

FEMAG 蓝宝石晶体生长数值模拟方案

目录

1. 背景介绍	1
1.1 蓝宝石	1
1.2 蓝宝石晶体常用生长方法	1
2. 问题及需求	3
2.1 工业蓝宝石晶体生长现状	3
2.2 蓝宝石晶体生长数值模拟的需求	3
3. FEMAG 解决方案	3
3.1 FEMAG/CZ/OX 的技术案例	3
4. 关于 FEMAG	8
5. 关于中仿科技（CnTech）公司	9

1. 背景介绍

1.1 蓝宝石

蓝宝石英文名称为 Sapphire，是三方晶系。蓝宝石的矿物名称为刚玉，属于刚玉族矿物。实际上自然界中的宝石级刚玉除红色的称红宝石外，其余各种颜色如蓝色、淡蓝色、绿色、黄色、灰色、无色等，均称为蓝宝石。蓝宝石的化学成分主要是 Al_2O_3 。通常显示其他颜色是因为刚玉中含有铁 (Fe) 和钛 (Ti) 等微量元素，因此会呈现蓝、天蓝、淡蓝等颜色，其中以鲜艳的天蓝色者为最好。

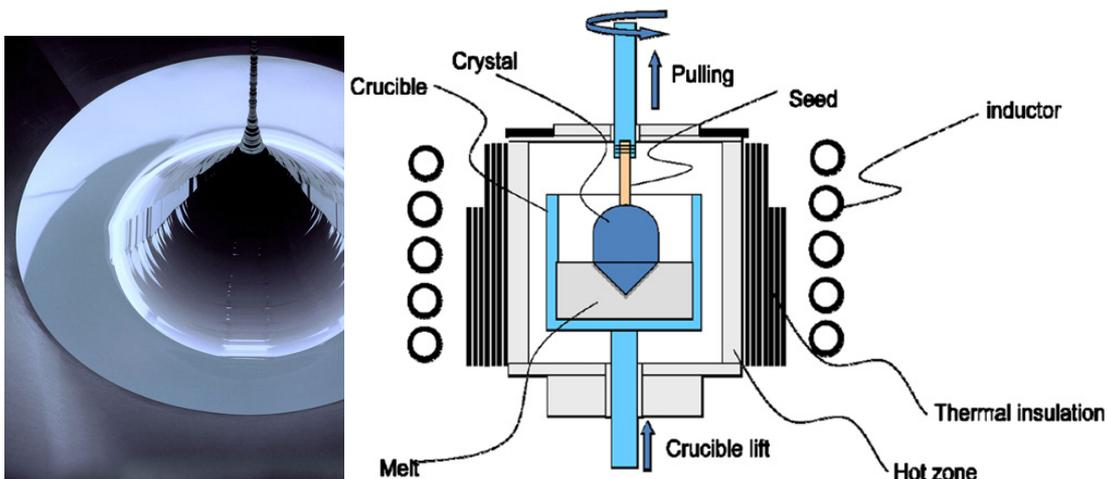
蓝宝石以其晶莹剔透的美丽颜色，自古就被蒙上神秘的超自然的色彩。在现代人眼中，蓝宝石也是被大众所喜爱的珍贵装饰物。在工业上，蓝宝石是除金刚石以外，硬度最高的天然材料，而且耐磨、透光性好，具有多种光学、机械、电气、热以及化学特性，因此还被广泛应用于工业等多种领域。蓝宝石不仅是军用车透明装甲的材料，也是下一代手机等电子产品屏幕，LED 等电子器件和衬底的主要材料。用蓝宝石制成的手机屏幕，除了金刚石以外，任何其他天然物品都无法对其造成破坏和磨损，因此蓝宝石屏号称“永不磨损”的屏幕。

1.2 蓝宝石晶体常用生长方法

蓝宝石工业价值很高，可以通过人工生长的方法来获取。蓝宝石晶体生长方式可划分为溶液生长、熔体生长、气相生长三种，其中熔体生长方式因具有生长速率快，纯度高和晶体完整性好等特点，而成为最常用的晶体生长方式。工业上常用的蓝宝石晶体熔体生长方法有直拉法，泡生法，热交换法等。如何低成本、高质量地生长大尺寸蓝宝石单晶已成为当前面临的迫切任务。

