



STR Japan 株式会社.
横浜市保土ヶ谷区神戸町 134
横浜ビジネスパーク イーストタワー15 階
Tel: 045-744-7511 Fax: 045-744-7521
Site: www.str-soft.com E-mail: str-info@str-soft.co.jp

PolySim Ver.1.9 新機能のご紹介

GUI Version 1.9.6 Solver version 1.9.5

PolySim は、シーメンス法による多結晶シリコン結晶成長専用シミュレーションソフトウェアです。PolySim は、シーメンス法プロセス内の対流、熱移動、化学種の拡散、及び気相・表面反応等の物理現象を考慮して、シーメンス法プロセスの特性をシミュレーションすることが出来ます。

■主な新機能

➤ ポップコーン状態でない結晶表面の面積の予測 (“Popcorn free-area”)

Ver1.9より、ポップコーン現象の可能性(Popcorn non-appearance)だけではなく、ポップコーン状態ではない結晶表面の面積(Popcorn free-area) も予測する事が可能です。

リアクター全体を通して平均化された条件を用いて算出された “Popcorn non-appearance” だけでは、異なるプロセスにおけるポップコーン状態の面積を比較する事は適切ではありませんでした。その値が増加したとしても、必ずしもポップコーン状態の表面積が小さいと判断する事は難しいです。

Ver1.9 では、“Popcorn free-area” の出力によりポップコーン状態ではない結晶表面の面積 (ポップコーン状態の面積) を把握する事が可能です。

“Popcorn free-area” の計算は、ロッド面積全体のポップコーン状態ではない面積の割合として計算されます。また、ポップコーンの厚みは計算されません。ただし、“Popcorn non-appearance” の値が高い場合は、その厚みは小さいことが推測されます。

“Popcorn free-area” の計算を考慮される場合は、“Account for flow non-uniformity” にチェックを入れてください。(図 1)

“Popcorn free-area” は、Solver Setting/“Correction of the popcorn appearance” と “Correction of the non-uniformity scale” の補正パラメータで調節する事が出来ます。その際、“Average rod temperature” の値は、より正確に設定する必要があります。

注意： “Popcorn non-appearance” や “Popcorn free-area” は、プロセス初期のポップコーン現象を正確に考慮する事はできません。なぜならば、ポップコーン現象は、初期の表面の乱れに起因して起こり始めるためです。したがって、プロセス初期において、“Popcorn non-appearance criterion” が負であったとしても、ポップコーンは形成されずに、ロッド表面が滑らかなままの場合も考えられます。

第三者への開示はご遠慮下さい。

■その他機能の改良と修正

➤ 1D ソルバーの改良

Ver1.9 において、計算の収束速度を上げるために、1D ソルバーの改良が行われました。この改良によって、収束速度を上げるためにより大きな "inner relaxation"(0.5-0.8)を使用する事が可能です。

➤ “Outer relaxation factor”の自動修正機能

Ver1.9 において、“Outer relaxation factor”の自動修正機能が追加されました。通常“Outer relaxation factor”は、0.7-0.9 程度の範囲が適用されます。この範囲を使用している場合、自動的にパラメータの修正が適応されます。もし、収束が難しい場合は、手動で規定値よりも下げる必要があります。

➤ “Rerun simulation”機能の追加

Ver1.9 において、“Rerun simulation”機能が追加されました。この“Rerun simulation”機能は、PolySim GUI/”2.Progress”にて設定する事が出来ます。(図 2) この機能を使用する事によって、前回の計算で収束した Point の計算がスキップされます。次の様な場合に有効な機能です。

- 1) 前回の計算で収束しなかった Point の計算のみ次の計算で実行されます。
- 2) 前回の計算の後、幾つかの Point のパラメータを変更した際、次の計算で変更した Point のみ計算されます。
- 3) 前回の計算の後、幾つか Point を追加した場合に、次の計算で追加した Point のみ計算されます。

