

全球首款高效的 材料晶体生长数值模拟软件 FEMAG 介绍



目录

一、FEMAG 软件概况	1
二、FEMAG 软件产品	2
2.1 FEMAG/CZ 软件	3
2.2 FEMAG CZ/OX 软件	6
2.3 FEMAG/FZ 软件	7
2.4 FEMAG/DS 软件	8
2.5 FEMAG/VB 软件	9
2.6 FEMAG/PVT 软件	10
三、FEMAG 软件的主要技术优势	11
3.1 求解技术先进、高效，求解精度高	11
3.2 可预测晶体的缺陷，优化生长工艺	11
3.3 独具区熔法生长分析功能	11
3.4 中国本土化技术服务便捷、到位	12
四、关于 FEMAG 公司	12
五、FEMAG 公司的主要合作伙伴	12
六、关于中仿科技（CnTech）公司	14

一、FEMAG 软件概况

随着社会的发展和人类科技的进步，人工晶体材料在半导体、集成电路、太阳能光伏、LED、航空发动机涡轮叶片制造等领域中得到了广泛的应用。这些社会应用需求驱动了晶体生长科学技术的迅速发展，人们借助先进的技术手段可制备各种优质的多功能晶体。此外，随着计算机软硬件技术的发展，利用高效的 CAE 数值模拟技术进行虚拟预测、优化晶体生长工艺，已成为提高产品质量与研发效率、降低研发成本的有效途径。

FEMAG 软件是世界上第一款商业的材料晶体生长数值模拟软件，由比利时新鲁汶大学教授 Dr. François Dupret 于 20 世纪 80 年代中期领导开发。Dr. François Dupret 是第二届晶体生长模型国际研讨会主席、EUROTHERM 相变热力学研讨会联合主席、机械工程学位委员会主席，曾担任国际晶体生长（Journal of Crystal Growth）期刊主编。作为 FEMAG 公司创始人和首席科学家，Dr. François Dupret 主持开发的 FEMAG 软件拥有国际上最先进、最高效、最全面的晶体生长工艺模拟技术和多物理场耦合仿真功能，可模拟的晶体生长工艺包括提拉法（柴氏法，Cz 法）、泡生法（Ky 法）、区熔法（FZ 法）、坩埚下降法（垂直布里兹曼法，VB 法）、物理气相传输法（PVT 法）等，广泛应用于集成电路、太阳能光伏、半导体、蓝宝石等领域。ON Semiconductor（安森美半导体）、美国 Kayex、Siltronic（世创电子材料）、AXT（美国晶体技术集团）、韩国 Nexolon、LG、韩国汉阳大学、Norut（挪威北方研究所）、日本 SUMCO 集团、Gritek（有研新材料）、天津环欧半导体材料、中环股份、北京有色金属研究总院、清华大学等企业和科研机构，均是 FEMAG 软件的用户。

目前，FEMAG 软件包括以下六款产品：

- FEMAG/CZ——FEMAG 提拉法晶体生长模拟软件
- FEMAG CZ/OX——FEMAG 提拉/泡生法晶体生长模拟软件
- FEMAG/FZ——FEMAG 区熔法晶体生长模拟软件
- FEMAG/DS——FEMAG 三维定向凝固模拟软件
- FEMAG/VB——FEMAG VB/VGF 法晶体生长模拟软件
- FEMAG/PVT——FEMAG 物理气相传输法晶体生长模拟软件

经过近三十多年的开发与完善，FEMAG 软件以其深厚的晶体生长理论基础、高效稳健的数值算法，业已在晶体生长数值计算领域处于国际领先地位。FEMAG 软件可以高效地模拟晶体生长工艺过程以及预测晶体生长的质量，有力地促进了晶体生长技术相关的生产与研发工作。FEMAG 软件已在以下行业中得到了广泛的应用：

- 半导体用单晶硅生产与研发

- 太阳能光伏用单晶硅、多晶硅锭生产与研发
- 集成电路级单晶硅生产与研发
- 航空发动机涡轮叶片单晶高温合金生产与研发
- LED 光电技术用氧化物晶体和蓝宝石晶体生产与研发
- 晶体生长熔炉设计与生产

二、FEMAG 软件产品

FEMAG 软件致力于多物理场数值模拟分析晶体材料的生长过程，为用户提供晶体生长输运过程中的重要信息以及影响晶体质量的工艺信息，提高晶体质量与用户的研发效率。目前，FEMAG 软件产品有：FEMAG/CZ、FEMAG CZ/OX、FEMAG/FZ、FEMAG/DS、FEMAG/VB 以及 FEMAG/PVT，可有效分析提拉法生长、泡生法生长、区熔法生长、定向凝固、坩埚下降法生长、物理气相传输法生长等工艺过程。FEMAG 软件主要具有以下功能：

(1) 在设计工程领域, 利用 FEMAG 软件可以设计生长熔炉系统中保温套和反射体的形状、材质和位置, 可确定加热器的位置, 设计辅助加热器, 选择与设计保温层。

(2) 在质量控制工程领域，利用 FEMAG 软件可以分析热应力、控制氧/碳含量分布、掺杂物分布以及缺陷的预测，优化工艺参数，提高晶体生长质量。

(3) 在成本控制工程领域, 利用 FEMAG 软件可以评估能耗、气耗, 也可以评估原料辅料的成本与使用寿命。

FEMAG 软件产品及其典型的应用如图 2.1 所示:

