

培训目的：相关技术人员掌握必备的专业基础知识。

课程类型：技术类

课    目：硅单晶生产基本理论知识

课    时：2H

考核方式：笔试

主  讲  人：梁永生

编制：梁永生

审核：李定武

核准：

实施日期：2010年3月

## 硅单晶生产基本理论知识

### § 1 硅单晶

#### § 1.1 单晶硅与多晶硅

硅（台湾、香港称矽）呈灰色，性脆，易碎。其在自然界中呈氧化物状态存在，在岩石圈中的丰度为 27.6%（重量），仅次于氧，因而硅的资源极为丰富。

通常的工业硅（99.0-99.9%）不具有半导体性能，当将硅提纯到很高纯度（99.999999%）时，就显示出优异半导体性能。下表中列举了硅的一些参数。

元素符号	Si	熔点	1416±4℃
原子序数	14	沸点	3145℃
原子量	28.086	临界温度	4920℃
原子密度	5.0×10 <sup>22</sup> 原子数 / 厘米 <sup>3</sup>	临界压	1450 大气压
固态密度(20℃)	2.33 克 / 厘米 <sup>3</sup>	熔解热	12.1 千卡 / 克分子
液态密度(1420℃)	2.54 克 / 厘米 <sup>3</sup>	蒸发热	71 千卡 / 克分子
晶格结构	金刚石晶格	比热(18~100℃)	0.18 卡 / 克·度
晶格常数	5.42 Å	导热率	0.3 卡 / 秒·厘米·度
电子迁移率	1350±100 厘米 <sup>2</sup> / 伏·秒	线膨胀系数	(2.6±0.3)×10 <sup>-6</sup> / 度
空穴迁移率	480±15 厘米 <sup>2</sup> / 伏·秒	凝固时体积膨胀	+9%
本征载流子浓度	1.5×10 <sup>10</sup> / 厘米 <sup>3</sup>	表面张力	720 达因 / 厘米
本征电阻率	230000 欧姆·厘米	硬度	7.0 莫氏

表 1.1 硅的参数

硅原子在空间呈长程有序排列，具有周期性和对称性，这种硅晶体称为单晶硅。反之，硅原子在空间的排列呈无序或短程有序，称为多晶硅。

因单晶的原子排列具有周期性和有序性，为了方便分析研究，人们选取能够反映晶体周期性的重复单元作为研究对象，称为晶胞。硅单晶属于金刚石结构，晶胞是正方体。八个顶点、六个面的中心及每条空间对角线上距顶点四分之一对角线长的地方各有一个硅原子。

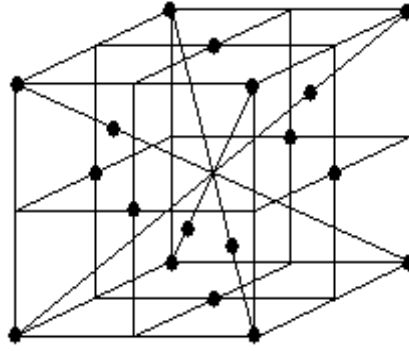


图 1.2 金刚石结构

### § 1.2 晶向及晶面

晶体生长中，常用到晶面和晶向的概念。晶体的原子可以看成是分列排列在平行等距的平面系上，这样的平面成为晶面。通常选取正方体晶胞上的一个顶点作为原点，过原点的三条棱线分别作为 X、Y、Z 坐标轴，晶胞的棱长为一个单位长度建立坐标系。任意一个晶面，在 X、Y、Z 轴上都会有截距，取截取的倒数，若倒数为分数，则乘以它们的最小公倍数，都可以转换成 h、k、l 的形式，把整数 h、k、l 扩入圆括号，这样就得到晶面指数 (hkl)。

某一晶面指数为 (123)，或者更普遍地为 (hkl)，它仅表示晶面指数为 h、k、l 的一个晶面。为了表示平行于这一特殊晶面的一整族晶面，或需要指明具有某种晶体学类型的所有晶面，如所有的立方晶面是具有 (100) 特性的晶面，常用 { } 括起晶面指数，这样，一切具有 (100) 晶面特性的晶面用 {100} 表示，叫 {100} 晶面族，它包括 (100)、(010)、(001)、 $(\bar{1}00)$ 、 $(0\bar{1}0)$ 、 $(00\bar{1})$  各晶面。

