

JGD 提拉单晶炉晶体模型的数字化

陈川贵,丁雨瞳,龙勇,何晔,吴昊,岑伟,李青蔚

(中国电子科技集团公司第二十六研究所,重庆 401332)

摘要:中国电科芯片研究院生产的 JGD 提拉单晶炉是一种上称重自动直径控制激光单晶炉,它实现了提拉晶体全自动智能生长控制。利用 JGD 提拉单晶炉控制软件建立提拉法晶体数学模型,晶体生长全程以数学模型为标准,以晶体质量为控制量进行实时闭环反馈控制。该软件建立的晶体数学模型有四段式晶体数学模型和任意多段晶体数学模型两种形式。在设计放肩段时,四段式晶体数学模型充分体现了晶体籽晶段与放肩段、等径段三位一体平滑过渡的理念;而任意多段晶体数学模型在曲线设计上更加灵活多样,晶体数学模型设计更便捷。JGD 提拉单晶炉控制软件晶体数学模型被广泛用于多种晶体生长过程,如 InSb、YAG 等晶体。晶体外形控制良好、品质优良。

关键词:自动化;晶体;温场;晶体数学模型;数字化

中图分类号:TN384;TN305 **文献标识码:**A

Digitalization of a Crystal Model for a JGD Single-Crystal Furnace

CHEN Chuangui, DING Yuchong, LONG Yong, HE Ye, WU Hao, CEN Wei, LI Qingwei

(The 26th Institute of China Electronics Technology Group Corporation, Chongqing 401332, China)

Abstract: A JGD-type single-crystal laser furnace produced by China Electronics Technology Chip Research Institute is a single-crystal furnace with automatic diameter control for upward weighing, which helps realize fully automatic intelligent growth control of crystal-pulling methods. The JGD Czochralski crystal furnace control software uses a mathematical model for Czochralski crystal growth. The entire process of crystal growth is based on the mathematical model, and real-time closed-loop feedback control is achieved using a crystal weight as the control variable. This software employs four-segment and arbitrary multi-segment crystal mathematical models. The former model embodies the concept of smooth transition between the seed crystal, shoulder, and equal-diameter segments in the design of the shoulder segment, and the latter model is more flexible and diverse in curve design, making crystal mathematical model design more convenient. The crystal mathematical model of the JGD single-crystal furnace control software is widely used in various crystal growth processes including those of InSb, YAG, and other crystals. The crystal shape is well controlled and of excellent quality.

Key words: automation; crystals; temperature field; mathematical crystallography; digitalize

0 引言

晶体分为天然晶体和人工合成晶体。生活中珠宝大多是天然晶体,还有大量的人工合成晶体被广泛应用于材料科学、地球科学和生命科学。合成晶体要靠人工培育,即为晶体生长。提拉法^[1]是一种重要的晶体生长方法。

随着科学技术的发展,对晶体的要求越来越高,在品质和尺寸上都对工艺技术提出了严格要求。如通过“缩颈”工艺减少籽晶缺陷;晶体放肩部

分要平滑过渡且无阶跃突变,以减少应力;晶体等径部分外形无凹凸,甚至有些晶体需要特定的收尾形状来提高晶体品质等。这些都要求工艺人员设计出相应的晶体形状,并以此进行晶体生长,提高晶体品质。

早期的提拉单晶炉多采用欧陆表或宇电温控表^[2],以温度或者功率作为控制量来间接控制晶体生长。但此法并不能保证晶体外形完全符合工艺人员的设计要求。如“回熔”与“缩颈”工艺,通过提

收稿日期:2024-03-11

作者简介:陈川贵(1970-),男,重庆市合川人,高级工程师。

高温或者功率来达到目的,但工艺人员需多次实验才能确定,若温场等外部环境发生改变,则需要再次摸索修改相应的功率或者温度值。因此,传统控制方法不仅对工艺人员要求高,且存在晶体外形难控制,效率低等问题。

为解决上述问题,JGD 提拉单晶炉控制软件通过建立晶体数学模型,在上称重模式下,以单位时间内数学模型下的晶体质量进行晶体生长控制^[3]。

1 四段式晶体数学模型设计

四段式数学模型主要包括籽晶段、放肩段、等径段和收尾段 4 段。其重点是放肩角度设计,每种晶体材料的特性不同,需要工艺人员根据材料性质选择相应的角度。表 1 为某晶体四段数学模型几何参数,其放肩角为 52°。通常设置 $k=R_1/R_2$ 为常数 1,也可根据需要设为其他常数值。表中, R_1 为籽晶段与放肩段相切的圆弧半径; R_2 为放肩段与等径段相切的圆弧半径。