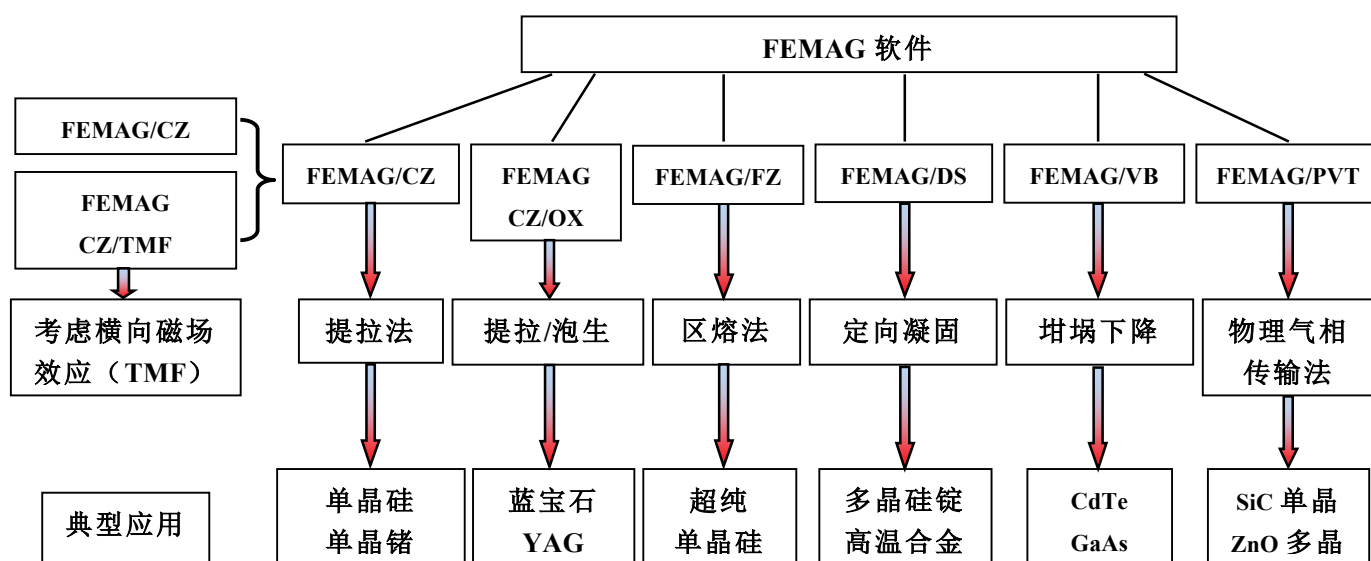


图 2.1 FEMAG 软件产品及其典型应用

2.1 FEMAG/CZ 软件

提拉法（Czochralski 法，Cz 法，亦称为直拉法、柴氏法）是从熔体中生长单晶的最重要工艺之一。其原理是将原料放在坩埚中加热熔化，在适当的温度下，将籽晶浸入液面，让熔体先在籽晶的末端生长，然后边旋转边缓慢向上提拉籽晶，晶体即从籽晶末端开始逐渐长大。利用 FEMAG/CZ 软件可以有效模拟分析 Cz 法生长各种晶体的工艺过程，包括半导体单晶硅、单晶锗、太阳能光伏单晶硅、小尺寸蓝宝石等晶体的生长工艺过程的 2D/3D 全局数值模拟。

2.1.1 FEMAG/CZ 软件的主要功能

基于提拉晶体生长工艺的 FEMAG/CZ 软件具有以下主要功能：

- 生长熔炉热场分析
- 各向异性热应力分析
- 多物理场耦合仿真
- 点缺陷分布预估
- 与时间相关的动态仿真
- 液固界面形状、位置跟踪
- 加热器功率预测
- 评估产品的良品率
- 计算固液界面的温度梯度
- 氧/碳含量的预测与控制
- 进行连续提拉生长模拟
- 分析考虑横向磁场效应的三维问题（需要 FEMAG CZ/TMF 附加模块）

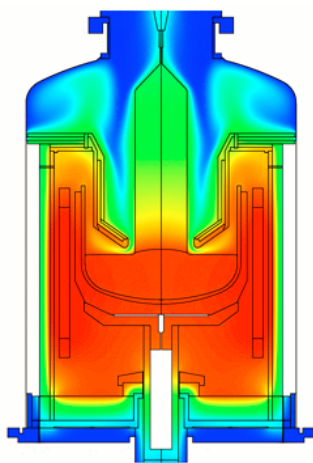


图 2.2 生长炉热场

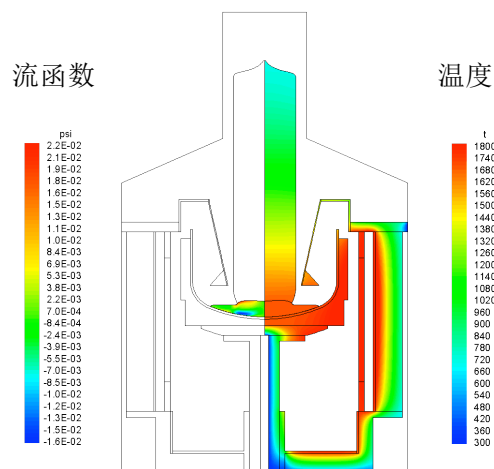


图 2.3 炉内流函数、温度分布

图 2.2 和图 2.3 分别是生长炉热场以及炉内的热场、流场分布。利用 FEMAG/CZ 软件可以全局地

模拟生长炉内的热传导、辐射、熔体对流以及炉内气体流动等热量与动量传递过程，确定热场的分布以及分析晶体生长时的总体传热、流动特性。

利用 FEMAG/CZ 软件可以分析计算各向异性热应力。图 2.4 (a)、(b) 分别是不同晶体生长方位上的热应力分布。晶体生长方位不同，热应力的分布明显不同。