1.2.1 直拉法

直拉法又丘克拉斯基法(Czochralskimethod, 简称 CZ 法)，是一种从熔体中生长高质量单晶的方法。提拉法的生长工艺首先将晶体原料放在耐高温的坩埚中加热熔化，调整炉内温度场，使熔体上部处于过冷状态；然后在籽晶杆上安放一粒籽晶，让籽晶接触熔体表面，待籽晶表面稍熔后，提拉并转动籽晶杆，使熔体处于过冷状态而结晶于籽晶上，在不断提拉和旋转过程中，生长出圆柱状晶体，示意图如下。

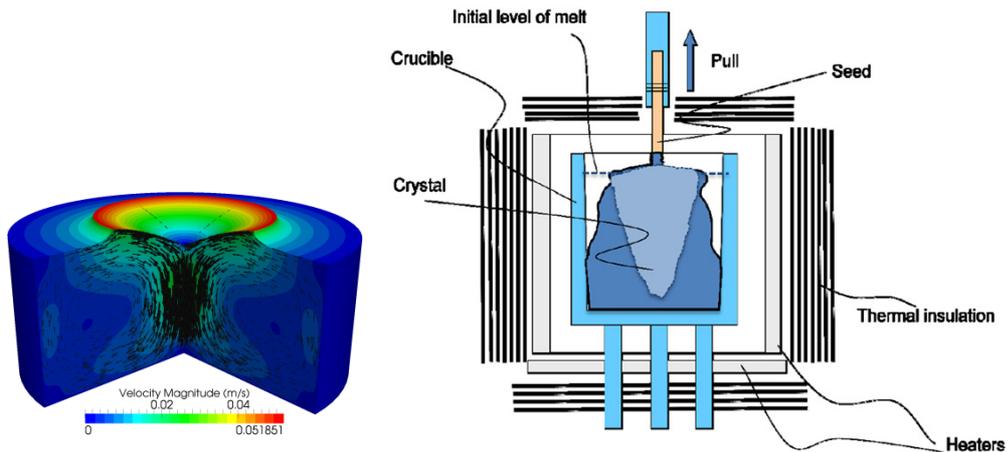


CZ 法的技术特点有：

- 1) 在晶体生长过程中，可以方便的观察晶体的生长情况；
- 2) 晶体在自由液面生长，不受坩埚的强制作用，可降低晶体的应力；
- 3) 可以方便的使用所需取向籽晶和“缩颈”工艺，有助于以比较快的速率生长较高质量的晶体，晶体完整性较好；
- 4) 晶体、坩埚转动引起的强制对流和重力作用引起的自然对流相互作用，使复杂液流作用不可克服，易产生晶体缺陷；
- 5) 机械扰动在生长大直径晶体时容易使晶体产生缺陷。

1.2.2 泡生法

泡生法又称之为凯氏长晶法(Kyropoulos method)。是目前应用最广泛的蓝宝石晶体生长方法，约占市场份额的 70%。其原理与直拉法类似，先将原料加热至熔点后熔化形成熔汤，再用籽晶棒接触到熔汤表面，在晶种与熔汤的固液界面上开始生长和晶种相同晶体结构的单晶，晶种以极缓慢的速度往上拉升，但在晶种往上拉晶一段时间以形成晶颈，待熔汤与晶种界面的凝固速率稳定后，晶种便不再拉升，也没有作旋转，仅以控制冷却速率方式来使单晶从上方逐渐往下凝固，最后凝固成一整个单晶晶锭。下图就是泡生法示意图。



泡生法技术特点有：

- 1) 在整个晶体生长过程中，晶体不被提出坩埚，仍处于热区。这样就可以精确控制它的冷却速度，减小热应力；
- 2) 晶体生长时，固液界面处于熔体包围之中。这样熔体表面的温度扰动和机械扰动在到达固液界面以前可被熔体减小以致消除；
- 3) 选用软水作为热交换器内的工作流体，相对于利用氦气作冷却剂的热交换法可以有效降低实验成本；
- 4) 晶体生长过程中存在晶体的移动和转动，容易受到机械振动影响。

2. 问题及需求

2.1 工业蓝宝石晶体生长现状

从工艺角度来看，蓝宝石晶体生长涉及到流体，传热，传质等综合物理过程，生产大尺寸蓝宝石晶体的生长周期长，工艺复杂，而且原材料纯度、处理状态、制备工艺参数等对晶体质量影响较大，因此晶体生长的成品率不高，对工艺控制的要求很高。