为了标出晶向，通过坐标原点作一直线平行于晶面的法线方向，根据晶胞的棱长决定此直线点的坐标，把坐标化成简单的整数比。用 [ ] 括起来，称为晶向指数。为了表示一组相同晶体类型的所有晶向，用 < > 把晶向指数括起来，叫晶向族。

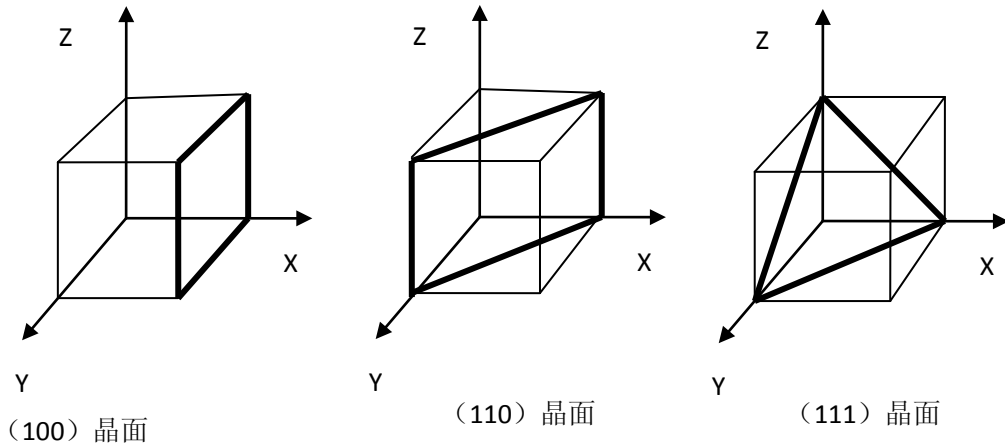


图 1.3 常用的三种晶面

在晶体的同一面族中，相邻两晶面之间的距离叫面间距。同一晶面上，单位面积中的原子数叫面密度。晶面指数不同的晶面族，面间距也不同，面密度也不一样。单位体积晶体中原子总数是一定的，面间距较小的晶面族，晶面排列密，晶面的原子密度小；面间距较大的面族，晶面排列较稀，晶面的原子密度大。

硅单晶生长时，{100}晶面族的法向生长速度最快，{111}晶面族最慢。硅单晶若用腐蚀液腐蚀，各晶面族腐蚀速率不同，{100}面族腐蚀速率最快，{110}面族次之，{111}晶面族最慢。

### § 1.3 半导体材料

固体材料按照其电阻率可分为超导体材料、导体材料、半导体材料和绝缘体材料。半导体材料的电阻率一般介于导体和绝缘体之间，数值一般在  $10^{-4}$ — $10^8 \Omega \cdot \text{cm}$  之间。但电阻率在  $10^{-4}$ — $10^8 \Omega \cdot \text{cm}$  之间的并不都是半导体，半导体的电阻率受杂质及温度的影响。

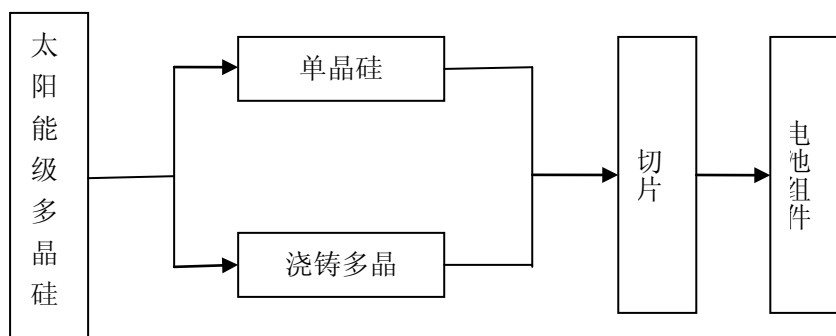
#### 1.3.1 杂质对半导体材料电阻率的影响

半导体的电阻率对其所含的杂质质量是非常敏感的。杂质含量的改变，会引起半导体材料的电阻率发生显著变化。例如，硅中磷杂质浓度在  $10^{21}$ — $10^{12} \text{cm}^{-3}$  范围内变化时，它的电阻率则从  $10^{-4} \Omega \cdot \text{cm}$  变到  $10^4 \Omega \cdot \text{cm}$ 。目前电阻率可在这样大的范围内变化的材料并不多，它说明了半导体中杂质含量是决定其电阻率的主要因素之一。