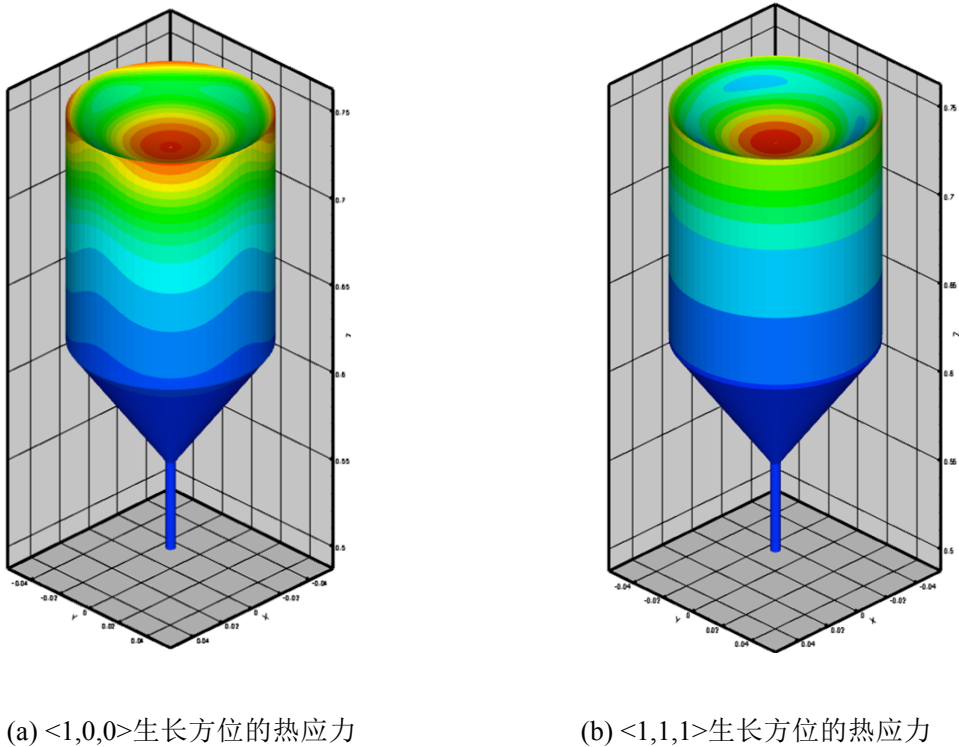


图 2.4 不同晶体生长方位的热应力分布

利用 FEMAG/CZ 软件可以预估在晶体生长过程中的点缺陷（空缺与自裂缝）分布。图 2.5 为点缺陷分布图。

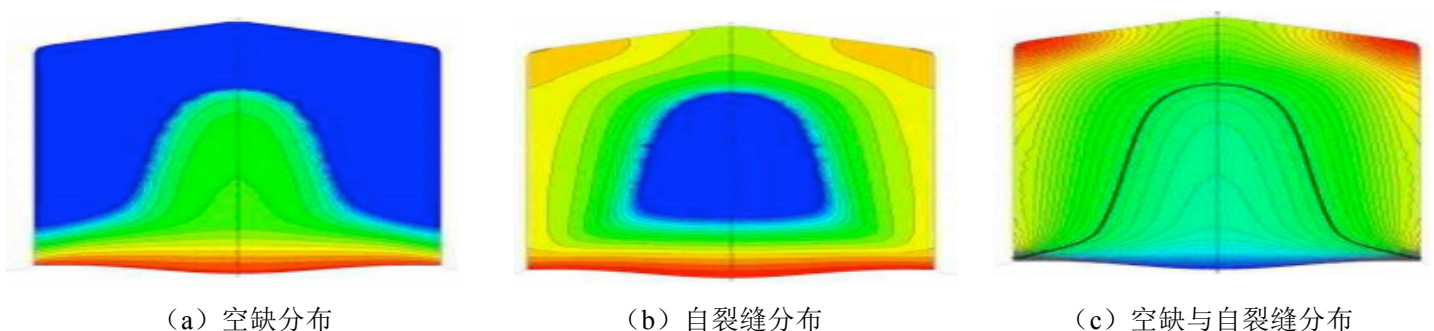


图 2.5 点缺陷分布

利用 FEMAG/CZ 软件的与时间相关的动态仿真功能，可以将发生在晶体生长、冷却过程中所有瞬时的影响因素都考虑在内，这对于准确预报晶体缺陷和氧含量等具有重要的意义。

