

制造大直径硅单晶的拉晶方法、系统、硅单晶及介质

相关申请的交叉引用

本申请主张在 2024 年 6 月 25 日在中国提交的中国专利申请 No. 202410827909.8 的优先权，其全部内容通过引用包含于此。

技术领域

本公开实施例涉及半导体制造技术领域，尤其涉及一种制造大直径硅单晶的拉晶方法、系统、硅单晶及介质。

背景技术

近年来随着半导体芯片的发展，高端制程的芯片对于硅片原生缺陷的要求越来越高，这些原生缺陷包括由空位聚集而成的空隙缺陷（Crystal Originated Particle, COP）以及由间隙原子团簇而成的大型晶格间隙型位错团簇缺陷（LDP）。这些缺陷在后端的制造工艺流程（Fabrication Process, Fab）制程中可能会造成栅极绝缘性的恶化以及泄漏电流。

目前主流的控制晶体原生缺陷的长晶方法是根据沃罗诺夫（Voronkov）模型的 V/G 理论，该模型通过晶体拉速 V 与固液界面处的温度梯度 G 的比值 V/G 阐释了在 V/G 大于关键值 ξ 时，会产生 COP 缺陷，在 V/G 小于关键值 ξ 会产生 LDP 缺陷，只有 V/G 在某一关键值 ξ 附近才能得到无缺陷晶体（Defect free）。但是关键值 ξ 值并不是一个固定的值，因此，相关技术中想要得到无缺陷晶体（Defect free）通常需要经过大量的试验来判断在不同的热场以及不同工艺条件下缺陷的分布，导致生产无缺陷晶体的成本较高。

发明内容

有鉴于此，本公开实施例期望提供一种制造大直径硅单晶的拉晶方法、系统、硅单晶及介质，能够通过数值模拟计算快速确定拉晶参数，并利用其有效控制硅熔体流动稳定形成大直径硅单晶，能够解决相关技术生产无缺陷晶体成本较高的技术问题。

第一方面，本公开实施例提供了一种制造大直径硅单晶的拉晶方法，包括：

对拉晶过程进行全局二维模拟，获取在预设拉晶装置模型和预设拉晶参数下拉晶过程中的全局温度分布、速度场分布以及初始固液界面值；

根据所述全局温度分布和所述速度场分布确定边界条件，并基于所述边界条件对所述拉晶过程进行局部三维模拟，确定目标固液界面值；

在全局二维模拟中，调整所述预设拉晶参数，直至所述初始固液界面值与所述目标固液界面值在阈值范围内相等，并将所述调整后的预设拉晶参数作为参考拉晶参数；

根据所述参考拉晶参数模拟计算所述拉晶过程中的模拟缺陷；

根据所述模拟缺陷迭代优化所述参考拉晶参数，直至所述模拟缺陷满足预设条件，并将所述优化后的参考拉晶参数作为目标拉晶参数；

使用所述目标拉晶参数制造无缺陷硅单晶，所述目标拉晶参数包括热场参数和拉晶工艺参数。

在一些示例中，所述基于所述边界条件对所述拉晶过程进行局部三维模拟，确定目标固液界面值包括：

根据所述边界确定模拟场景，并对所述模拟场景添加模拟磁场以对所述拉晶过程进行三维模拟；

基于三维模拟过程中的热场参数、单晶硅的物性参数、硅熔体的湍流模型和流动边界层确定所述目标固液界面值。

在一些示例中，调整所述预设拉晶参数，直至所述初始固液界面值与所述目标固液界面值在阈值范围内相等的步骤包括阈值范围为 10% 以内。

在一些示例中，所述根据参考所述预设拉晶参数模拟计算所述拉晶过程中的模拟缺陷的步骤，包括：

确定拉晶初始态时的拉晶参数分布；

基于所述拉晶参数分布模拟拉晶初始态的缺陷分布；

根据校正系数对所述缺陷分布进行校正，并基于校正后的缺陷分布确定拉晶初始态的缺陷团簇。

在一些示例中，所述缺陷分布包括间隙原子的点缺陷浓度和空位点缺陷浓度；

所述根据校正系数对所述缺陷分布进行校正，包括：

根据历史数据确定校正系数，并基于所述校正系数对所述间隙原子的点缺陷浓度和空位点缺陷浓度中的至少一者进行校正。

在一些示例中，当对于所述间隙原子的点缺陷浓度进行校正时，所述校正系数大于或等于 1.0 且小于或等于 1.3。

在一些示例中，所述预设拉晶参数包括熔体的材料粘度值和热导率；

所述调整所述预设拉晶参数，直至所述初始固液界面值与所述目标固液界面值在阈值范围内相等，包括：

调整所述材料粘度值和/或所述热导率，直至所述初始固液界面值与所述目标固液界面值在阈值范围内相等。

在一些示例中，所述根据所述模拟缺陷迭代优化所述参考拉晶参数直至所述模拟缺陷满足预设条件，包括所述模拟缺陷满足 COP 以及 P 带（P-band）（V-Cluster>25nm），Pv（V-Cluster=12-25nm），Pi（V-Cluster<12nm 且 I-Cluster<0.5nm），LDP（I-Cluster<0.5nm）时，将所述优化后的参考拉晶参数作为目标拉晶参数。

