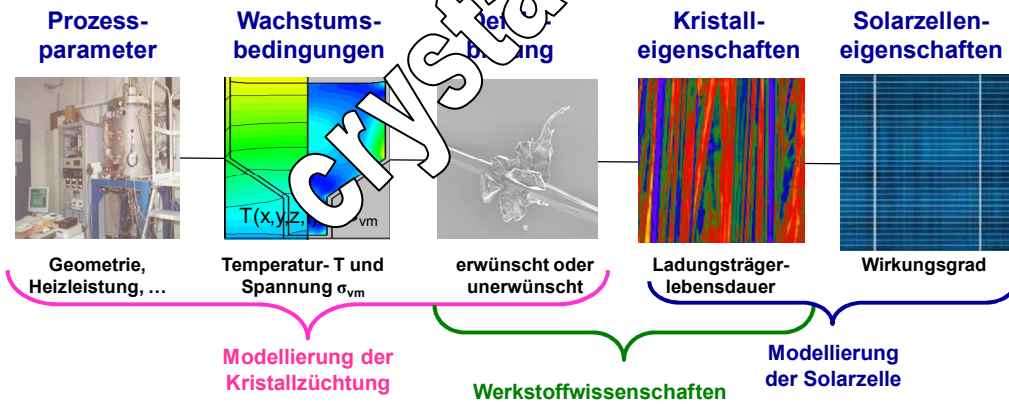
IR-Durchlichtaufnahmen (links) und mittels FTIR gemessene Kohlenstoff- (Mitte) und Sauerstoffverteilungen (rechts) für Standardprozess (oben) und optimierten Prozess (unten).

Quelle: C. Reimann, IISB Erlangen 2007

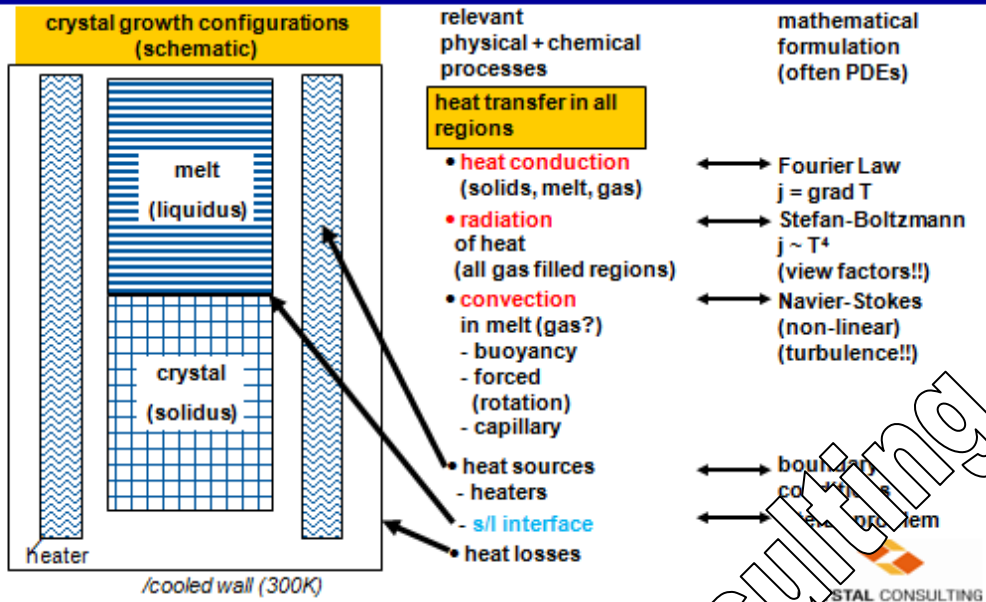


## Zielsetzung der Modellierung

### Verständnis des Zusammenhangs zwischen Kristalleigenschaften und Kristallzuchtungsbedingungen



## Modellierung des Wärmetransports und der Temperaturverteilung $T(x,y,z,t)$ in der Züchtungsanlage



## Prinzip der Simulation eines Züchtungsprozesses