利用 FEMAG/CZ 软件的附加功能模块 FEMAG CZ/TMF 可以有效地预测涉及横向磁场效应的晶

体生长问题。图 2.6 是涉及横向磁场效应(TMF)的 3D 模型。图 2.7 是直径 300mm 硅晶体在 0.5T TMF 作用下的速度场分布及其流线形状。

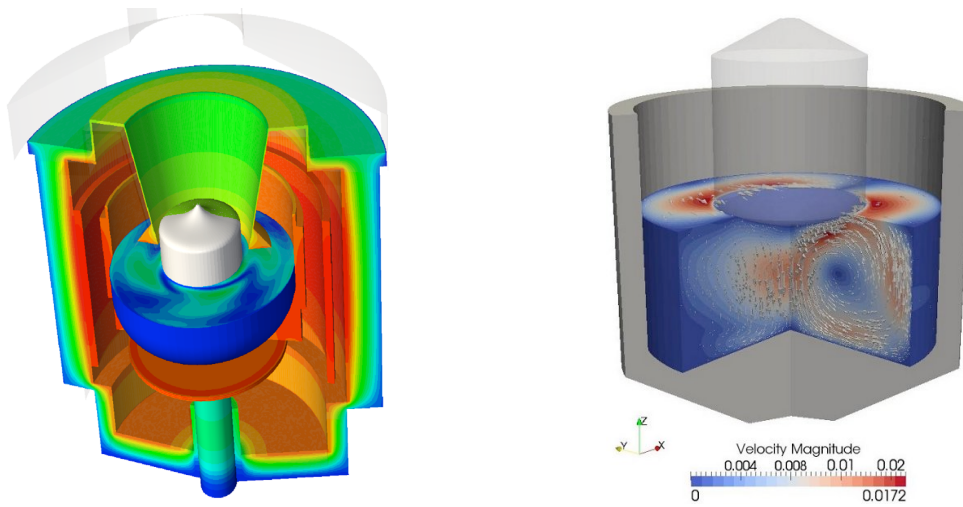


图 2.6 涉及横向磁场效应的 3D 模型

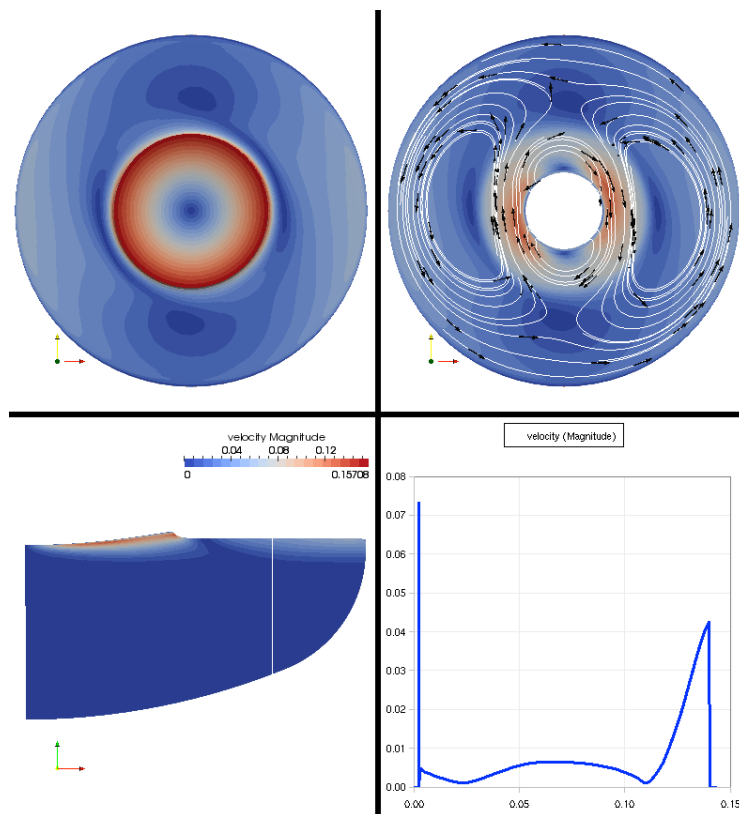


图 2.7 直径 300mm 硅晶在 0.5T TMF 下的速度场、流线分布（上图：速度分布、流线；
下图：熔体-晶体界面处的速度场与横截面上的速度曲线，界面处有显著的 Hartmann 层）

2.1.2 FEMAG/CZ 软件的典型应用

FEMAG/CZ 软件的典型应用是半导体与太阳能光伏用单晶硅 Cz 法生长工艺过程的模拟。以半导体单晶硅 Cz 法生长工艺模拟为例（图 2.8 是单晶硅片生产制备过程的示意图），单晶硅原材料在生长炉内加热熔融，然后利用提拉晶体生长方法制备得到单晶硅锭，然后切割出单晶硅片。单晶硅片半导体材料广泛用于集成电路上。在单晶硅生长制备中，可以利用 FEMAG 软件对其整个生长过程进行热场分析、工艺参数优化，以提高单晶硅的质量与研发效率，降低其研发的周期与成本。

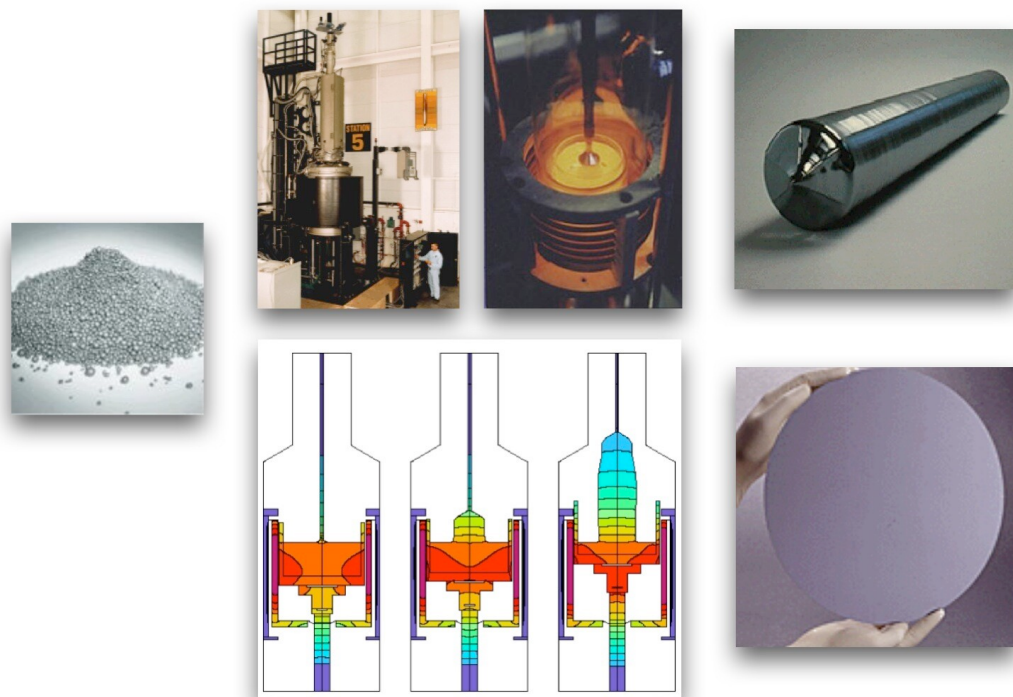


图 2.8 半导体单晶硅片生产制备过程

2.2 FEMAG CZ/OX 软件

2.2.1 FEMAG CZ/OX 软件的主要功能

FEMAG CZ/OX 软件主要用于 Kyropoulos 泡生法生长工艺的模拟。可以有效地模拟分析 LED 光电技术、高能物理、医学成像等领域中常用的氟化物/卤化物/氧化物闪烁性晶体与大尺寸蓝宝石晶体的生长工艺过程。

2.2.2 FEMAG CZ/OX 软件的典型应用

FEMAG CZ/OX 软件的典型应用是模拟分析蓝宝石晶体泡生法生长工艺过程。

蓝宝石因其特殊的物理化学性质、价格优势与晶体尺寸成为光电子与微电子产业中用量最大的无机氧化物晶体材料。以蓝宝石为衬底的 GaN 基蓝绿光 LED 产业的大力发展，不断推动着对蓝宝石生长技术与晶体质量的研究。

泡生法拥有适合蓝宝石晶体生长的最佳温度梯度，是生长大尺寸蓝宝石单晶体的最常用的工艺方法。泡生法（Kyropoulos method）于 1926 年由 Kyropoulos 发明，适合于生长同成分熔化的化合物或用于生长含某种过量组分的晶体。泡生法晶体生长的原理是，将晶体原料放入耐高温的坩埚中加热熔融，调整炉内温度场，使熔体上部处于稍高于熔点状态；再将籽晶杆上受冷的籽晶与熔体接触，使熔体顶部处于过冷状态而结晶于籽晶上，为了使晶体不断长大，需要逐渐降低熔体的温度，同时旋转晶体，以改善熔体的温度分布。也可以缓慢地（或分阶段地）上提晶体，以扩大散热面。晶体在生长过程中或生长结束时不与坩埚壁接触。