第二方面，本公开实施例提供了一种制造大直径硅单晶的拉晶的系统，包括：

参数获取模块，用于对拉晶过程进行全局二维模拟，获取在预设拉晶装置模型和预设拉

晶参数下拉晶过程中的全局温度分布、速度场分布以及初始固液界面值；

第一确定模块，用于根据所述全局温度分布和所述速度场分布确定边界条件，并基于所述边界条件对所述拉晶过程进行局部三维模拟，确定目标固液界面值；

第一调整模块，在全局二维模拟中，调整所述预设拉晶参数，直至所述初始固液界面值与所述目标固液界面值在阈值范围内相等，并将所述调整后的预设拉晶参数作为参考拉晶参数；

第二确定模块，根据所述参考拉晶参数模拟计算所述拉晶过程中的模拟缺陷；

第二调整模块，用于根据所述模拟缺陷迭代优化所述参考拉晶参数，直至所述模拟缺陷满足预设条件，并将所述优化后的参考拉晶参数作为目标拉晶参数；

晶体制造模块，用于使用所述目标拉晶参数制造无缺陷硅单晶，所述目标拉晶参数包括热场参数和拉晶工艺参数。

第三方面，本公开实施例提供了一种硅单晶，包括：

所述硅单晶是基于第一方面任一项所述的制造大直径硅单晶的拉晶方法制造得到的；

在所述硅单晶中获取的任一晶圆中的空位缺陷尺寸为19nm的缺陷的数量小于或等于25。

第四方面，本公开实施例提供了一种电子设备，所述电子设备包括：处理器和存储器；所述处理器用于执行所述存储器中存储的指令，以实现第一方面所述的制造大直径硅单晶的拉晶方法。

第五方面，本公开实施例提供了一种计算机存储介质，所述存储介质存储有至少一条指令，所述至少一条指令用于被处理器执行以实现如第一方面所述的制造大直径硅单晶的拉晶方法。

本公开实施例提供了一种制造大直径硅单晶的拉晶方法、系统、硅单晶及介质；一方面，在二维模拟的基础上，利用三维模拟来确定目标固液界面值，进而调整预设拉晶参数，使得二维模拟过程中的固液界面值与三维模拟的固液界面值相同，能够提升对拉晶过程中的模拟精度。另一方面，根据二维模拟得到的全局温度分布和速度场分布来确定三维模拟的边界条件，能够降低三维模拟的模型尺寸，降低模拟参数，提升模拟效率。再一方面，模拟过程中根据模拟缺陷对拉晶参数进行了优化，使得模拟得到的目标拉晶参数直接能够用于生产无缺陷晶圆，通过模拟能够避免大量的试验试错，显著降低了实验材料和时间成本，进一步地，能够减少了生产过程中的调整时间，提高了生产效率。

附图说明

图1为本公开实施例提供了一种制造大直径硅单晶的拉晶方法的流程图。

图2为本公开实施例提供了一种二维模拟的温度分布示意图。

图3为本公开实施例提供了一种三维模拟的温度分布示意图。

图4为本公开实施例提供了一种确定模拟缺陷的流程图。

图 5 为本公开实施例提供的一种与热应力以及校正系数相关的缺陷对比示意图。

图 6 为本公开实施例提供的另一种制造大直径硅单晶的拉晶方法的流程图。

图 7 为本公开实施例提供的一种晶体生长变拉速测试缺陷模拟结果与实验结果对比图。

图 8 为本公开实施例提供的一种晶体生长恒拉速测试缺陷模拟结果与实验结果对比图。

图 9 为本公开实施例提供的一种制造大直径硅单晶的拉晶系统的结构示意图。

图 10 为本公开实施例提供的一种电子设备的结构示意图。

通过上述附图，已示出本公开明确的实施例，后文中将有更详细的描述。这些附图和文字描述并不是为了通过任何方式限制本公开构思的范围，而是通过参考特定实施例为本领域技术人员说明本公开的概念。

具体实施方式

这里将详细地对示例性实施例进行说明，其示例表示在附图中。下面的描述涉及附图时，除非另有表示，不同附图中的相同数字表示相同或相似的要素。以下示例性实施例中所描述的实施方式并不代表与本公开相一致的所有实施方式。相反，它们仅是与如所附权利要求书中所详述的、本公开的一些方面相一致的装置和方法的例子。

在半导体材料制备领域，特别是单晶硅的生长过程中，拉晶模拟技术起着至关重要的作用。拉晶模拟技术通过数值模拟方法预测和优化晶体生长过程中的物理现象，如温度分布、固液界面形状、晶体应力和缺陷形成等。

相关技术中的模拟技术能够预测晶体生长中的缺陷分布，通过调整拉晶参数来减少缺陷，提高晶体质量。尽管相关的拉晶模拟技术已经取得了显著的进展，但仍面临一些挑战，具体如下：

相关的二维模拟技术虽然能够快速计算晶体生长的基本参数，如温度分布和速度场，但它们通常假设晶体生长是轴对称的，忽略了实际晶体生长过程中可能出现的三维效应，例如由热应力、晶体应力和非对称流动引起的复杂现象。这些因素可能导致晶体内部缺陷的形成，如空隙缺陷（COP）和大型晶格间隙型位错团簇（LDP），这些缺陷对半导体器件的性能有显著影响。

相关的三维模拟技术能够更准确地捕捉晶体生长的复杂性，包括非对称流动和热传递等，但相比于二维模拟，三维模拟需要处理更多的数据和更复杂的边界条件，导致计算时间显著增加。在实际生产环境中，快速获得模拟结果对于工艺参数的实时调整和优化至关重要。

其次，拉晶过程涉及多个相互依赖的工艺参数，如拉速、温度控制、旋转速度等。相关模拟技术在处理这些参数的优化方面存在局限性，难以同时考虑多种相关因素，从而找到最佳的工艺条件以生产出高质量的单晶硅。

基于此，本公开首先提供一种制造大直径硅单晶的拉晶方法，参照图 1，制造大直径硅单晶的拉晶方法可以包括步骤 S110 至步骤 S160。

在步骤 S110 中，对拉晶过程进行全局二维模拟，获取在预设拉晶装置模型和预设拉晶参数下拉晶过程中的全局温度分布、速度场分布以及初始固液界面值。

在本公开的一些示例实施方式中，可以首先对上述拉晶过程进行全局二维模拟。具体地，可以基于预设拉晶参数，在预设拉晶装置模型上进行拉晶过程的二维模拟，以得到上述拉晶过程中的全局温度分布、速度场分布与初始固液界面值。

其中，全局温度分布可以包括拉晶过程中，晶体在生长到每一个尺寸时的温度分布。举例而言，包括晶体生长到 100mm 处的温度分布、生长到 200mm 处的温度分布等。