#### 1.3.2 温度对半导体材料电阻率的影响

对金属导体来说，当温度升高时，它的电阻率增大，但变化幅度不大。而半导体与此相反，当温度升高时，电阻率降低，温度下降时，电阻率增大，并且变化幅度很大。当温度变化  $300^\circ\text{C}$  时，电阻率会改变几千倍到几十万倍。当温度下降至接近绝对零度 ( $-273^\circ\text{C}$ ) 时，半导体就成为绝缘体。因此要求在室温下 ( $23 \pm 2^\circ\text{C}$ ) 测量硅单晶的电阻率。

## § 1.4 晶硅太阳能电池的生产流程



## § 2 直拉单晶硅的基础理论

### § 2.1 位错与拉晶

#### 2.1.1 晶体缺陷

实际晶体的空间点阵和理想的空间点阵不同，它无法作到绝对的理想规则周期排列，而是点阵在排列上有这样或那样不规则性，存在着点阵畸变，偏离空间点阵。那些偏离点阵的结构或地区通称晶体缺陷。

根据缺陷相对晶体尺寸或影响范围大小，可分为点缺陷、线缺陷、面缺陷、体缺陷。

#### 2.1.2 位错

位错是一种很重要的晶体缺陷。晶体的位错是围绕着的一条很长的线，在一定范围内原子都发生有规律的错动，离开它原来平衡位置，所以叫位错。

位错可以发生滑移和攀移运动并发生位错的增殖。硅单晶是典型的金刚石结构，并且是共价键结合， $\{111\}$ 面族面间距大，面密度大， $\{111\}$ 面族是硅单晶的主要滑移面。滑移方向一般为 $\langle 110 \rangle$ 晶向族， $\langle 110 \rangle$ 晶向族上原子间距最小，因此，硅晶体主要在 $\{111\}$ 面族的 $\langle 110 \rangle$ 晶向族的方向上滑移。

位错对硅单晶的电学性质影响很大。如位错会影响到电阻率、载流子浓度、缩短少数载流子的寿命及减少电子迁移率

直拉硅单晶生长过程中，生产工艺不良，可能使单晶产生位错。产生位错的环节和方式包括：

##### 1) 籽晶引入位错

籽晶表面损伤、机械磨损裂痕等使籽晶表面晶格受到破坏形成位错或籽晶本身有位错。它们和熔硅熔接时，籽晶中位错晶体生长不断延伸和增殖。另一方面，无论籽晶有无位错，籽晶与熔硅接触时受到强烈的热冲击，产生新位错并发生位错增殖，接触面积越大，接触温度越高，

新生的和增殖的位错越多，熔接后的籽晶位错密度一般都在  $10^3/\text{cm}^3$ —— $10^4/\text{cm}^3$  数量级。

熔硅温度较低，籽晶和熔硅熔接不好也会产生位错。如果单晶生长界面温度太低，籽晶和熔硅接触不好，新生长的单晶与籽晶晶格不完全一致，产生了大密度的位错。熔硅表面有浮渣，浮渣附着在籽晶表面，使单晶产生不同取向，同样可以产生位错。

### 2) 硅单晶生长中产生位错

硅单晶中的位错除籽晶中的位错延伸、增殖外，生长过程中如果受到机械震动，产生机械应力，晶格的结点会发生畸变，生成位错。

硅单晶生长中，热应力也会产生位错产生和进行增殖。防止热应力产生位错，这是工艺设计的主要任务。

熔硅温度的起伏和单晶生长速率的起伏，可以引起结晶界面上原子振动的变化，使原子排列偏离点阵，产生晶格畸变，形成位错也可能使单晶偏离生长取向产生位错。

硅单晶内杂质浓度过高，形成杂质析出也容易产生位错，掺杂量很大的重掺锑、重掺磷、重掺砷硅单尤其明显。硅单晶生长有杂质析出时

### 3) 单晶冷却过程产生位错

单晶硅生长结束后，单晶和熔硅脱离接触，进行冷却。单晶冷却时，晶体表面和中心由于收缩率不同产生很大的应力，同时晶体表面存在温度梯度，产生很强的热应力，这些应力都足以使单晶界面生成新位错。