图 2.9（a）、（b）分别为利用 FEMAG CZ/OX 软件模拟人工蓝宝石晶体材料泡生法生长温度与速度场分布。在模拟分析中，采用了边界层网格技术。

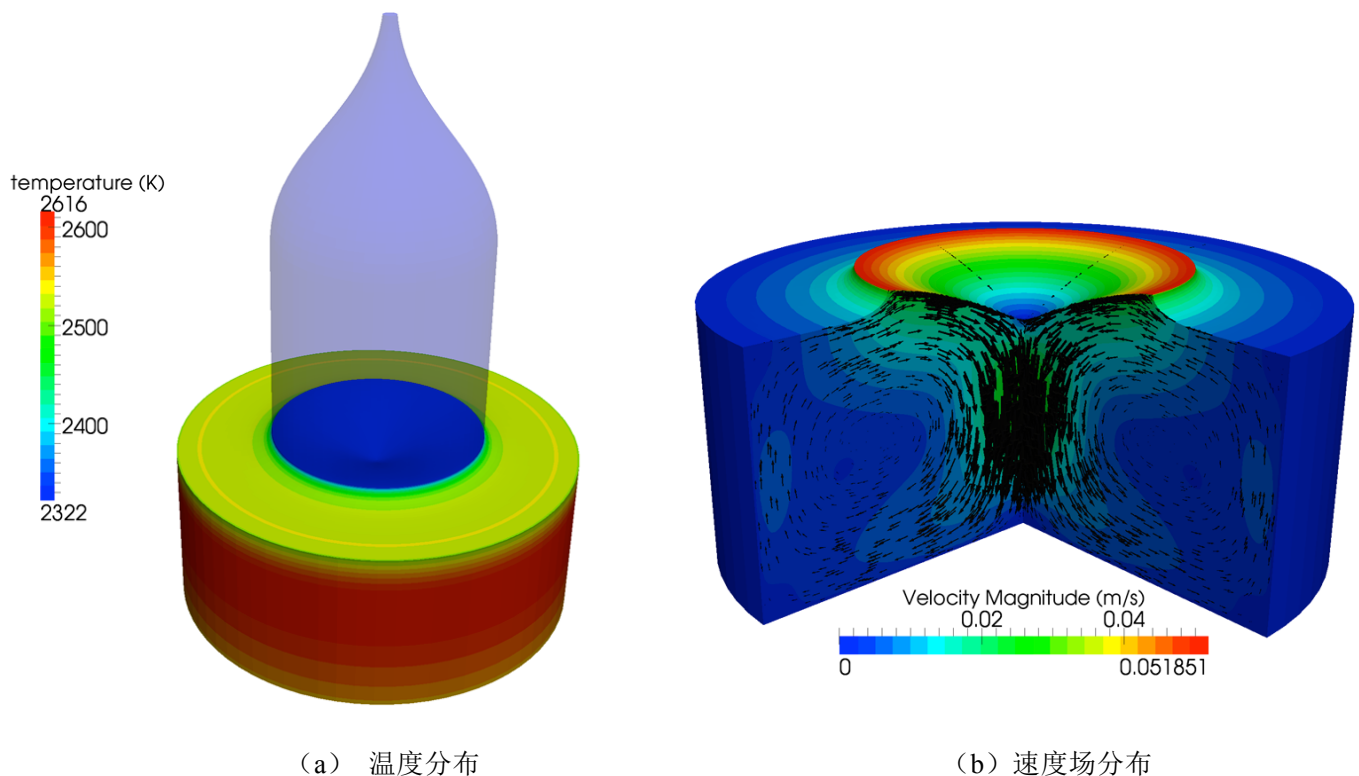


图 2.9 泡生法生长蓝宝石

2.3 FEMAG/FZ 软件

2.3.1 FEMAG/FZ 软件的主要功能

FEMAG/FZ 软件用于模拟分析区熔法生长工艺过程。可以用于超纯硅晶区熔法生长过程的模拟。这些超纯晶体广泛用于大功率器件、电力汽车、高铁等设备上。

2.3.2 FEMAG/FZ 软件的典型应用

FEMAG/FZ 软件的典型应用是模拟超纯晶硅区熔法生长工艺过程。图 2.10 为超纯晶硅区熔法生长工艺模拟结果图，其中（a）为全局热场分布；（b）为熔体流动；（c）为磁场分布。