在对上述拉晶过程进行二维仿真时，参照图 2，可以模拟晶体 21(crystal)在晶体生长炉内的过程进行，其中，晶体生长炉中可以包括隔热罩 22 (Heat shield) 导流筒 (reflector)、坩埚 24 (crucible)、加热器 (heater)25、热绝缘材料 26 (insulation)等，晶体的原材料熔体 (melt)23 容置在坩埚 (crucible)24 内。

其中，坩埚 (crucible)为由内侧石英坩埚和外侧的石墨坩埚构成的双层结构，是容纳熔体的容器，通常由耐高温材料制成；坩埚的外侧围设有加热器 25 (heater)，用于为晶体生长提供热量；在加热器的外侧围设有热绝缘材料 (insulation)，用来减少热量损失，保持炉内温度稳定；在坩埚的上方设置有导流筒 (reflector)，导流筒的作用是在晶体生长过程中，阻隔来自坩埚内的硅熔体或加热器或坩埚的侧壁的高温的辐射热，并且，对于作为晶体生长界面的固液界面的附近，抑制热扩散到低温的水冷体，将晶体中心部以及晶体外周部的沿轴向的温度梯度与水冷体一同进行控制在晶体生长炉中用来分散热量并保护晶体免受直接辐射的组件，其上标的温度值表示不同区域的温度范围。

可以在二维模拟过程中，获取上述各个部件的温度分布作为上述二维模拟过程中的全局温度分布。基于预设拉晶参数计算初始固液界面值时，可以首先根据确定固液界面的位置。固液界面是晶体生长的关键区域，其形状和稳定性直接影响晶体质量和缺陷的形成。然后在固液界面处，根据物理模型和数值模拟结果计算初始固液界面值，初始固液界面值的具体计算流程可以参照相关技术，在本示例实施方式中不做赘述。

在步骤 S120 中，根据全局温度分布和速度场分布确定边界条件，并基于边界条件对拉晶过程进行局部三维模拟，确定目标固液界面值。

在本公开的一些示例实施方式中，可以根据二维模拟过程的模拟结果中的全局温度分布和速度场分布确定三维模拟的边界条件。具体地，边界条件可以包括温度场以及速度场等，边界条件具体可以在二维模拟的输出中确定，用于确定三维模拟的边界，即约束三维模拟过程中的模型尺寸，以降低模拟过程中整体的计算量。

举例而言，参照图 3 所示，对于 300mm 大尺寸单晶硅晶体的生长由于其使用水平磁场拉晶，所以其熔体内部是三维非对称的流动，所以为了更精准的模拟 300mm 半导体单晶硅生长的实际情况必须使用三维模拟，在获取上述三维模拟的模型时，可以在二维模拟的模型中根据边界条件获取部分区域作为三维模拟的模型。

在本公开的一些示例中，可以在确定三维模拟的边界条件之后，可以添加所需要的水平磁场、尖 (CUSP) 磁场等，基于模拟过程中的热场参数、单晶硅的物性参数、硅熔体的湍

流模型、流动边界层等计算三维模拟过程中目标固液界面值。具体地，将热场参数、单晶硅的物性参数、硅熔体的湍流模型、流动边界层等参数输入值用于计算目标固液界面值的计算软件中得到上述目标固液界面值，其中，计算软件的具体类型参照相关技术，在本示例实施方式中不做具体限定。

其中，热场参数指的是在晶体生长过程中影响热量分布和传递的一系列参数。这些参数可能包括加热器的温度、热流密度、冷却速率、保温材料的热导率以及晶体生长炉的几何结构等。单晶硅的物性参数是指描述单晶硅物理和化学特性的参数，如热导率、比热容、密度、熔点、晶体结构和掺杂浓度等。湍流模型是用来描述和预测湍流流动的数学模型，它考虑了流体的粘性、速度分布和温度梯度等因素。流动边界层是指在固体表面附近的流体层，其中流体的速度从零（在固体表面上）逐渐过渡到自由流速。在晶体生长中，流动边界层的行为会影响热传递、质量传输和缺陷的输运。优化流动边界层的特性，如厚度和速度分布，可以帮助控制晶体生长的质量和速率。

在步骤 S130 中，在全局二维模拟中，调整预设拉晶参数，直至初始固液界面值与目标固液界面值在阈值范围内相等，并将调整后的预设拉晶参数作为参考拉晶参数。

在本公开的一些示例实施方式中，在确定上述目标固液界面值之后，可以基于上述目标固液界面值，对上述预设拉晶参数进行调整，以对上述三维模拟的过程进行参数拟合，使得上述初始固液界面值在阈值范围内与目标固液界面值相等，并将上述调整后的预设拉晶参数作为参考拉晶参数。具体地，可以调整上述拉晶参数中熔体的材料粘度值和/或热导率，以对三维模拟过程进行参数拟合。

其中，上述阈值范围用于表征可允许的误差范围，可以在 10% 的误差范围内，也可以是具体的数值，例如可以是 1~2mm，当然，具体数值可以根据用户需求进行自定义，在本示例实施方式中不做赘述。

在步骤 S140 中，根据参考拉晶参数模拟计算拉晶过程中的模拟缺陷。

在本公开的一些示例实施方式中，在计算得到上述参考拉晶参数之后，可以依据上述参考拉晶参数模拟拉晶过程中的模拟缺陷，具体地，可以根据上述参考拉晶参数基于二维模拟进行初始稳态计算、缺陷团簇计算等，模拟出上述拉晶过程中的模拟缺陷。

在步骤 S150 中，根据模拟缺陷迭代优化参考拉晶参数，直至模拟缺陷满足预设条件，并将优化后的参考拉晶参数作为目标拉晶参数。

在公开的一种示例实施方式中，在得到模拟缺陷之后，可以基于根据上述模拟缺陷调整上述参考拉晶参数，并再次计算模拟缺陷，循环执行调整参考拉晶参数的过程。比如，直至上述模拟缺陷满足预设条件，其中，上述预设条件可以是得到的模拟缺陷最少，即获取最优参考拉晶参数，也可以使上述模拟缺陷的数量满足工艺需求，工艺需求可以根据用户需求进行设定，在本示例实施方式中不做赘述。