表 1 某晶体四段数学模型的几何参数

参数	数值	参数	数值
籽晶直径/mm	8	等径直径/mm	62
籽晶长度/mm	25	等径长度/mm	280
放肩角度/(°)	52	收尾直径/mm	20
放肩长度/mm	110	收尾长度/mm	25
R_1/R_2	1		

根据表 1 的参数,JGD 提拉单晶炉控制软件的放肩角 52°晶体数学模型如图 1 所示。

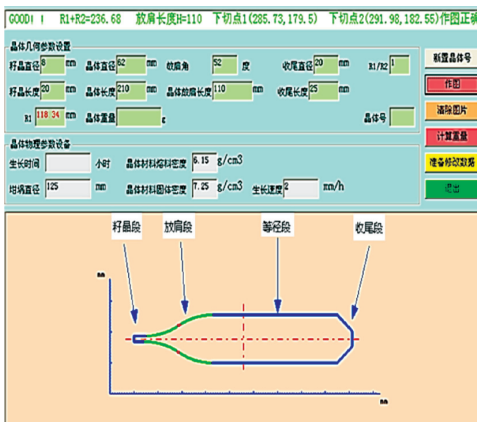


图 1 放肩角为 52°的晶体数学模型

为了获得高质量晶体,生长时要求籽晶段平滑过渡到等径段,这就是放肩段的作用。图 2 是四段式数学模型的放肩段设计原理示意图。按照表 1 参数,直径 $\phi 8$ mm 的籽晶直线与 $R_1=118.34$ mm 圆

弧线相切,为放肩段的“放”, R_1 圆弧线与放肩夹角 $\theta=52^\circ$ 斜线相切,形成切点 1;放肩夹角 θ 斜线与 $R_2=118.34$ mm 圆弧线相切,形成切点 2;切点 1 与切点 2 之间为放肩段的“扩”; R_2 圆弧与直径 $\phi 62$ mm 的晶体等径直线相切,为放肩段的“收”。放肩段担负了晶体从籽晶的“放”、“扩”、“收”,形成放肩段长度 L 。图中,籽晶段与放肩段之间, R_1 、 θ 、 R_2 之间,以及放肩段与等径段之间,都是以相切模式进行过渡,从理论上保证了晶体生长放肩过程的平滑过渡。

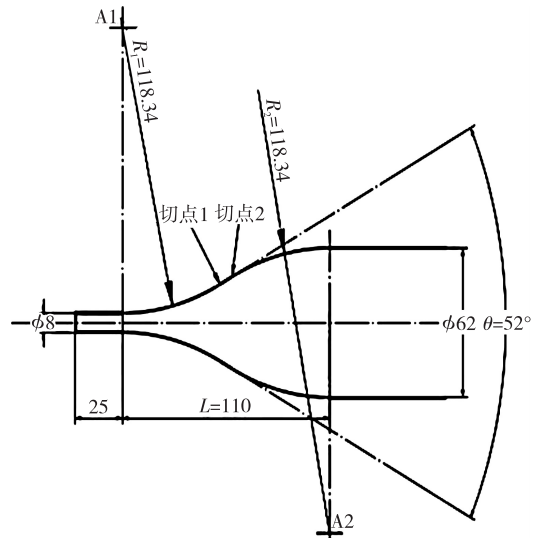


图 2 四段式数学模型的放肩段原理示意图

上述晶体模型 R_1 与 R_2 的确定有两个原则:

1) R_1 的圆心 A_1 在籽晶与放肩接合处的垂直线上, R_2 的圆心 A_2 在放肩与等径接合处的垂直线上。籽晶结束点即放肩 R_1 的起点,籽晶长度线即 R_1 所在圆的切线;同样放肩结束点即等径的起点,等径长度线即 R_2 所在圆的切线。

2) R_1 、 R_2 与放肩角 θ 夹角线必须相切。

以上原则展示了晶体段间平滑过渡关系。 R_1 、 R_2 分别为

$$R_1 = \frac{(D_2 - D_1) / 2 - L \cdot \tan(m/2)}{(1+k) \cdot \sin(m/2)} \quad (1)$$