以泡生法为例，泡生法是目前最常用的生长蓝宝石单晶的方法，具有温度梯度小、晶体与坩埚不接触等特点。但生长的蓝宝石晶体常含有位错、气泡、包裹物、裂隙等缺陷，大大降低了晶体的利用率。因此，如何低成本、高质量地生长大尺寸蓝宝石单晶，成为当前企业和研究者们关注的重点。

2.2 蓝宝石晶体生长数值模拟的需求

传统改进工艺，提高效益的做法是针对不同工艺参数生长出晶体进行详细的性能测试和微观组织结构分析，在此基础上给出进一步改进的工艺参数和技术优化措施，并开始下一轮次的晶体生长，来达到不断修改和优化工艺，获得高质量晶体材料的目的。可见，对于复杂的工艺和难以控制的参数，这样改进和优化的做法大大拖延了研究生产周期，而且需要耗费巨大的人力物力。

随着高速计算机的迅速发展，数值模拟方法已经发展成为解决实际问题或辅助实际生产的一种重要手段。特别是对于生长蓝宝石晶体等复杂的工艺，借助数值模拟的方法来帮助分析可以最大程度的提高生产效率，优化产品质量，降低产品成本。

3. FEMAG 解决方案

FEMAG 软件是一套专业的晶体生长模拟软件，其中 FEMAG/CZ 软件是针对直拉法（Cz）而开发的专用软件，该软件致力于为直拉法晶体生长技术和工艺提供专业的仿真模拟与数据分析，FEMAG/CZ/OX 软件可以用于泡生法的模拟，能够完美分析泡生法生长蓝宝石的过程。FEMAG 软件可以实现包括热场，流场，磁场等在内的多物理场耦合过程的分析，能够分析蓝宝石晶体缺陷，辅助蓝宝石生长工艺优化等，最大程度地为您或您的企业提供可靠的仿真数据和优化方案。

3.1 FEMAG/CZ/OX 的技术案例

3.1.1 炉体设计

对泡生法、直拉法而言，炉体的温度梯度是影响晶体生长质量最关键的因素之一。炉体热场的合理设计，能够减少能耗，提高晶体的生长质量。FEMAG 软件能具有先进的分析算法，够实现炉体全局热场的模拟、加热器功率的分析以及炉体结构的优化设计等。下图是以直拉法为例，炉体的结构设计与对应的热场模拟如图 3.1 所示。

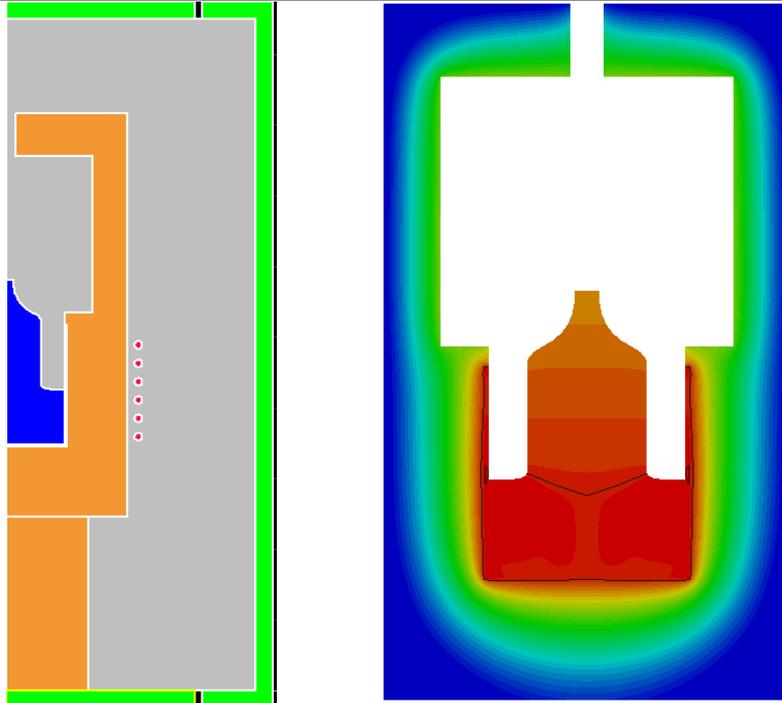


图 3.1 直拉法炉体设计以及对应的炉体温度场示意图

3.1.2 热场流场的分析

FEMAG 具有热场、流场的耦合分析功能，能够实现全局的热场以及流场分布分析。图 3.2 案例是直拉法生长蓝宝石热场以及流场模拟的示意图。图 3.3 案例是泡生法生长蓝宝石的热场以及流场模拟结果。