需要说明的是，在调整参考拉晶参数中，可以根据拉晶经验和 V/G 理论对参考拉晶参数中的部分或者全部进行调整，具体调整的参数还可以根据用户需求进行设定，在本示例实施方式中不做赘述。

在步骤 S160 中，使用目标拉晶参数制造无缺陷硅单晶，目标拉晶参数包括热场参数和拉晶工艺参数。

在得到上述目标拉晶参数之后，可以基于上述目标拉晶参数拉晶工艺，以得到无缺陷单晶，其中，上述目标拉晶参数中包括热场参数以及拉晶工艺参数，其中，拉晶工艺参数可以包括在拉晶过程中的拉速、温度控制、旋转速度、气体环境、坩埚位置、掺杂剂的种类、浓度和添加时间、晶体直径、冷却速率等。拉晶工艺参数的具体内容还可以根据工艺需求进行添加或者删减，在本示例实施方式中不做赘述。

本公开实施例提供的制造大直径硅单晶的拉晶方法，一方面，在二维模拟的基础上，利用三维模拟来确定目标固液界面值，进而调整预设拉晶参数，以使得二维模拟过程中的固液界面值与三维模拟的固液界面值相同，能够提升对拉晶过程中的模拟精度。另一方面，根据二维模拟得到的全局温度分布来确定三维模拟的边界条件，能够降低三维模拟的模型尺寸，降低模拟参数，提升模拟效率。再一方面，模拟过程中根据模拟缺陷对拉晶参数进行了优化，使得模拟得到的目标拉晶参数直接能够用于生产无缺陷晶圆，通过模拟能够避免大量的试验试错，显著降低了实验材料和时间成本，进一步地，能够减少了生产过程中的调整时间，提高了生产效率。

在本公开的一些示例实施方式中，上述预设拉晶参数可以包括熔体的材料粘度值和热导率、模拟过程中的热场条件以及拉晶工艺参数。

在调整预设拉晶参数，直至初始固液界面值与目标固液界面值在阈值范围内相等，并将调整后的预设拉晶参数作为参考拉晶参数的过程中，可以调整会影响固液界面值的参数，影响固液界面值的参数可以根据经验或实验获取，具体的获取过程在此不做赘述。举例而言，可以调整上述材料粘度值和热导率中的一个或多个，以使得上述初始固液界面值与上述目标固液界面值在阈值范围内相等。

举例而言，可以调整上述晶体在生长过程中不同长度时的材料粘度值，以使得上述初始固液界面值与上述目标固液界面值在阈值范围内相等，例如表 1 是为拟合初始固液界面值与上述目标固液界面值在阈值范围内相等时在不同晶体长度所设定的熔体的材料粘度值。

表 1

晶体长度 (mm)	100	150	200	350	500	700	900	1100	1300	1500	1700	1800	1900
材料粘度 值 (Pa-s)	0.04	0.07	0.1	0.12	0.12	0.12	0.12	0.12	0.1	0.04	0.04	0.04	0.0004

根据表 1 可知，在不同晶体长度时，要使得上述初始固液界面值与上述目标固液界面值相等，需要设置不同或相同的熔体的材料粘度值，也就是说，需要根据晶体生成的当前长度为配置不同的熔体粘度值。

在本公开的一些示例实施方式中，参照图 4，在根据调整后的预设拉晶参数确定拉晶过程中的模拟缺陷时，可以包括步骤 S410 至步骤 S440。

在步骤 S410 中，确定拉晶初始态时的拉晶参数分布。

在本公开的一些示例实施方式中，拉晶初始态可以是上述晶体长度为 100mm 时，或者晶体为 200mm 时的状态，拉晶初始态的晶体的具体长度可以根据用户需要进行自定义，在本示例实施方式中不做赘述。

其中，拉晶参数分布可以包括拉晶初始态时拉晶炉内的温度分布、速度分布以及晶体中的应力分布等。

具体地，可以使用晶体模拟软件对上述拉晶初始态进行初始稳态计算，需要注意的是，在计算时可以同时计算热应力分布，以排除热应力对缺陷的影响，进一步提升得到的目标拉晶参数的精度。

例如，参照图 5，没有考虑热应力 (Without Stress) 表示在模拟过程中没有考虑热应力对点缺陷浓度的影响，考虑热应力 (With Stress) 表示在模拟中考虑了热应力的影响，考虑热应力能够改变点缺陷的分布和浓度。

其中，顶部 (Top) 和尾部 (Tail) 表示的是晶体生长过程中的两个不同区域，具体可以是晶体的两端。晶格间隙半径 $R_v[\text{nm}]$ 表示晶格中间隙位点的体积或尺寸，这里以纳米 (nm) 为单位。由图 5 可知，热应力会改变点缺陷的分布与浓度，因此，本示例实施方式在确定参数分布时，计算了热应力分布，能够使得得到的目标拉晶参数的精度更高，更加贴合与实际实验数据。

在步骤 S420 中，基于参数分布模拟拉晶初始态的缺陷分布。

在本公开的一些示例实施方式中，缺陷分布包括间隙原子的点缺陷浓度和空位点缺陷浓度，在得到上述参数分布之后，可以基于上述参数分布进行稳态初始的晶体内部点缺陷分布计算，具体的计算方式可以参照相关技术，在本示例实施方式中不做赘述。

在步骤 S430 中，根据校正系数对缺陷分布进行校正，并基于校正后的缺陷分布确定拉晶初始态的缺陷团簇。

在本公开的一些示例中，可以基于历史数据获取校正系数，具体地，可以根据具体的历史缺陷分布和历史的实验中的实际缺陷分布确定校正系数，并以上述校正系数对缺陷分布进行校正。