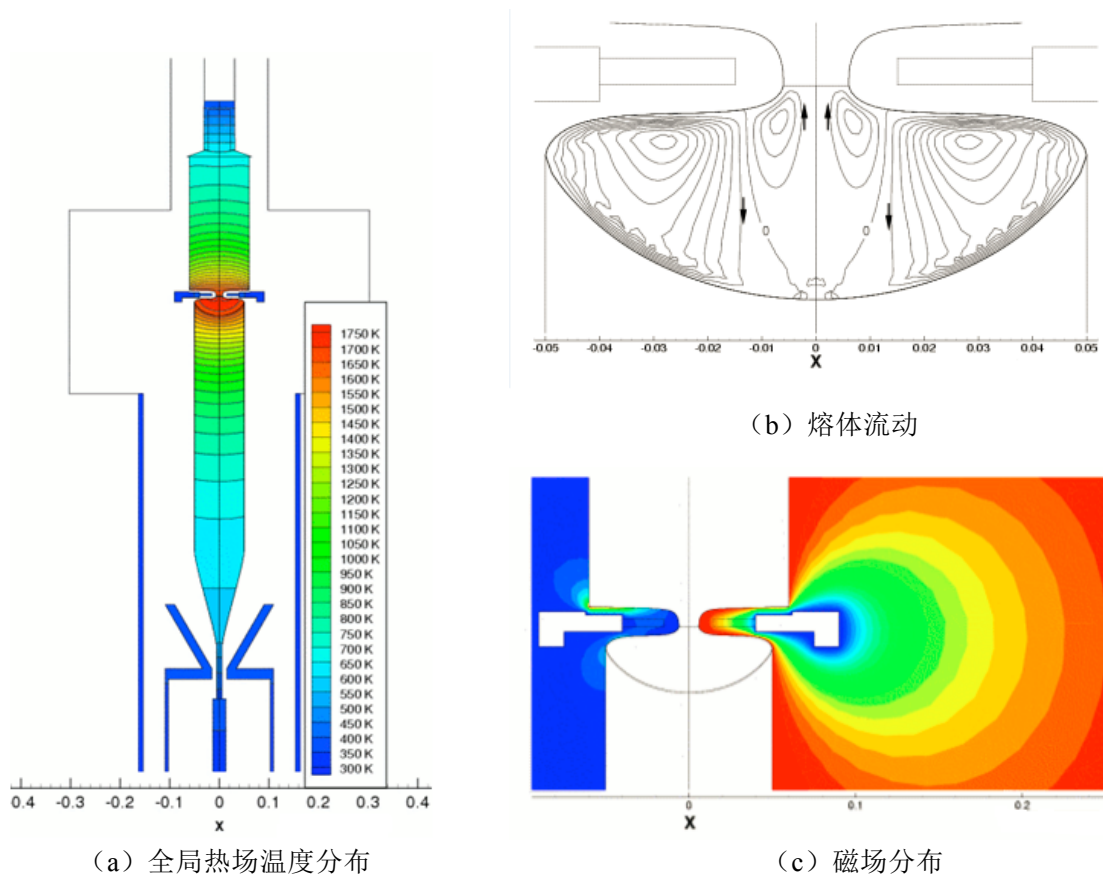


图 2.10 超纯硅晶区熔法生长

2.4 FEMAG/DS 软件

2.4.1 FEMAG/DS 软件的主要功能

FEMAG/DS 软件用于模拟分析定向凝固系统（Directional Solidification System,DSS）中整个铸锭多晶体生长过程。多晶体主要应用于太阳能光伏、LED 等领域。

FEMAG/DS 软件采用高效、快速的 FLET 方法（Fourier Limited Expansion Technique）构建模型，该方法结合了传统的 2D 有限元法（R-Z 面内）与方位角方向的谱分析方法的优点，用户只需要定义一个垂直面上的几何模型，划分 2D 网格。而水平面上的几何信息由谱方法自动处理。利用 FLET 方法可以明显降低计算成本、简化几何数据与建模、更易于网格生成控制以及保证求解结果精度。利用 FEMAG/DS 软件可以在很短时间内给出热传递、熔体对流、结晶前沿、碳化物/氧化物分布等信息。

2.4.2 FEMAG/DS 软件的典型应用

FEMAG/DS 软件的典型应用是模拟多晶硅锭定向凝固生长过程。图 2.11 为多晶硅锭及其定向凝固工艺的实物与数值模拟（温度分布）。

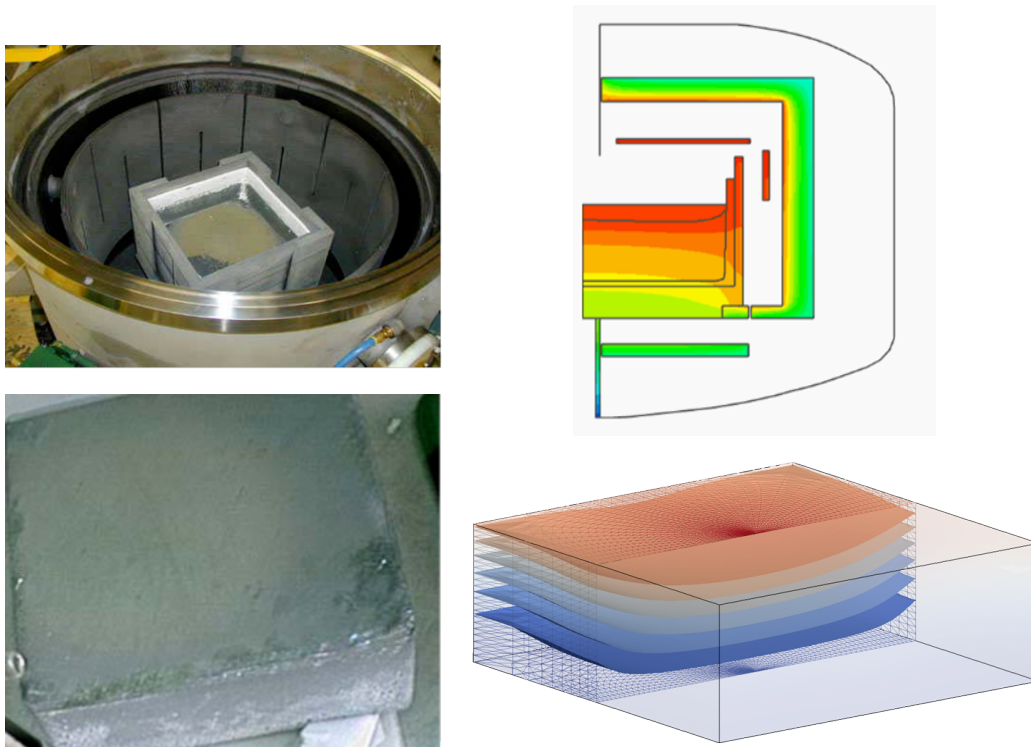


图 2.11 多晶硅锭定向凝固工艺（左图为实物图，右图为对应的温度场分布）

2.5 FEMAG/VB 软件

2.5.1 FEMAG/VB 软件的主要功能

FEMAG/VB 软件用于模拟 VB/VGF 法（Vertical Bridgman and Vertical Gradient Freeze processes）晶体生长工艺，可以用于砷化镓、碲化镉等的垂直布里兹曼法（VB 法）、垂直梯度凝固法（VGF）生长工艺过程的模拟。

2.5.2 FEMAG/VB 软件的典型应用

FEMAG/VB 软件的典型应用是模拟 VB 法砷化镓单晶生长过程。图 2.12 是砷化镓单晶。图 2.13 是利用 FEMAG/VB 软件精确计算 VB 法砷化镓单晶生长工艺的结果。