## 2.1.3 籽晶与引晶

籽晶是生长单晶的种子，也叫晶种。用不同晶向的籽晶做晶种，会获得不同晶向的单晶。拉制单晶用的籽晶一般用单晶切成。为了保证单晶质量，切籽晶所用的单晶一般用高阻单晶。切制籽晶的时候，需要进行定向切割。目前一般要求籽晶与所要求的晶向无偏角，即所谓的“零度籽晶”。

生长无位错硅单晶，首先要生成一个无位错晶核，然后才能在没有位错晶核上长成无位错单晶。因此，无位错晶核是生长无位错单晶的基础。无位错晶核和无位错籽晶不同。引晶时，籽晶和熔硅接触，受到强烈的热冲击，不管籽晶有无位错，都要生成和增殖  $10^3$ —— $10^4/\text{cm}^2$  数量级的位错，通过缩颈工艺则能排除籽晶中原生和新生位错。

## 2.1.4 单晶收尾

拉晶等径完成后，如果不收尾，单晶尾面脱离熔硅后，由于热应力作用往往产生位错，而且位错会向上返。为提高单晶成晶率，工艺上采取收尾工艺，如果收尾良好，则基本不产生位

错。

## § 2.2 电阻率与掺杂

### 2.2.1 硅单晶电阻率和杂质浓度

半导体内含微量杂质元素，将使载流子（自由移动的电荷）浓度增加，半导体的电阻率将发生很大变化。在太阳能级单晶硅的控制中，都要加入杂质元素。根据导电类型分为 P（positive 正）型和 N（negative 负）型单晶，P 型单晶是由空穴（显正极性）作为载流子，常用的掺杂元素有 3 价的硼、镓。N 型单晶由电子（显负极性）作为载流子，常用的掺杂元素有 5 价的磷、砷、锑。

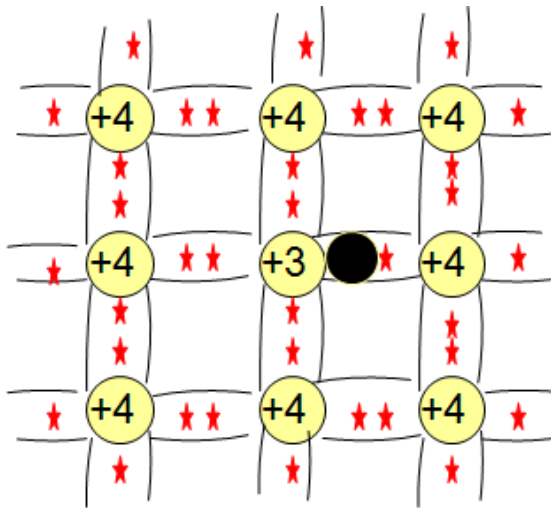


图 2-1 P 型 空穴作载流子

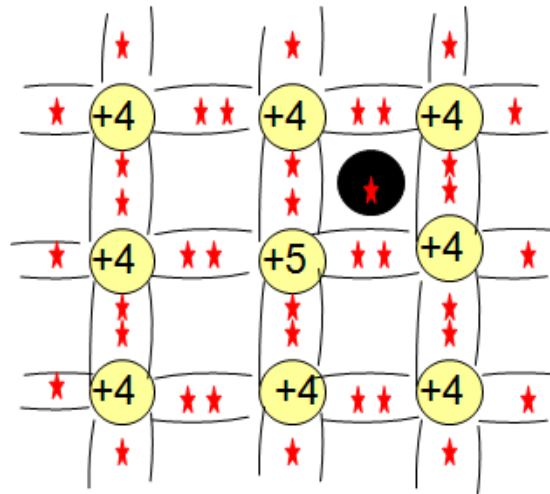


图 2-2 N 型 电子作载流子

通常电阻率低，说明硅中的杂质浓度高，但电阻率高，不能肯定说硅中的杂质浓度就低，还要看是否有高的补偿度（指硅中两种型号杂质浓度之比）。

硅单晶的电阻率和杂质浓度可以进行转换，下表中对常用的转换关系进行了列举。

电阻率	0.1 Ω . cm	0.5 Ω . cm	1.0 Ω . cm	10.0 Ω . cm	100.0 Ω . cm
P 型（掺 B、Ga）	2.77E17	3.20E16	1.46E16	1.34E15	1.33E14
N 型（掺 P）	7.84E16	1.04E16	4.86E15	4.45E14	4.27E13