其中，上述校正系数可以包括间隙原子的点缺陷浓度的校正系数和空位点缺陷浓度校正系数，校正系数的具体的值可以根据大量历史数据获取，具体数据不做赘述。

在一些示例中，假设上述校正系数包括间隙原子的点缺陷浓度 C_i 的校正系数，校正系数大约为大于或等于 1.0 且小于或等于 1.3。在一些实施例，校正系数可以提为 1.1，点缺陷浓度 C_i 乘以 1.1 的系数可以达到与实验一致的缺陷分布结果。可以根据上述校正系数对上述间隙原子的点缺陷浓度进行校正，以得到更加准确的缺陷分布，进而得到精度更高的目标拉晶参数。

参照图 5，调整后的间隙原子的点缺陷浓度 $C_i \text{ adjusted}$ 表示根据模拟结果和实验数据对比分析后，对间隙原子的点缺陷浓度进行了调整，能够更准确地反映实际晶体生长过程中的物理现象。

在对上述缺陷分布进行校正之后，可以基于上述校正后的缺陷分布对上述拉晶初始态进

行缺陷团簇计算，具体地，可以采用晶体模拟软件中的缺陷团簇计算功能，模拟点缺陷如何聚集形成更大的缺陷团簇，具体的计算过程可以参照相关技术，在此不做赘述。

在步骤 S440 中，根据拉晶初始态的缺陷团簇，和参考拉晶参数确定拉晶过程中的模拟缺陷。

在本公开的一些示例实施方式中，在确定上述拉晶初始态的缺陷团簇之后，可以根据上述拉晶初始态的缺陷团簇，和参考拉晶参数确定拉晶过程中的模拟缺陷。

具体地，可以将上述拉晶初始态的缺陷团簇以及上述参考拉晶参数作为输入参数，利用上述晶体模拟软件 CGSim 得到上述拉晶过程中的模拟缺陷。

在得到上述拉晶缺陷之后，可以根据上述模拟缺陷对上述参考拉晶参数进行调整，直至上述模拟缺陷满足预设条件。

在一些示例中，上述预设条件可以为 $COP(V\text{-Cluster} > 25\text{nm})$, $P_v(V\text{-Cluster} = 12\text{-}25\text{nm})$, $P_i(V\text{-Cluster} < 12\text{nm} \text{ 且 } I\text{-Cluster} < 0.5\text{nm})$, $LDP(I\text{-Cluster} < 0.5\text{nm})$ 。

其中，COP(Crystal Originated Particle) 缺陷表示空位团簇， P_v 缺陷指具有空位占优的无缺陷区域， P_i 缺陷指间隙原子占优的无缺陷区域，LDP 缺陷指的是间隙原子导致的大型位错坑，I-Cluster (Interstitial Cluster) 表示间隙团簇尺寸，V-Cluster (Vacancy Cluster) 表示空位缺陷尺寸。

需要说明的是，上述预设条件为示例性说明，预设条件的具体形式可以根据工艺需求进行设定，在本示例实施方式中不做赘述。

调整上述参考拉晶参数中的热场参数和/或拉晶工艺参数，在上述模拟缺陷满足预设条件时，将调整后的参考拉晶参数作为目标拉晶参数输出，并作为生产晶棒的拉晶参数。举例而言，上述目标拉晶参数可以为包括最大高斯平面位置 (Maximum Gaussian Plane Position, MGP) 大于或等于 200mm 且小于或等于 150mm；磁场强度 (Magnetic Intensity, MI) 大于或等于 2500 G 且小于或等于 3800G；晶体旋转速度 (Crystal Rotation, S/R) 大于或等于 8 rpm 且小于或等于 12 rpm；坩埚旋转速度大于或等于 -0.2 rpm 且小于或等于 2.5rpm；氩气流量 (Argon Gas Flow Rate, ArGFR) 大于或等于 60 slm 且小于或等于 220 slm；炉内压强 (Furnace Pressure, FP) 大于或等于 20 Tor 且小于或等于 100Tor。

需要说明的是，上述目标拉晶参数的类型和具体数值均为示例性说明，还可以根据用户需求对目标拉晶参数的类型和具体数值进行自定义设置，在此不做赘述。

下面参照图 6 对本公开实施例提供的制造大直径硅单晶的拉晶方法进行说明，该方法可以包括如下步骤：

步骤 S610，对拉晶过程进行全局二维模拟，获取在预设拉晶装置模型和预设拉晶参数下拉晶过程中的全局温度分布、速度场分布以及初始固液界面值。

步骤 S620，根据全局温度分布和速度场分布确定边界条件，并基于边界条件对拉晶过程进行局部三维模拟，确定目标固液界面值。

步骤 S630，调整熔体粘度值和/或热导率。

步骤 S640，判断初始固液界面值是否等于目标固液界面值。

若否，则执行步骤 S630，若是，则执行步骤 S650，确定拉晶初始态时的参数分布。

步骤 S660，基于参数分布确定拉晶初始态的缺陷分布。

步骤 S670，根据校正系数对缺陷分布进行校正，并基于校正后的缺陷分布确定拉晶初始态的缺陷团簇。

步骤 S680，根据拉晶初始态的缺陷团簇，和参考拉晶参数确定拉晶过程中的模拟缺陷。

步骤 S690，根据模拟缺陷调整热场参数和拉晶工艺参数。

步骤 S611，判断模拟缺陷是否满足预设条件。

若否，则执行步骤 S690，若是，则执行步骤 S612，输出目标拉晶参数。

需要说明的是，上述步骤 S610 至步骤 S612 的具体细节上述已经进行了详细说明，因此，在此不做赘述。

在一些示例中，图 7 为本公开实施例提供的一种晶体生长变拉速测试缺陷模拟结果与实验结果对比图，参照图 7，从对比结果来看晶体轴向缺陷模拟结果分布与实验结果一致，模拟结果无缺陷区域的拉速与实际拉速相比误差小于 1% 以下。

图 8 为本公开实施例提供的一种晶体生长恒拉速测试缺陷模拟结果与实验结果对比图，参照图 8，从对比结果来看其晶体径向缺陷模拟结果与实验结果一致，径向缺陷模拟结果与实验结果一致性达 90% 以上，由图 8 可知，19nm 的局部激光散射 (Local laser scatter, LLS) 缺陷的模拟结果也与实验结果一致性较高。