以上の様に、計算が収束済みの Point を再度計算する必要がなくなりますので、総計算時間を短縮する事が出来ます。ただし、現在のところ Local point の計算には適用されません。

➤ Point 間のデータ補間精度に関する機能

Ver1.9 において、Point 間のデータ補間精度に関する機能が追加されました。より精度の高いプロセス特性を得るために、より多くの計算ポイントが必要な場合は、PolySim GUI/2 Progress/Console output にメッセージが表示されます。

■ PolySim GUI の新機能

➤ “Rate of the electric current increase”の出力

Ver1.9 より、“Rate of the electric current increase”の計算結果が出力されます。これは、成長プロセス中のロッド内電流の増加速度として計算されます。(図 3) 従って、この結果は“Rod diameter based setting”でロッド直径の変化を考慮している場合、または“Time based setting”で時間変化を考慮している場合のみ出力されます。この結果は、電流の変化を考慮したプロセスレシピの開発に有効です。

注意: この結果は、ドーピング無多結晶シリコンフィラメントを考慮しているため、小さいロッド直径かつドーピング有る多結晶シリコンの場合、計算された電流は実験と異なる可能性があります。

➤ 残差プロットの追加

Ver1.9 より、PolySim GUI/2 Progress/Convergence のプロット画面において、“Growth rate”以外に“Residual” (温度と化学種の残差プロット)が追加されました。収束は、この二つで制御されます。(図 4)

➤ パラメータの単位の初期設定の変更

Ver1.9 より、入力出力パラメータの単位の初期設定を変更する事が可能です。PolySim GUI/Menu/Advanced/“Defaults”で変更することが出来ます。(図 5)

➤ Results におけるスクロールの際の問題の修正

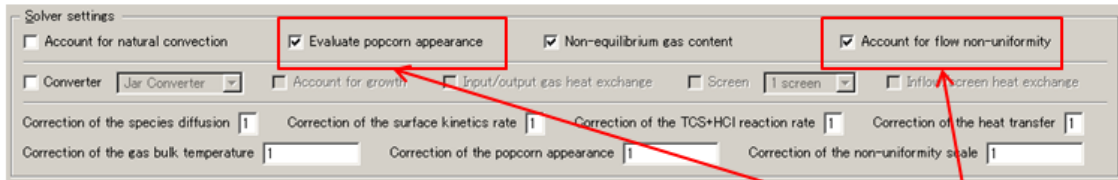
前バージョンまでは、PolySim GUI/3 Results で、スクロールした際にパラメータ名や単位の表示が隠れてしまう問題がありました。Ver1.9 では、表示を固定しスクロールの際も隠れないように改良されています。

➤ 収束しなかったポイントの表示の改良

Ver1.9 より、収束しなかった“Point”に関して、3 Results で“Point”が赤く表示されます。

➤ 出力結果部分の色分け

Ver1.9 より、PolySim GUI/3 Results において、入力パラメータと出力パラメータの背景が色分けされます。(図 6)