常用电阻率和杂质浓度的转换关系

### 2.2.2 硅纯度的表示

2.2.2.1 行业内常用 PPb、PPm 来表示物质的纯度。

1) PPb（parts per billion）：表示十亿分之一，如 2PPb=2/10<sup>9</sup>。以硅行业为例，常有如下两种用法。

PPba: 表示单位体积内杂质原子数和总原子的个数比。如硅中含 1PPba 的硼, 可以理解为 10 亿个原子中, 有 1 个硼原子, 999999999 个硅原子。

PPbwt: 表示单位体积内杂质重量和硅重量比。如硅中含 0.1PPba 的硼, 换算成 PPbt 为 0.038PPbt。

2) PPM (parts permillion ): PPM 是和 PPb 相似的一种纯度表示法, 只是数量级较大: 1PPm=1000PPb

2.2.2.2 工业上常用几个“9”来表示物质的纯度。以硅为例, 若硅的纯度为 9 个“9”, 则硅原子占 99.9999999%, 也就是说硅中杂质含量为 1PPb。

### 2.2.3 分凝

熔体中各部分的杂质浓度相同, 但在凝固过程中, 固液两相的杂质溶度会不同, 这种现象称为分凝效应。如果结晶凝固过程发生的足够缓慢, 可近似地看作平衡过程, 这时分凝称平衡分凝。

#### 2.2.3.1 平衡分凝系数

平衡分凝过程中, 固液两相杂质浓度的比值称为平衡分凝系数。不同物质的分凝系数不同。

$$K_0 = C_s / C_L \quad (K_0: \text{平衡分凝系数}; C_s: \text{固相杂质浓度}; C_L: \text{液相杂质浓度})$$

例如磷的分凝系数为 0.35, 意味着如果现在这一时刻熔硅里面的浓度是 100 的话, 那么下一时刻长出来的单晶中, 磷的浓度是 35。

元素	$K_0$	元素	$K_0$	元素	$K_0$	元素	$K_0$
硼 (B)	0.8~0.9	铝 (Al)	0.002	铜 (Cu)	0.0004	氧 (O)	1.27
磷 (P)	0.35	镓 (Ga)	0.008	镍 (Ni)	0.000025	碳 (C)	0.07
砷 (As)	0.3	铟 (In)	0.0004	铁 (Fe)	0.000008		
锑 (Sb)	0.023	金 (Au)	0.000025	锰 (Mn)	0.00001		

表 2-3 各种元素在硅中的平衡分凝系数

#### 2.2.3.2 有效分凝系数

实际生产过程中, 结晶不可能无限缓慢, 即: 不可能在平衡状态中进行, 这种状态下的分凝系数称为有效分凝系数。理论分析和实践证明, 有效分凝系数和平衡分凝系数之间存在以下关系:



$$K_{\text{有效}} = \frac{K_0}{K_0 + (1 - K_0)e^{-\frac{f\delta}{D}}}$$

其中：

$K_0$  为平衡分凝系数；

$f$  为晶体生长速率；

$\delta$  为杂质富集层（或贫乏层）厚度；

$D$  为杂质扩散系数。

以上公式称为普凡方程（也有称为 BPS 关系的）。

### 2.2.3.3 硅单晶的电阻率

#### 1) 纵向电阻率

一支直拉硅单晶，从头到尾杂质分布不同，因此其电阻率也不同。影响单晶杂质浓度分布情况主要有以下几个方面。

a. 杂质分凝是影响硅单晶纵向电阻率分布较大的因素之一。拉制单晶硅时常用的掺杂元素磷、砷、硼、镓，它们在硅中的平衡分凝系数均小于 1，因而在晶体生长过程中，杂质会在熔体中不断积累，使熔硅中的杂质浓度越来越高，晶体尾部的杂质浓度也越来越高，电阻率越来越低。分凝系数越小，头尾的电阻比例越大。