参照图 7 和图 8，能够得到本公开实施例提供的制造大直径硅单晶的拉晶方法得到的模拟结果与实验结果的一致性较高，进而得到的目标拉晶参数的精度也较高。

综上所述，本公开实施例提供的制造大直径硅单晶的拉晶方法，一方面，在二维模拟的基础上，利用三维模拟来确定目标固液界面值，进而调整预设拉晶参数，以使得二维模拟过程中的固液界面值与三维模拟的固液界面值相同，能够提升对拉晶过程中的模拟精度。另一方面，根据二维模拟得到的全局温度分布来确定三维模拟的边界条件，能够降低三维模拟的模型尺寸，降低模拟参数，提升模拟效率。再一方面，模拟过程中根据模拟缺陷对拉晶参数进行了优化，使得模拟得到的目标拉晶参数直接能够用于生产无缺陷晶圆，通过模拟能够避免大量的试验试错，显著降低了实验材料和时间成本，进一步的，能够减少了生产过程中的调整时间，提高了生产效率。进一步的，通过采用校正系数对上述缺陷分布进行了调整，能够使得根据模拟缺陷得到的目标拉晶参数的精度更高，以使得根据目标拉晶参数生成的晶棒的质量更高。

进一步地，本公开还提供一种晶棒，晶棒是由于上述制造大直径硅单晶的拉晶方法得到的目标拉晶参数进行拉晶制造得到的，在所述晶棒中获取的任一晶圆中的空位缺陷尺寸为 19nm 的缺陷的数量小于或等于 25，上述制造大直径硅单晶的拉晶方法的具体过程上述已经进行了详细说明，因此，在此不做赘述。

需要说明的是，在所述晶棒中获取的任一晶圆的空位缺陷尺寸的具体数值以及缺陷的数量还可以根据用户需求进行设定，举例而言，还可以是晶圆中的空位缺陷尺寸为 20nm 的缺陷的数量小于或等于 24，晶圆中的空位缺陷尺寸为 35nm 的缺陷的数量小于或等于 12 等在

本示例中不做赘述。

进一步地，本公开还提供一种制造大直径硅单晶的拉晶的系统，参照图 9 所示，制造大直径硅单晶的拉晶的系统 900 可以包括参数获取模块 910、第一确定模块 920、第一调整模块 930、第二确定模块 940、第二调整模块 950 以及晶体制造模块 960。其中：

参数获取模块 910 可以对拉晶过程进行全局二维模拟，获取在预设拉晶装置模型和预设拉晶参数下拉晶过程中的全局温度分布、速度场分布以及初始固液界面值。

第一确定模块 920 可以用于根据所述全局温度分布和所述速度场分布确定边界条件，并基于所述边界条件对所述拉晶过程进行局部三维模拟，确定目标固液界面值。

第一调整模块 930 可以用于在全局二维模拟中，调整所述预设拉晶参数，直至所述初始固液界面值与所述目标固液界面值在阈值范围内相等，并将所述调整后的预设拉晶参数作为参考拉晶参数。

第二确定模块 940 用于根据所述模拟缺陷迭代优化所述参考拉晶参数，直至所述模拟缺陷满足预设条件，并将所述优化后的参考拉晶参数作为目标拉晶参数。

第二调整模块 950 可以用于根据模拟缺陷调整参考拉晶参数，直至模拟缺陷满足预设条件，并将调整后的参考拉晶参数作为目标拉晶参数。

晶体制造模块 960 可以用于使用所述目标拉晶参数制造无缺陷硅单晶，所述目标拉晶参数包括热场参数和拉晶工艺参数。

在一些示例中，第一确定模块 920 还可以用于根据所述边界确定模拟场景，并对所述模拟场景添加模拟磁场以对所述拉晶过程进行三维模拟；基于三维模拟过程中的热场参数、单晶硅的物性参数、硅熔体的湍流模型和流动边界层确定所述目标固液界面值。

在一些示例中，阈值范围为 10% 以内。

在一些示例中，第一调整模块 930 还可以用于确定拉晶初始态时的参数分布；基于参数分布确定拉晶初始态的缺陷分布；根据校正系数对缺陷分布进行校正，并基于校正后的缺陷分布确定拉晶初始态的缺陷团簇；根据拉晶初始态的缺陷团簇，和参考拉晶参数确定拉晶过程中的模拟缺陷。其中，参数分布包括拉晶初始态时拉晶炉内的温度分布、速度分布以及晶体中的应力分布。

在一些示例中，第一调整模块 930 还可以用于根据历史数据确定校正系数，并基于所述校正系数对所述间隙原子的点缺陷浓度和空位点缺陷浓度中的至少一者进行校正。

在一些示例中，当对于所述间隙原子的点缺陷浓度进行校正时，所述校正系数大于或等于 1.0 且小于或等于 1.3。

在一些示例中，预设拉晶参数包括熔体的材料粘度值和热导率，第一调整模块 930 还可以调整材料粘度值和/或热导率，直至初始固液界面值与目标固液界面值在阈值范围内相等。

在一些示例中，第二确定模块 940 还可以用于调整热场参数和/或拉晶工艺参数，直至模拟缺陷满足预设条件。

在一些示例中，所述根据所述模拟缺陷迭代优化所述参考拉晶参数直至所述模拟缺陷满足预设条件，包括所述模拟缺陷满足 COP 以及 P-band(V-Cluster > 25nm)，Pv

(V-Cluster=12-25nm), Pi(V-Cluster<12nm 且 I-Cluster<0.5nm), LDP(I-Cluster<0.5nm)时, 将所述优化后的参考拉晶参数作为目标拉晶参数。

请参考图 10, 其示出了本公开一个示例性实施例提供的电子设备的结构方框图。在一些示例中, 电子设备可以为智能手机、智能手表、台式电脑、手提电脑、虚拟现实终端、增强现实终端、无线终端和膝上型便携计算机等设备中的至少一种。电子设备具有通信功能, 可以接入有线网络或无线网络。电子设备可以泛指多个终端中的一个, 本领域技术人员可以知晓, 上述终端的数量可以更多或更少。可以理解的, 电子设备承担本公开技术方案的计算及处理工作, 本公开实施例对此不作限定。