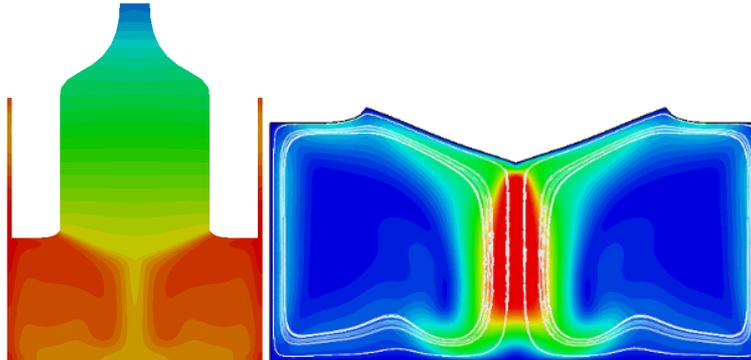


图 3.2 直拉法生长蓝宝石热场流场

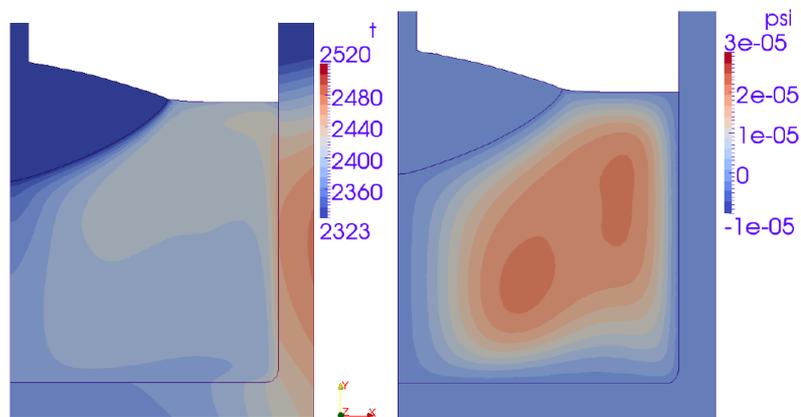


图 3.3 泡生法生长蓝宝石热场流场

FEMAG 软件的算法支持高级的传热模式。例如支持对蓝宝石晶体生长很关键的辐射传热，使得 FEMAG 可以修正传统的传热模型，提高模拟的精度。

下面给出的是用准稳态方法模拟直拉法生长 40mm 蓝宝石的案例，材料参数设置如图 3.4 所示，模拟考虑了辐射传热。图 3.5 分别是炉体温度场分布，以及对应的生长区域内熔体和晶体的温度场以及熔体的流场分布。图 3.6 是速度矢量分量图，可以清楚的看到熔体和晶体在提拉生长的整个过程中运动情况。