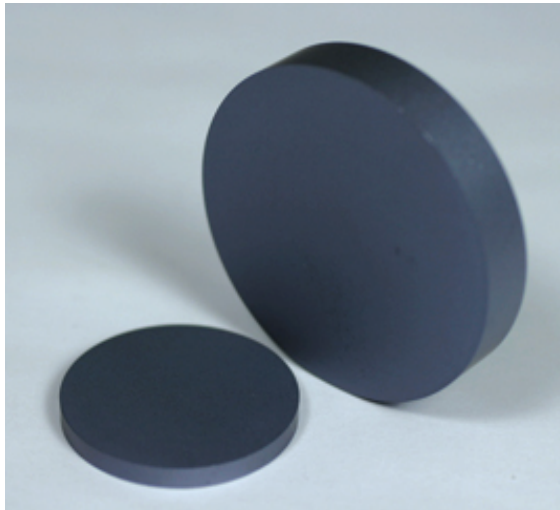


图 2.12 碳化硅单晶

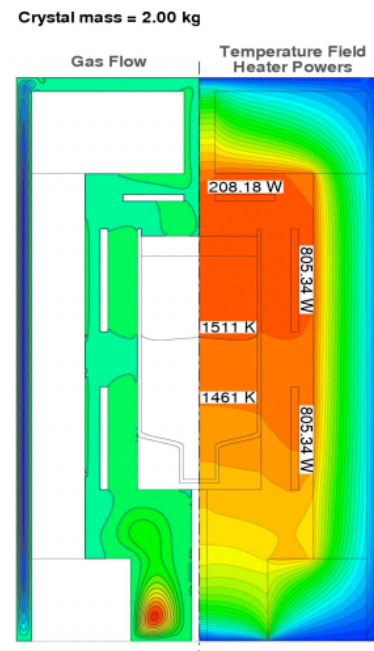


图 2.13 碳化硅 VB 法生长过程模拟

2.6 FEMAG/PVT 软件

2.6.1 FEMAG/PVT 软件的主要功能

FEMAG/PVT 软件用于模拟物理气相传输法（Physical Vapor Transport process, PVT）晶体生长工艺，可以用于碳化硅单晶体、氮化铝、氧化锌多晶体等的 PVT 法生长工艺过程的模拟。

2.6.2 FEMAG/PVT 软件的典型应用

FEMAG/PVT 软件的典型应用是模拟碳化硅单晶的 PVT 法生长过程。图 2.14 是碳化硅晶片。碳化硅（SiC）是一种优质的宽禁带半导体材料，具有宽禁带、高击穿电场、高热导率、高饱和电子漂移速率等优点，可以满足高温、大功率、低损耗大直径器件的需求。SiC 单晶无法经过熔融法形成，而基于改进型 Lely 法的升华生长技术——物理气相传输法是获得 SiC 单晶的常用方法。PVT 法制备 SiC 单晶的生长原理是：高纯 SiC 粉源在高温下分解形成气态物质（主要为 Si、SiC₂、Si₂C），这些气态物质在过饱和度的驱动下，升华至冷端的籽晶处进行生长。过饱和度是由籽晶与粉源之间的温度梯度引起的。图 2.15 是利用 FEMAG/PVT 软件计算碳化硅沉积腔内的温度梯度的结果。

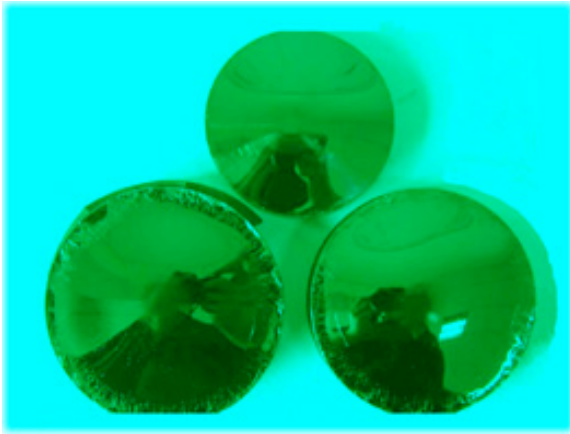


图 2.14 碳化硅晶片

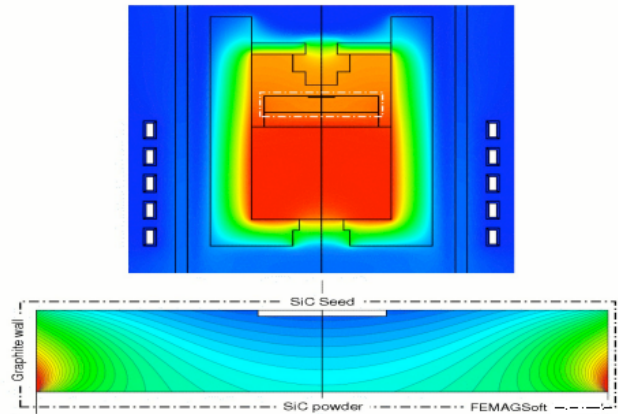


图 2.15 碳化硅沉积腔内温度梯度的精确计算结果

三、FEMAG 软件的主要技术优势

3.1 求解技术先进、高效，求解精度高

晶体生长过程是一个高度非线性的、多尺度的复杂问题，涉及导热、对流、辐射与相变，空间尺度与时间尺度跨度范围大。例如，熔体与气相的传热、传质，湍流，热辐射相互耦合作用，会显著影响晶体的缺陷形成；熔体与气相中存在扩散、粘性、辐射、热边界层，甚至伴有复杂的缺陷边界层，空间尺度跨度大；晶体生长的时间尺度一般慢于热传导时间尺度两个数量级，慢于对流传热时间尺度六个数量级，时间尺度跨度很大等等。FEMAG 软件通过建立考虑多种耦合效应的传热、湍流等全局有限元模型（包括准稳态模型、与时间相关的逆向动态、直接动态模型），基于非结构化网格而开发的 Navier-Stokes 求解器，结合 Newton-Raphson 迭代法，可以准确、快速地求解上述多场、多尺度的复杂问题。