应该理解, 上述的装置实施例仅是示意性的, 本公开的装置还可通过其它的方式实现。例如, 上述实施例中单元/模块的划分, 仅仅为一种逻辑功能划分, 实际实现时可以有另外的划分方式。例如, 多个单元、模块或组件可以结合, 或者可以集成到另一个系统, 或一些特征可以忽略或不执行。

另外, 若无特别说明, 在本公开各个实施例中的各功能单元/模块可以集成在一个单元/模块中, 也可以是各个单元/模块单独物理存在, 也可以两个或两个以上单元/模块集成在一起。上述集成的单元/模块既可以采用硬件的形式实现, 也可以采用软件程序模块的形式实现。

集成的单元/模块如果以硬件的形式实现时, 该硬件可以是数字电路, 模拟电路等等。硬件结构的物理实现包括但不限于晶体管、忆阻器等等。若无特别说明, 处理器可以是任何适当的硬件处理器, 比如中央处理器 (Central Processing Unit, CPU)、图形处理单元 (Graphics Processing Unit, GPU)、现场可编程门阵列 (Field-Programmable Gate Array, FPGA)、数字信号处理器 (Digital Signal Processor, DSP) 和特定集成电路 (Application Specific Integrated Circuit, ASIC) 等等。若无特别说明, 存储单元可以是任何适当的磁存储介质或者磁光存储介质, 比如, 阻变式存储器 (Resistive Random Access Memory, RRAM)、动态随机存取存储器 (Dynamic Random Access Memory, DRAM)、静态随机存取存储器 (Static Random-Access Memory, SRAM)、增强动态随机存取存储器 (Enhanced Dynamic Random Access Memory, EDRAM)、高带宽内存 (High-Bandwidth Memory, HBM)、混合存储立方 (Hybrid Memory Cube, HMC) 等等。

集成的单元/模块如果以软件程序模块的形式实现并作为独立的产品销售或使用, 可以存储在一个计算机可读存储器中。基于这样的理解, 本公开的技术方案本质上或者说对现有技术做出贡献的部分或者该技术方案的全部或部分可以以软件产品的形式体现出来, 该计算机软件产品存储在一个存储器中, 包括若干指令用以使得一台计算机设备 (可为个人计算机、服务器或者网络设备等) 执行本公开各个实施例方法的全部或部分步骤。而前述的存储器包括: U 盘、只读存储器 (Read-Only Memory, ROM)、随机存取存储器 (Random Access Memory, RAM)、移动硬盘、磁碟或者光盘等各种可以存储程序代码的介质。

如图 10 所示, 该电子设备 1000 可以包括: 至少一个处理器 1010、存储器 1020、和通信接口 1030。

存储器 1020, 用于存储程序。具体地, 程序可以包括程序代码, 程序代码包括计算机操

作指令。

存储器 1020 可能包含高速 RAM 存储器，也可能还包括非易失性存储器（non-volatile memory），例如至少一个磁盘存储器。

处理器 1010 用于执行存储器 1020 存储的计算机执行指令，以实现前述方法实施例所描述的制造大直径硅单晶的拉晶方法。其中，处理器 1010 可能是一个 CPU，或者是 ASIC，或者是被配置成实施本公开实施例的一个或多个集成电路。

该电子设备 1000 还可以包括通信接口 1030，以通过通信接口 1030 可以与外部设备进行通信交互。在具体实现上，如果通信接口 1030、存储器 1020 和处理器 1010 独立实现，则通信接口 1030、存储器 1020 和处理器 1010 可以通过总线相互连接并完成相互间的通信。总线可以是工业标准体系结构（Industry Standard Architecture, ISA）总线、外部设备互连（Peripheral Component, PCI）总线或扩展工业标准体系结构（Extended Industry Standard Architecture, EISA）总线等。总线可以分为地址总线、数据总线、控制总线等，但并不表示仅有一根总线或一种类型的总线。

可选地，在具体实现上，如果通信接口 1030、存储器 1020 和处理器 1010 集成在一块芯片上实现，则通信接口 1030、存储器 1020 和处理器 1010 可以通过内部接口完成通信。

本公开还提供了一种计算机可读存储介质，该计算机可读存储介质可以包括：U 盘、移动硬盘、只读存储器随机存取存储器、磁盘或者光盘等各种可以存储程序代码的介质，具体的，该计算机可读存储介质中存储有程序指令，程序指令用于上述实施例中的制造大直径硅单晶的拉晶方法。

本公开实施例还提供了一种计算机程序产品，该计算机程序产品包括计算机指令，该计算机指令存储在计算机可读存储介质中；电子设备的处理器从计算机可读存储介质读取该计算机指令，处理器执行该计算机指令，使得该电子设备执行以实现上述各个实施例的制造大直径硅单晶的拉晶方法。

本领域技术人员应该可以意识到，在上述一个或多个示例中，本公开实施例所描述的功能可以用硬件、软件、固件或它们的任意组合来实现。当使用软件实现时，可以将这些功能存储在计算机可读介质中或者作为计算机可读介质上的一个或多个指令或代码进行传输。计算机可读介质包括计算机存储介质和通信介质，其中通信介质包括便于从一个地方向另一个地方传送计算机程序的任何介质。存储介质可以是通用或专用计算机能够存取的任何可用介质。

在上述实施例中，对各个实施例的描述都各有侧重，某个实施例中没有详述的部分，可以参见其他实施例的相关描述。上述实施例的各技术特征可以进行任意的组合，为使描述简洁，未对上述实施例中的各个技术特征所有可能的组合都进行描述，然而，只要这些技术特征的组合不存在矛盾，都应当认为是本说明书记载的范围。

本领域技术人员在考虑说明书及实践这里申请的发明后，将容易想到本公开的其它实施方案。本公开旨在涵盖本公开的任何变型、用途或者适应性变化，这些变型、用途或者适应性变化遵循本公开的一般性原理并包括本公开未申请的本技术领域中的公知常识或惯用技