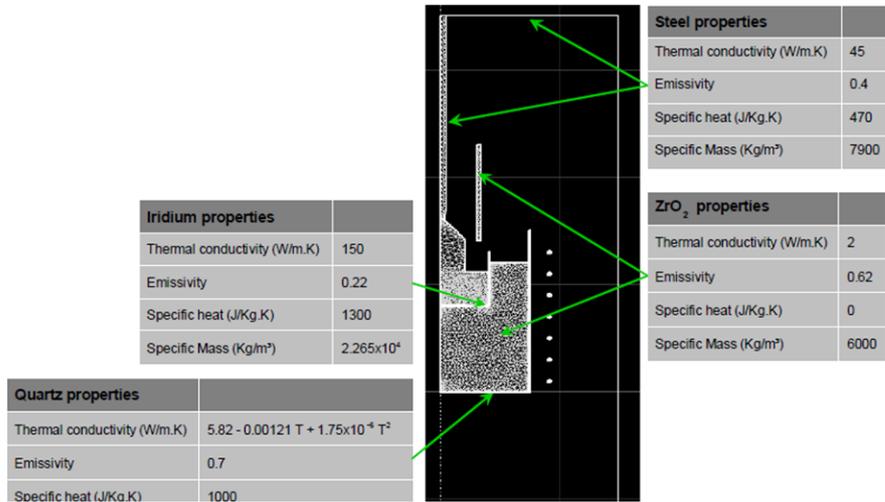


图 3.4 FEMAG/CZ 蓝宝石前处理的材料参数设置

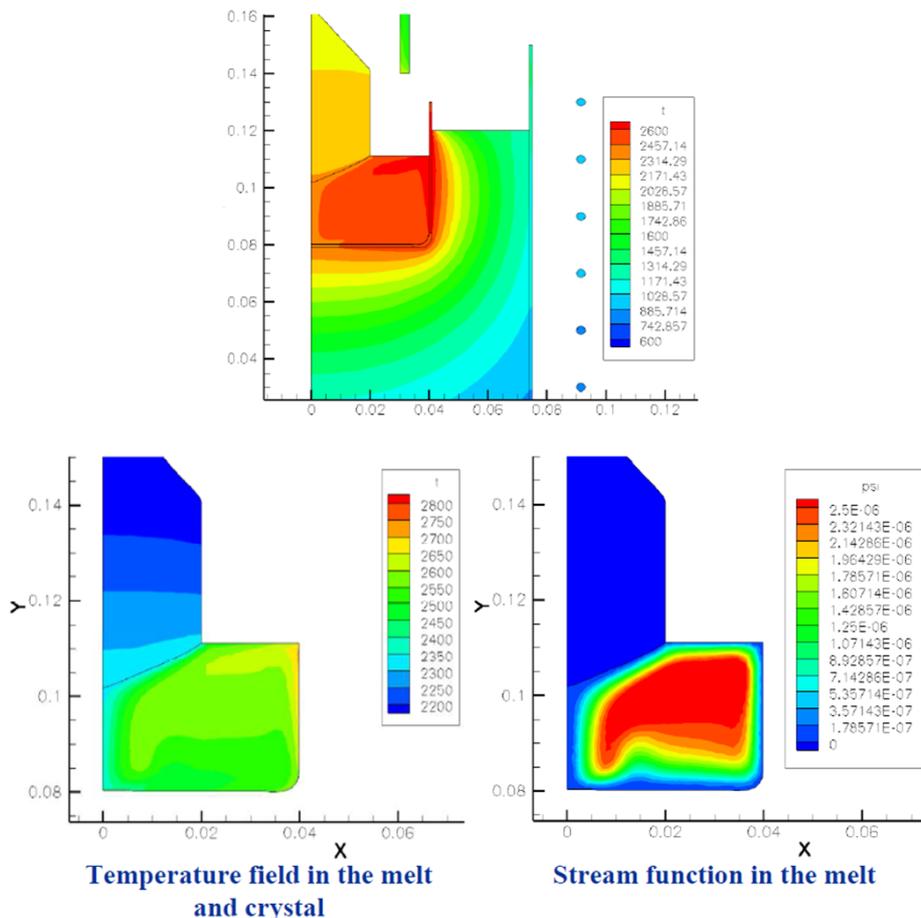


图 3.5 炉体热场（上）和晶体生长区域热场流场分布（下）

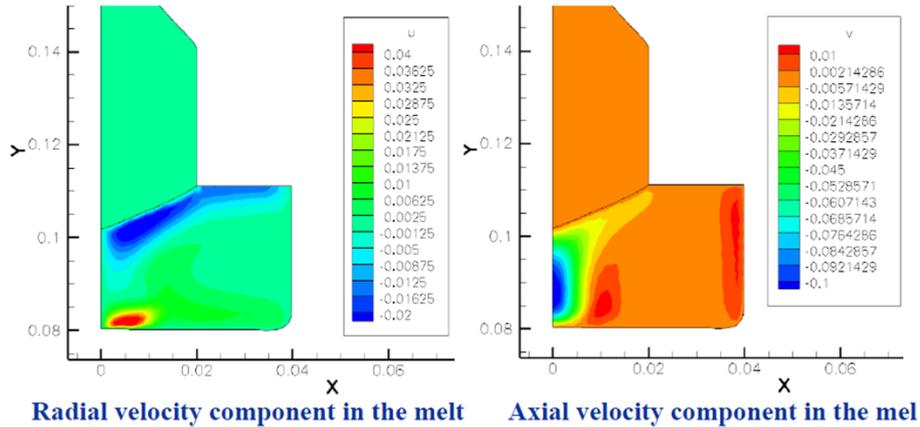


图 3.6 生长阶段速度矢量分量

分别在熔体或者晶体中考虑辐射传热边界，分析热场与流场并进行对比，可以得到不同的热场与流场结果。考虑了辐射传热边界，热场、流场的模拟结果更精确。

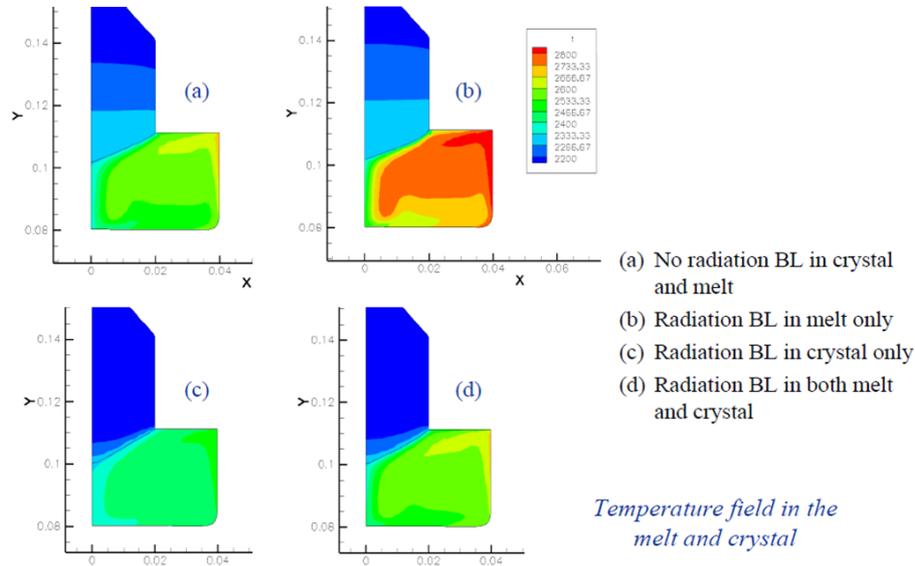