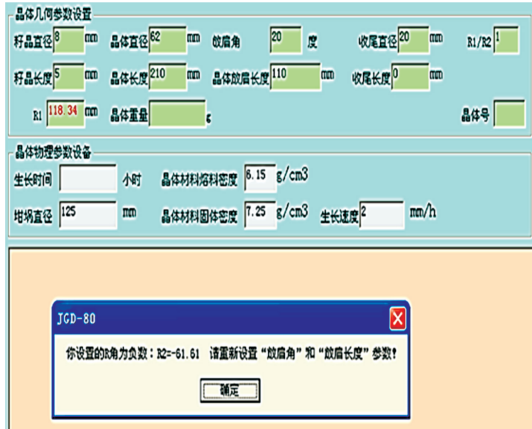
$$R_2 = R_1 / k \quad (2)$$

式中: D_1 为晶体籽晶段直径; D_2 为晶体等径段直径; m 为放肩角弧度值。

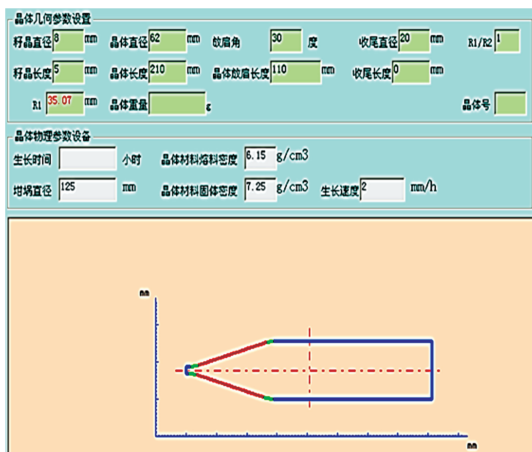
由式(1)、(2)可见,由于 R_1 、 R_2 随着放肩角 θ 的变化而变化,所以 θ 的选择具有一定的范围。一旦放肩角设计不合理,晶体放肩段可能无法形成合理的 R_1 、 R_2 值,即 R_1 、 R_2 所在的圆弧与放肩角斜

线无法相切。

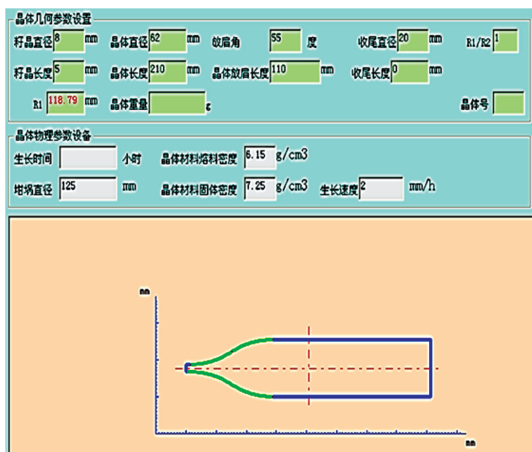
图 3 为放肩角分别为 20°、30°、55°的晶体模型。由图 3(c)可见,两个切点几乎重合,若角度再大,则无法做出合格的图形;由图 3(a)可见,作图已是反向相切,虽有节点,但已不符合晶体外形要求,JGD 提拉单晶炉控制软件不能显示晶体模型图。



(a) 20°



(b) 30°



(c) 55°

图 3 放肩角为 20°、30°、55°的数学模型

在四段式晶体模型中,放肩段的每个曲线细节都清晰明了。但是晶体段数最多设置 4 段;放肩段的曲线也仅一个放肩角与放肩半径 R 的固定模式;收尾段只能是直线方式,方法较简单。

2 任意多段式晶体数学模型设计

随着采用新的数学方法,有了更好的晶体建模手段。此数学方法完全脱离了四段式的思维方式,每段曲线(Spline)^[4]自成一体,且每段曲线变化多样、连贯平滑。曲线类型如图 4 所示。



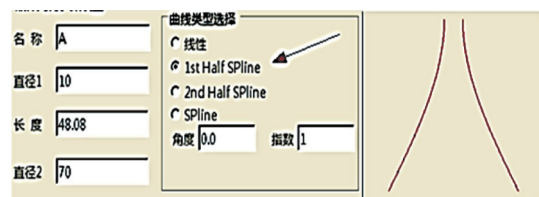
图 4 曲线参数图

任意多段式数学模型,输入每段的直径 1 与直径 2(首尾直径),选择曲线类型就可做出相应段曲线。曲线类型包括了线性(直线)、spline(曲线)两大类。

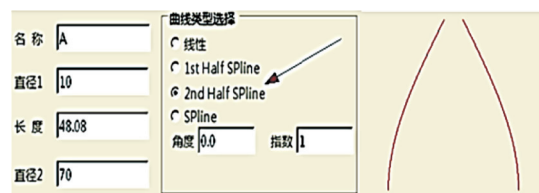
线性又分为两类:一类为直径 1 与直径 2+长度;另一类为直径 1 与直径 2+放肩角。这二者都相当于 $y - y_0 = k(x - x_0)$ 的线性方程。

spline 包括 1st half spline、2nd half spline、spline 3 种曲线类型。每种曲线对应不同的曲线样式;而每种曲线类型,在指数不同,其他参数相同的情况下,曲线样式各不相同。