术手段。

应当理解的是，本公开并不局限于上面已经描述并在附图中示出的精确结构，并且可以在不脱离其范围进行各种修改和改变。本公开的范围仅由所附的权利要求书来限制。

权利要求书

1. 一种制造大直径硅单晶的拉晶方法，包括：

对拉晶过程进行全局二维模拟，获取在预设拉晶装置模型和预设拉晶参数下拉晶过程中的全局温度分布、速度场分布以及初始固液界面值；

根据所述全局温度分布和所述速度场分布确定边界条件，并基于所述边界条件对所述拉晶过程进行局部三维模拟，确定目标固液界面值；

在全局二维模拟中，调整所述预设拉晶参数，直至所述初始固液界面值与所述目标固液界面值在阈值范围内相等，并将所述调整后的预设拉晶参数作为参考拉晶参数；

根据所述参考拉晶参数模拟计算所述拉晶过程中的模拟缺陷；

根据所述模拟缺陷迭代优化所述参考拉晶参数，直至所述模拟缺陷满足预设条件，并将所述优化后的参考拉晶参数作为目标拉晶参数；

使用所述目标拉晶参数制造无缺陷硅单晶，所述目标拉晶参数包括热场参数和拉晶工艺参数。

2. 根据权利要求1所述的方法，其中，所述基于所述边界条件对所述拉晶过程进行局部三维模拟，确定目标固液界面值包括：

根据所述边界确定模拟场景，并对所述模拟场景添加模拟磁场以对所述拉晶过程进行三维模拟；

基于三维模拟过程中的热场参数、单晶硅的物性参数、硅熔体的湍流模型和流动边界层确定所述目标固液界面值。

3. 根据权利要求1所述的方法，其中，调整所述预设拉晶参数，直至所述初始固液界面值与所述目标固液界面值在阈值范围内相等的步骤包括阈值范围为10%以内。

4. 根据权利要求1所述的方法，其中，所述根据参考所述预设拉晶参数模拟计算所述拉晶过程中的模拟缺陷的步骤，包括：

确定拉晶初始态时的拉晶参数分布；

基于所述拉晶参数分布模拟拉晶初始态的缺陷分布；

根据校正系数对所述缺陷分布进行校正，并基于校正后的缺陷分布确定拉晶初始态的缺陷团簇；

根据拉晶初始态的缺陷团簇，和参考拉晶参数确定拉晶过程中的模拟缺陷。

5. 根据权利要求4所述的方法，其中，所述缺陷分布包括间隙原子的点缺陷浓度和空位点缺陷浓度；

所述根据校正系数对所述缺陷分布进行校正，包括：

根据历史数据确定校正系数，并基于所述校正系数对所述间隙原子的点缺陷浓度和空位点缺陷浓度中的至少一者进行校正。

6. 根据权利要求5所述的方法，其中，当对于所述间隙原子的点缺陷浓度进行校正时，

所述校正系数大于或等于 1.0 且小于或等于 1.3。

7. 根据权利要求 1 所述的方法, 其中, 所述预设拉晶参数包括熔体的材料粘度值和热导率;

所述调整所述预设拉晶参数, 直至所述初始固液界面值与所述目标固液界面值在阈值范围内相等, 包括:

调整所述材料粘度值和/或所述热导率, 直至所述初始固液界面值与所述目标固液界面值在阈值范围内相等。

8. 根据权利要求 1 所述的方法, 其中, 所述根据所述模拟缺陷迭代优化所述参考拉晶参数直至所述模拟缺陷满足预设条件, 包括所述模拟缺陷满足 COP 以及 P-band($V\text{-Cluster} > 25\text{nm}$), P_v ($V\text{-Cluster} = 12\text{-}25\text{nm}$), P_i ($V\text{-Cluster} < 12\text{nm}$ 且 $I\text{-Cluster} < 0.5\text{nm}$), LDP ($I\text{-Cluster} < 0.5\text{nm}$) 时, 将所述优化后的参考拉晶参数作为目标拉晶参数。

9. 一种制造大直径硅单晶的拉晶的系统, 包括:

参数获取模块, 用于对拉晶过程进行全局二维模拟, 获取在预设拉晶装置模型和预设拉晶参数下拉晶过程中的全局温度分布、速度场分布以及初始固液界面值;

第一确定模块, 用于根据所述全局温度分布和所述速度场分布确定边界条件, 并基于所述边界条件对所述拉晶过程进行局部三维模拟, 确定目标固液界面值;

第一调整模块, 用于在全局二维模拟中, 调整所述预设拉晶参数, 直至所述初始固液界面值与所述目标固液界面值在阈值范围内相等, 并将所述调整后的预设拉晶参数作为参考拉晶参数;

第二确定模块, 用于根据所述参考拉晶参数模拟计算所述拉晶过程中的模拟缺陷;

第二调整模块, 用于根据所述模拟缺陷迭代优化所述参考拉晶参数, 直至所述模拟缺陷满足预设条件, 并将所述优化后的参考拉晶参数作为目标拉晶参数;

晶体制造模块, 用于使用所述目标拉晶参数制造无缺陷硅单晶, 所述目标拉晶参数包括热场参数和拉晶工艺参数。

10. 一种硅单晶, 包括:

所述硅单晶是基于权利要求 1 至 8 任一项所述的制造大直径硅单晶的拉晶方法制造得到的;

在所述硅单晶中获取的任一晶圆中的空位缺陷尺寸为 19nm 的缺陷的数量小于或等于 25。

11. 一种电子设备, 所述电子设备包括: 处理器和存储器; 所述处理器用于执行所述存储器中存储的指令, 以实现如权利要求 1 至 8 任一项所述的制造大直径硅单晶的拉晶方法。

12. 一种计算机存储介质, 所述存储介质存储有至少一条指令, 所述至少一条指令用于被处理器执行以实现如权利要求 1 至 8 任一项所述的制造大直径硅单晶的拉晶方法。