图 3.7 热场模拟；a 不考虑热辐射，b 只考虑熔体热辐射，c 只考虑晶体热辐射，d 同时考虑熔体与晶体热辐射

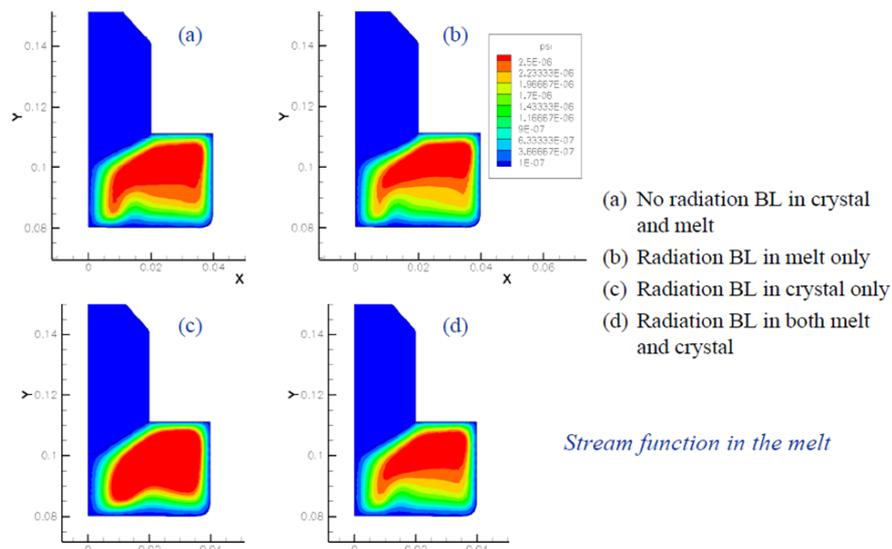


图 3.7 流场模拟；a 不考虑热辐射，b 只考虑熔体热辐射，c 只考虑晶体热辐射，d 同时考虑熔体与晶体热辐射

3.1.3 先进的网格划分策略

FEMAG/CZ 支持对晶体生长炉全局的非结构网格自动生成，同时还针对了磁场作用下磁流体边界层效应，复杂流动边界层效应等情况，FEMAG 特别提供了对 BLM 边界层网格自动划分的支持，能够很好的适应复杂的结构和边界物理流动层。