1 Input Data | 2 Progress | 3 Results | 4 Visualization

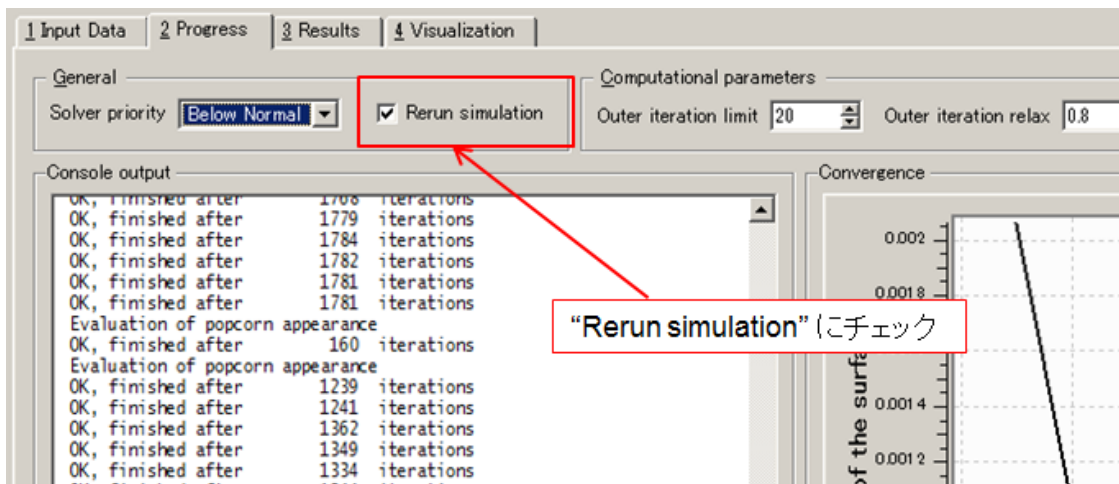
Reactor characteristics

Parameter	Unit	Point 1
Growth rate	μm/min	9.54
Si productivity	kg/h	20.8059
Equilibrium Si productivity	kg/h	37.1
Particles generation rate	kg/h	0.000256
Energy consumption per 1 kg Si	kWh/kg	58
Silicon conversion	%	10
Popcorn non-appearance		-0.18
Popcorn-free area	%	46.3

“Evaluate popcorn appearance”と
 “Account for flow non-uniformity”にチェック

Popcorn-free area 出力結果

図 1. “Popcorn free-area”の設定と出力結果画面



“Rerun simulation”にチェック

図 2. “Rerun simulation”の設定画面

Reactor characteristics						
Parameter	Unit	Point 1	Point 2	Point 3	Point 4	Point 5
Popcorn non-appearance		0.219	-0.0824	-0.0878	-0.0926	-0.0416
Popcorn-free area	%	100	45.1	48.5	49	49.8
Scale of the rod surface non-uniformity	mm	0.001	1.5	1.5	1.4	1.3
Electrical current	kA	0.188	0.624	1.12	1.74	2.42
Rate of the electrical current increase	A/h	17	20.4	24.1	28.7	33.1
Total voltage	kV	5.46	2.93	2.1	1.7	1.45