例如：对于无补偿的掺硼和掺磷（不考虑挥发）单晶，头尾电阻比分别为 1.57:1 和 3.8:1；

b. 熔体中杂质的蒸发。对于不容易蒸发的杂质，如硼，分凝是影响电阻率分布的主要因素，但容易挥发的杂质，如磷，挥发和分凝同时影响电阻率的纵向分布，当挥发大时，会造成尾部电阻率高于头部电阻率。

c. 硅熔体还受到其他杂质的污染，主要是石英坩埚中硼杂质的影响。对于 P 型单晶电阻率会越来越低，N 型单晶电阻率会越来越高。

总之，分凝、蒸发、污染同时影响单晶杂质分布。而单晶电阻率到底如何变化，必须考虑这三种因素的综合作用。如果分凝占主导作用，单晶中的杂质浓度越来越高，电阻率会越来越低；如果挥发占主导作用，单晶中的杂质浓度会越来越低，电阻率会越来越高。如果石英坩埚

污染严重，P 型单晶电阻率会越来越低，N 型单晶电阻率会越来越高。

## 2) 晶体的径向电阻率

硅单晶在生长过程中，由于生长界面是弯曲的，这在实际拉晶过程中，从提断的晶体断面可以证实。即在晶体的径向，边缘和中心凝固的时间有先后。这就导致晶体径向的杂质浓度不同。如下图所示，晶体的实际生长界面如果凹向熔体（图中的实线），说明边缘比中心先结晶，如图中的点 2 处比点 7 处早凝固。由分凝理论可知，点 2 处的杂质浓度小于点 7 处，导致晶体的径向电阻率，中心低、边缘高。因此硅单晶的生长界面平坦，则电阻率均匀。外加磁场可以显著改善单晶的径向电阻率均匀性，就是因为 MCZ 单晶的生长界面比较平坦。

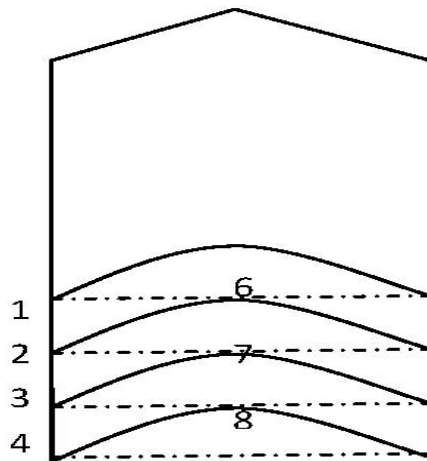


图 2-4 晶体生长界面形状与径向电阻率

<111>晶向的单晶，因 {111} 面族在径向生长速度快，在中心长出小平面，这种“小平面效应”会造成晶体中心部分杂质溶度高，边缘浓度低。因此 N 型<111>单晶的径向电阻率均匀性很差。

## 3) 硅单晶中氧对电阻率的影响

直拉硅单晶中，熔硅与石英坩埚会发生反应： $\text{SiO}_2 + \text{Si} \rightarrow 2\text{SiO} \uparrow$ ，通过对流、扩散将氧带入晶体中。氧（施主作用：相当于 N 型杂质）会影响轻掺硅单晶电阻率的真实性，会使 P 型单晶电阻率升高，N 型单晶电阻率降低，故轻掺杂硅单晶需要  $650^\circ\text{C}$  的温度下进行热处理，以消除热施主的影响。

复拉料处理岗位在做原料分选工作时（或提小头测电阻率时），不能测头尾料中心的电阻率，只能测表皮电阻率，就是考虑到氧施主的干扰。

由于 SiO 的挥发作用，晶体径向氧的分布是中间高、边缘低，也造成晶体径向电阻率出现

变化。

## § 2.3 单晶硅棒的检测

### 2.3.1 晶向

直拉硅单晶晶向一般通过观察原始晶体外观形状确定，若想进一步确定晶体实际生长方向偏离正向偏角，用激光定向仪或 X 光定向仪进行定向测量。以下是 3 种常见型号晶体的外观形状。

1)  $\langle 100 \rangle$ ：肩部有 4 条对称棱线，等径部分晶体上有 4 条对称棱线。

2)  $\langle 110 \rangle$ ：肩部有对称的两条明显的主线，两条主线的两旁各有一条副线（共 4 条副线），等径部分晶体上有两条主线。

3)  $\langle 111 \rangle$ ：肩部有对称的 6 条棱线，等径部分晶体上没有明显的棱线，但有很密集的小“苞丝”。

### 2.3.2 单晶、多晶的判断

对于直拉硅单晶圆棒，无位错的部分为单晶，有位错则为多晶。在晶体上切取样块，用腐蚀液腐蚀后，可以看到位错线。通常简单快捷的方法是从外观进行判断。方法是，一般收尖并且棱线到底的晶棒，整根晶体为单晶，若中间棱线或“苞丝”鼓掉，则从鼓掉的地方反掉其断面直径后剩余的部分为单晶。