3.2 可预测晶体的缺陷，优化生长工艺

利用 FEMAG 软件可以对复杂的轴对称/非轴对称热场进行全局模拟，提供用以预测复杂系统中物理变量的信息，从而帮助用户有效地预测、控制晶体中的缺陷以及形状，改善、优化晶体生长炉内全局热场温度分布与晶体生长中特有的工艺参数，优化晶体生长的工艺过程与质量，以满足对生产优质，低成本，高使用寿命的晶体的实际需求。

3.3 独具区熔法生长分析功能

FEMAG 软件是国际上唯一的具有区熔法生长（FZ）工艺分析功能的晶体生长数值模拟软件。利用 FEMAG/FZ 软件，可以有效地预测区熔法制备超纯单晶体的整个工艺过程，包括辅助设计热场、分析温度分布、预测晶锭缺陷、评估良品率以及优化工艺参数等。

3.4 中国本土化技术服务便捷、到位

比利时 FEMAG 公司与中仿科技（CnTech）联合成立的中仿 FEMAG 研发中心业已落户中国上海。研发中心本着前瞻性的技术研发和本土化服务的目标，致力于为中国地区的 FEMAG 用户提供全面的解决方案以及最优质的技术服务。研发中心将为用户提供：

- FEMAG 软件最新资讯
- FEMAG 软件的定制开发
- 高效便捷的在线交流平台
- 实时交流的网络研讨会
- 全国范围内的线下技术研讨会
- 专业的软件定制培训

四、关于 FEMAG 公司

FEMAG 是全球首款商业的晶体生长模拟仿真软件。从二十世纪八十年代开始，FEMAG 公司就着力为全球用户开发最专业的晶体生长数值计算仿真工具，经过近三十年的不断发展，已经为全球绝大多数晶体设备供应商、半导体材料科研机构等提供设计、优化其晶体生长工艺过程的帮助。

FEMAG 公司总部位于比利时，FEMAG 公司创始人和首席科学家、新鲁汶大学教授 Dr. François Dupret 是国际著名晶体生长和流体力学专家、第二届晶体生长模型国际研讨会主席、EUROTHERM 相变热力学研讨会联合主席、机械工程学位委员会主席，曾担任国际晶体生长（Journal of Crystal Growth）期刊主编。作为国际上晶体生长数学模型构建和数值仿真计算的领导者和奠基人，其开创性的产品 FEMAG 在国际上广受欢迎，用户遍及全球。

五、FEMAG 公司的主要合作伙伴

FEMAG 拥有来自世界各地的顶级公司和机构作为合作伙伴。FEMAG 公司拥有一大批世界顶级科学家和专业工程师，长期与 UCL（新鲁汶大学）有非常密切的合作。此外，公司还得到了比利时政府的大力支持。我们坚信 FEMAG 软件能够为您或您的企业提供最出色的工艺优化方案。

5.1 FEMAG 公司的主要合作伙伴：

1、UCL（新鲁汶大学）

www.uclouvain.be

新鲁汶大学早在 1980 年就开展了晶体生长方面的研究，是晶体生长领域研究的先驱。目前 FEMAG 的相关研究在该校系统工程与应用力学中心进行。

2、Kayex(美国 Kayex Technology 公司)

www.thermalproductsolutions.com/kayex

Kayex Technology 公司是美国世界五百强企业 SPX 的合作子公司，是世界领先的电子和太阳能级硅材料直拉单晶炉设备供应商，为全球众多优秀的太阳能硅片企业独家提供单晶生长设备，其客户遍及北美，欧洲和亚洲。Kayex 公司在晶体生长工艺发展和优化领域使用 FEMAG 软件。

3、CGS

www.cgs-gmbh.de

FEMAG 公司与 CGS 保持着密切的合作关系。

4、IKZ

www.ikz-berlin.de

IKZ 是德国莱布尼茨学会的一个研究机构，也是柏林 Forschungsverbund 研究协会的成员之一，其主要的研究领域包括自然科学、材料科学等。IKZ 在浮动区域熔炼领域的研究就是借助 FEMAG/FZ 软件来进行的。

5、Hanyang University（韩国汉阳大学）

www.hanyang.ac.kr

FEMAG/CZ 软件在韩国汉阳大学相关科研领域的应用已经具有多年的历史。主要应用部门和机构包括计算机与电子工程部，纳米 SOI 国家重点实验室等。

6、Washington University in St. Louis（美国圣路易斯华盛顿大学）

www.wustl.edu

FEMAG 公司与该校能源、环境、化学工程等很多部门都有紧密的合作，软件得到校方的认可。

7、AWEX

www.awex.be

FEMAG 在 AWEX 的协助与合作下发展非常迅速，商业活动遍及全球各地。

8、DGTRE

recherche-technologie.wallonie.be

DGTRE 为 FEMAG 的发展和研究提供了大力支持。

9、其他国内高校和科研机构

清华大学、北京有色金属研究总院、天津环欧半导体材料、中环股份等。



六、关于中仿科技（CnTech）公司

近年来，中国已经成为全球最大的光伏制造基地和半导体材料消费市场，同时，处于全球竞争体系中的本土半导体设备企业面临着国际半导体设备公司的垄断，国内的晶体设备厂商要破除国际垄断的坚冰，就需要做到更灵敏的反应、灵活的研发和加倍的努力。

中仿科技（CnTech）与比利时 FEMAG 公司深度强强合作，本着“根植中国，服务全球”的理念，共同在中国设立中仿 FEMAG 研发中心，将国际一流的数值算法及数字仿真技术引入中国，研发更适合中国市场并完全拥有中国自主知识产权的产品，服务中国并辐射全球用户。中仿 FEMAG 研发中心以具有前瞻性技术的产品、强大的协同创新能力、优质的技术支持，让本土高端装备、材料科学、半导体、集成电路、LED、晶体设备厂商和科研用户更富有竞争力。

中仿科技（CnTech）成立于 2003 年，是中国领先的仿真分析软件和系统解决方案的提供者。中仿科技依靠自主创新研发拥有自主知识产权的中仿 CAE 系列产品，同时与国际上领先的数值仿真技术公司拥有长期而紧密的合作关系，具备较强的自主研发能力和创新能力，能够为中国企业和科研机构提供世界一流的仿真技术解决方案。