図 3. “Rate of the electric current increase”の出力結果画面

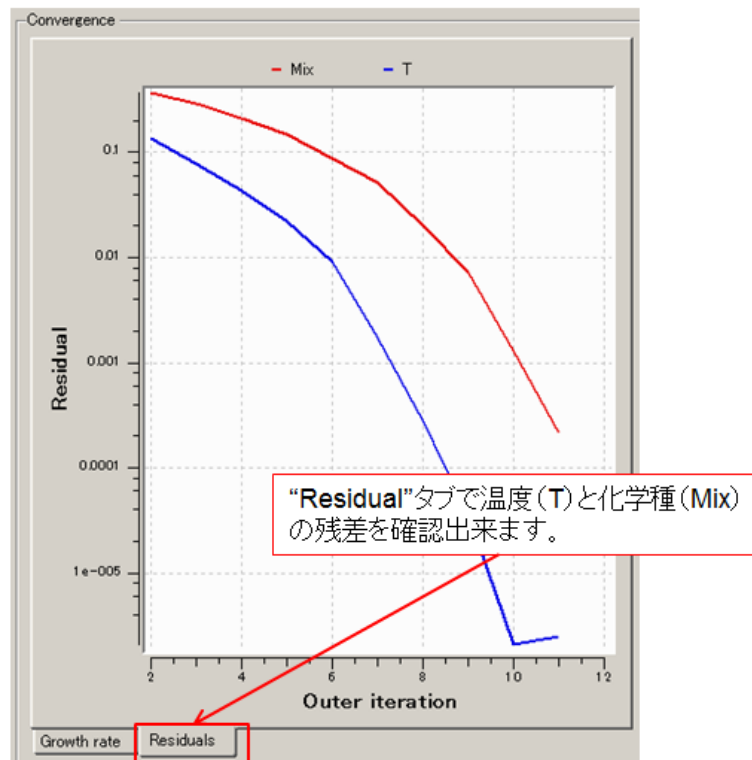


図 4. Residual plot(残差プロット)画面

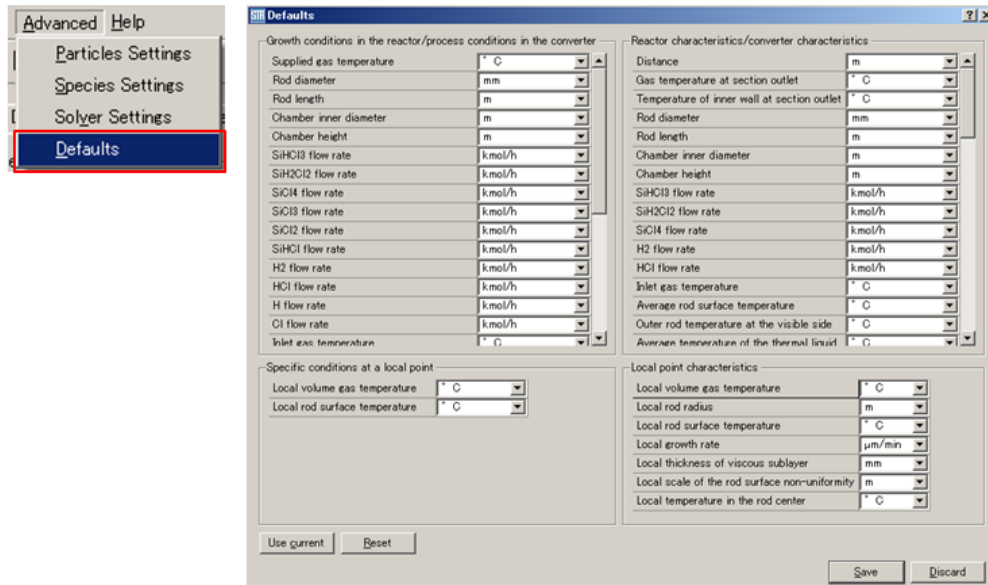


図 5. パラメータの単位の初期設定の変更画面

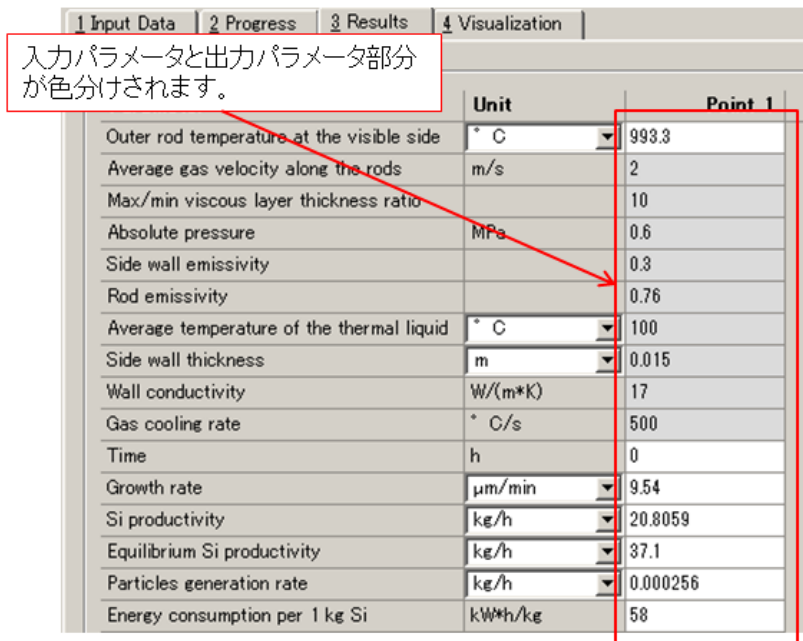


図 6. 出力結果部分の色分け