### 2.3.3 型号

硅单晶的型号（导电类型）有 P 型和 N 型。用专门的型号测试仪进行检测。测量时要经过研磨或喷砂处理，处理干净表面。避免因表面沾有阴、阳离子，造成测量错误。

### 2.3.4 电阻率

常用于单晶硅棒电阻率的检测方法是四探针接触法。其测量时要求晶体表面经过磨粗或喷砂处理。

1) 硅棒纵向表皮电阻率的测试。将硅棒表面处理后，进行测试即可。需要注意电阻率的头尾走势是否符合规律。

2) 径向电阻率变化（RRV）。因为氧的施主效应，会影响硅棒的径向电阻率。因此需要经过热处理，消除氧施主效应。方法是加热到 650 度后，急速冷却。处理后，用电阻率仪测试。

测试点选取的方法是（采用 GB11073-89 中的选点方案 B ），测量 6 点，如下图所示。在硅片的中心测量 2 次，在两条垂直直径距硅棒边沿 6mm 处各测量一点。

径向电阻率变化% = (边沿 4 点的平均值 - 中心 2 点的平均值) / 中心 2 点的平均值 × 100

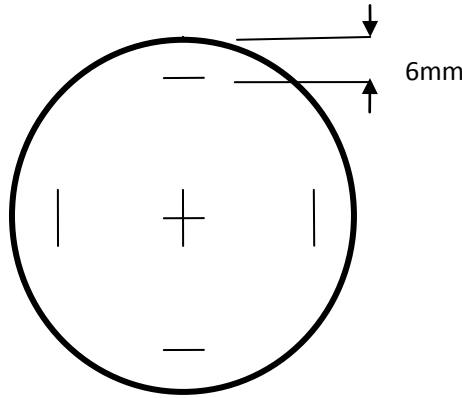


图 2-4 RRV 测量点的选取

### 2.3.5 少子寿命（非平衡少数载流子的寿命）

非平衡少数载流子的寿命是半导体材料的一个基本参数，它的大小直接影响半导体器件的性能。P 型单晶硅依靠空穴导电，N 型单晶硅依靠电子导电。非平衡少数载流子的寿命是指：非平衡少数载流子在外界激发条件取消后，能存在的平均时间。在太阳能级中一般要求大于 10 微秒。少子寿命的大小可以间接反映电池片的转换效率。影响少子寿命的因素很多，主要是金属含量和晶格缺陷，特别是重金属含量对其影响较大。有效控制重金属和其它杂质的含量可以有效的提高单晶硅的少子寿命和单晶品质。

少子寿命的测量值受表面状态的干扰很大，在测试时，需对测试表面进行严格的抛光处理。但目前行业内，都是在圆棒切断后，在断面上直接测量，测量值小于真实值。

### 2.3.6 氧碳含量

直拉硅单晶中的氧和碳是很重要的杂质，在晶体内可能生成微沉淀，也可能在微沉淀的基础上形成微缺陷，严重影响硅单晶的质量。

氧主要来源与石英坩埚，在单晶中的分布是：纵向，头高尾低；晶体断面中心高，边缘低。直拉硅单晶中，氧的浓度在  $6 \times 10^{17}/\text{cm}^3$  ——  $2 \times 10^{18}/\text{cm}^3$  的范围内。采用磁场技术，可以降低氧含量。

碳一部分来自于石墨热场，但大部分来自于原料。在单晶中的分布是头低尾高。浓度数量级  $10^{16}/\text{cm}^3$ 。

### 2.3.7 位错检测

位错对半导体材料的电学性质，如载流子浓度、迁移率、特别是对寿命的影响很大，因此，对器件的成品率影响很大。现在，一般都要求无错位单晶硅。检测错位的方法主要有：腐蚀坑法，杂质沉淀法和 X 光法。把腐蚀好的样品放在全相显微镜下，可进行观察，〈111〉晶面上的位错腐蚀坑呈现三角形，〈100〉晶面上的位错腐蚀坑呈现四方形。在每平方厘米面积上的腐蚀坑个数表示为位错密度。