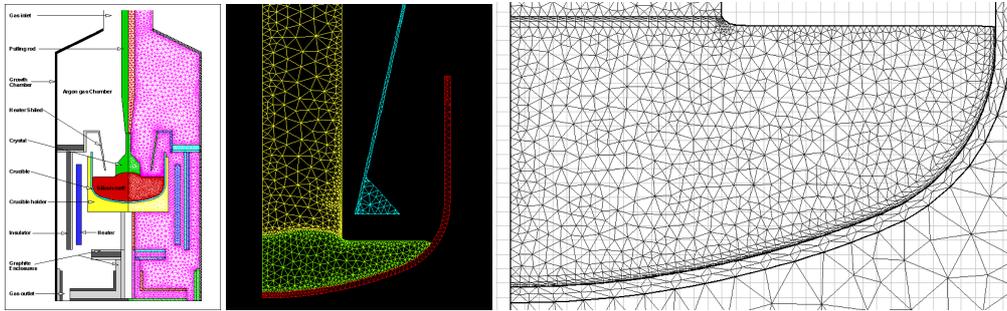


图 3.8 (a) 整个炉体的非结构网格；(b) 关键区域非结构网格；(c) BLM 边界网格沿着熔体边缘分布

下面给出的案例是 BLM 网格划分策略在蓝宝石泡生法晶体生长中的应用。图 3.9 显示了普通网格与 FEMAG 的 BLM 网格差别。

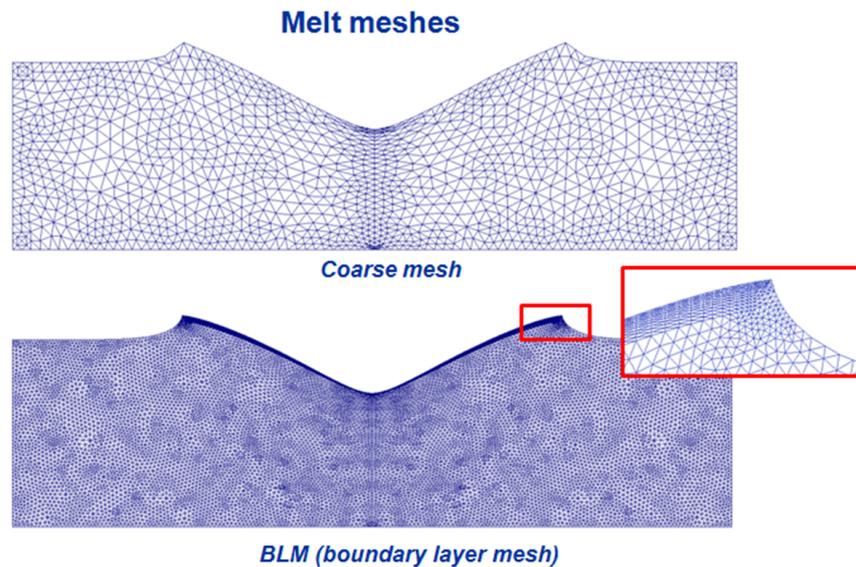


图 3.9 普通网格（上）与 BLM 网格（下）的对比

图 3.10、图 3.11 分别是在流场与热场模拟中，普通网格与 BLM 网格结果的差异，图 3.10 显示了温度场分布，图中绿线标定了凝固界面，可以看到在引入了 BLM 网格之后，凝固界面由平直转为弯曲，与实际情况更接近。图 3.11 显示了相应蓝宝石案例的流场图，引入 BLM 网格后，模拟结果在边界处有明显的区别。可见 BLM 网格极大的提高了模拟精度。

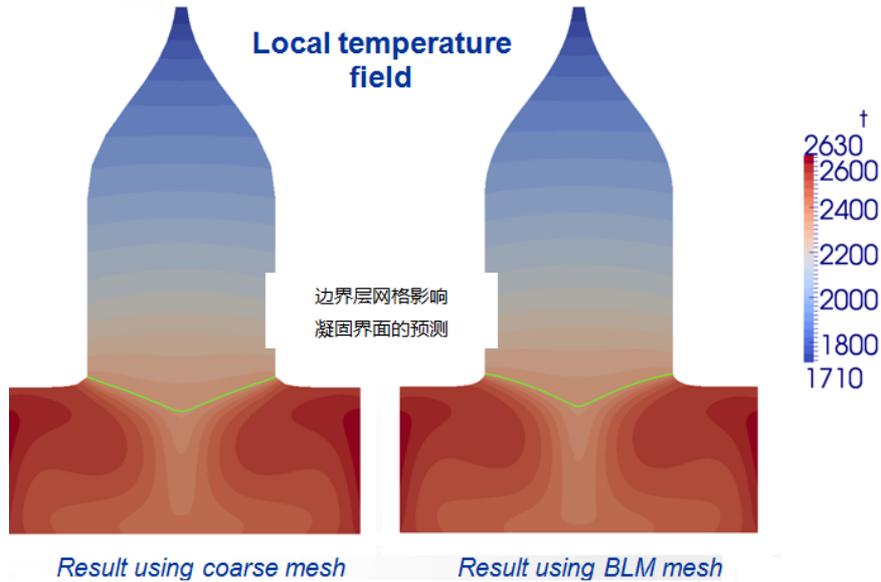


图 3.10 温度场模拟对比，(a) 普通网格 (b) BLM 网格

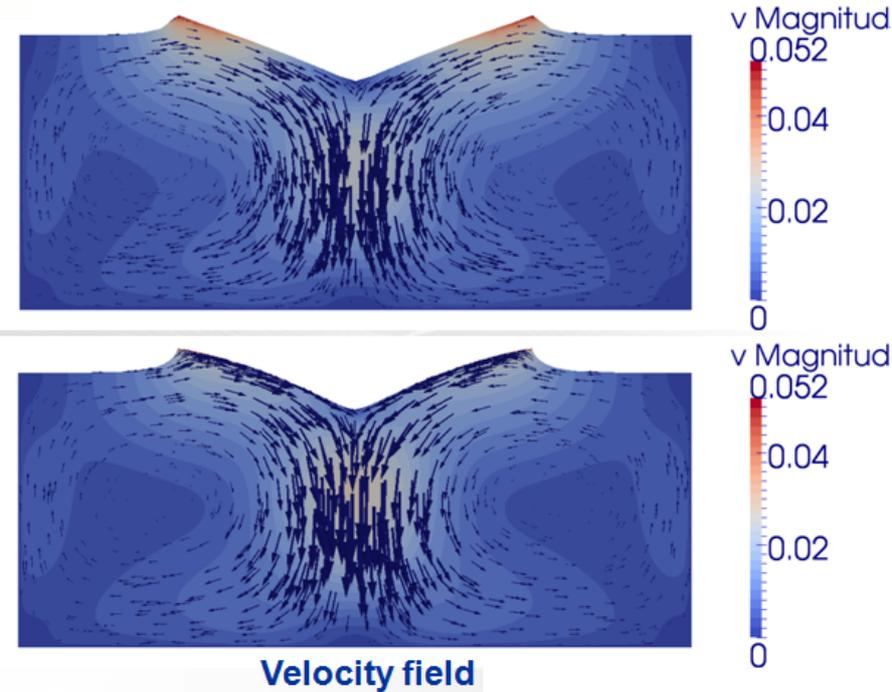


图 3.11 流场模拟对比，(a) 普通网格，(b) BLM 网格

4. 关于 FEMAG

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，经过三十多年的不断发展，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。

5. 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。

了解更多详细信息，可访问公司网站：<http://www.CnTech.com.cn>。

公司邮箱：info@cntech.com.cn，全国统一客服热线：400 888 5100。

中仿科技 (上海) 公司

地址：上海市漕河泾开发区松江科技园莘砖公路 258 号 32 幢 10 楼 D 座 (201612)

电话：+86 21-37696588 传真：+86 21-37696588-823

中仿科技 (北京) 公司

地址：北京市海淀区上地十街 1 号院辉煌国际 2 号楼 13 层 1307 室 (100085)

电话：+86-10-59713407 传真：+86-10-59713207

中仿科技 (武汉) 公司

地址：湖北省武汉市武昌区武珞路 442 号中南国际城 A2 座 2405 室 (430071)

电话：+86-27-68782895 传真：+86-27-68782895