在拉制的无位错晶体的尾部，由于热应力的作用也会产生大量位错。在检测时，把有位错的部分要作为废品而切除掉。

## § 3 辅助材料

### 3.1 氩气

高纯氩气在直拉单晶中作为保护气体。如果氩气纯度不高，含有水、氧及其他杂质，势必影响单晶硅的成品率和质量，甚至于根本无法拉制出单晶来。

单晶硅的生产对高纯氩气的要求是：

纯度  $>99.9995\%$ ，即所有杂质的总含量  $<10\text{ppm}$ ；

其中氧含量  $<2.0\text{ppm}$ ，目前已经提高到  $<1.5\text{ppm}$ ；

水份  $<2.0\text{ppm}$ （对应的露点约为  $-70^\circ\text{C}$ ），通常测定露点，露点越低，水含量越低。

### 3.2 纯水

直拉单晶炉运行时，需要冷却水来冷却炉壁。自来水或普通蒸馏水中都含有一些杂质离子，如：钠 ( $\text{Na}^+$ )、钾 ( $\text{K}^+$ )、镁 ( $\text{Mg}^{+2}$ )、钙 ( $\text{Ca}^{+2}$ ) 等阳离子及氯 ( $\text{Cl}^-$ )、硫酸根 ( $\text{SO}_4^{-2}$ )，碳酸根 ( $\text{CO}_3^{-2}$ )、硅酸根 ( $\text{SiO}_3^{-2}$ ) 等阴离子。这些杂质，如钙镁离子会在冷却水管内结垢造成水路堵塞，酸根会腐蚀管道。因此冷却水需要进行纯化处理。

单晶炉的冷却水的纯度要求是：

Cl 离子含量  $\leq 10\text{mg/L}$ ；

PH 值在 6-9 之间；

总硬度  $\leq 125\text{mg/L}$ ，

需要说明的是电阻率也是考量水纯度的重要指标之一，电阻率越大，水的纯度越高。纯水的理论极限电阻率与温度有关，如下表。

温度 (°C)	5	10	15	20	25
理论电阻率(M Ω . cm)	62.1	45.5	31.2	26.3	18.3
温度 (°C)	30	35	40	45	50
理论电阻率(M Ω . cm)	14.1	9.75	7.66	7.10	5.80

表 3-1 纯水的理论极限电阻率与温度的关系

### 3.3 高纯石墨及石墨毡

拉制单晶硅所使用的加热器和保温系统是用高纯石墨制做的。单晶硅的生产对高纯石墨的要求是：纯度高、强度大、结构致密均匀，无裂纹、无空洞。

石墨品种	灰 粉 %	比 电 阻 欧姆·厘米 <sup>2</sup> /米	抗压强度 公斤/厘米 <sup>2</sup>	比 重 克/厘米 <sup>3</sup>	硬 度 公斤/毫米 <sup>2</sup>
第一类	<0.01	<20	>900	>1.8	45~80
第二类	<0.01	<16	>450	>1.7	15~30
第三类	<0.015	<16	>355	>1.65	15~30

表 3-2 高纯石墨技术性能

注意：我们行业使用的是石墨毡，不是碳毡。这是提申购计划时容易犯的错误。

### 3.4 石英坩埚

#### 3.4.1 石英也是很重要的辅助材料。

目前没有查到电弧坩埚的国家标准文件。

石英玻璃的形变点为 1075°C，退火点 1180°C，软化点 1730°C。

#### 3.4.2 关于坩埚的“析晶”现象。

坩埚的“析晶”现象：拉晶使用过的坩埚，有时会在外壁或内壁上出现与坩埚质地不同，

类似石灰质的一层壳。这就是“析晶”现象。

“析晶”轻微时，坩壁上出现白斑，看不出明显的分层；严重时，“析晶”层很厚，而且在内壁的“析晶”层与坩埚的夹层之间会渗入硅。

“析晶”的原因是坩埚受到了碱金属（钠、钾、锂等）的沾污。沾污有以下几种可能：

- ① 坩埚清洗时受到了碱金属沾污。
- ② 多晶原料中碱金属含量高。
- ③ 坩埚外壁的“析晶”，则多半是因为石墨托碗中的碱金属含量高。
- ④ 其他原因引起的碱金属沾污。