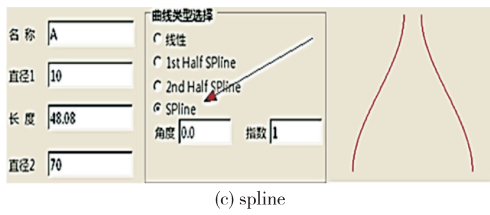
图 5 是直径 1 为 $\varnothing 10$ mm,直径 2 为 $\varnothing 70$ mm,长度为 48.08 mm,分别选择 1st half spline、2nd half spline、spline 曲线,指数为 1 时的曲线模型图。由图可见,曲线形状明显不同。



(a) 1st half spline



(b) 2nd half spline



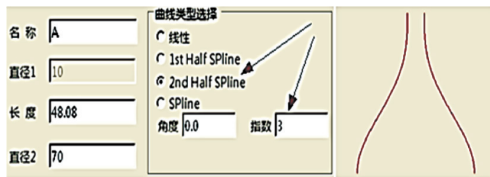
(c) spline

图5 1st half spline、2nd half spline、spline 曲线图

图6是直径1为 $\varnothing 10$ mm,直径2为 $\varnothing 70$ mm,长度为48.08 mm,选择2nd half spline曲线类型,指数分别为1和3时的曲线。由图6(a)可见,曲线无籽晶段,直接进入到了放肩段;由图6(b)可见,籽晶段与放肩段融为一体,但籽晶段和放肩段的直径与长度数据无具体数值,因此,图6(b)一段曲线实现了四段式晶体数学模型中的籽晶段与放肩段两段功能。



(a) 指数为1



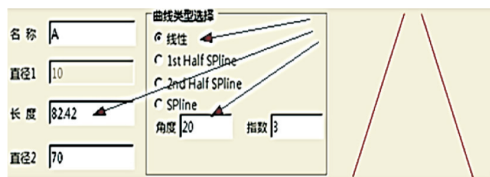
(b) 指数为3

图6 2nd half spline 曲线类型中指数为1和3的曲线图

图7是直径1为 $\varnothing 10$ mm和直径2为 $\varnothing 70$ mm,分别设置线性长度和角度的示意图。图7(a)为不考虑线性直线的角度,设置直线长度48.08 mm的曲线样式;图7(b)为不考虑线性直线的长度,设置直线角度为 20° 时,软件自动计算长度为82.42 mm的曲线样式。



(a) 设定线性长度



(b) 设定线性角度

图7 线性曲线图

任意多段式数学模型的特点:每段模型自成一,晶体建模灵活、多样、高效。同一组数据中,直径1与直径2不变,改变1个参数可获得不同的曲线形状,相应数学模型也随之变化,晶体数学模型设计更加丰富快捷。但段与段之间曲线没有必然联系。图8为任意多段式晶体数学模型段间关系示意图。图8(a)中,第1段设置为线性,并与第2段形成夹角相交;图8(b)中,第1段设置为2nd half spline曲线且指数为3,与第2段实现平滑过渡。因此,任意多段数学模型更多地侧重于每段的曲线样式上,而未考虑晶体生长段间的关系,这需要工艺人员在数学建模时进行综合考虑。JGD 提拉单晶炉控制软件从晶体生长需要的角度出发,对段数也做了相应限制,即最多设计为18段。

晶体几何参数表						
序号	名称	直径1	长度	直径2	曲线	Index
1	A	10	48.08	70	线性	1
2	A	70	60	70	线性	1
3	A	70	30	10	Spline	1

夹角相交

(a) 段间相交过渡

晶体几何参数表						
序号	名称	直径1	长度	直径2	曲线	Index
1	A	10	48.08	70	2nd Half	3
2	A	70	60	70	线性	1
3	A	70	30	10	Spline	1

平滑过渡

(b) 段间平滑过渡

图8 任意多段式晶体数学模型段间关系示意图

3 数学模型在晶体生长中的应用

晶体数学模型被广泛应用于实际生长过程中。在数学模型的设计与使用上需注意以下3点:

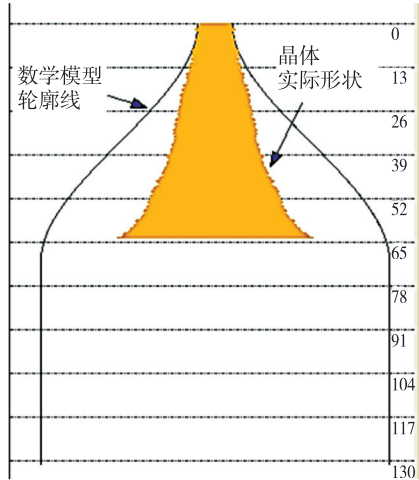
- 1) 晶体模型段间是否平滑与连贯。
- 2) 晶体数学模型是否符合晶体生长特性。
- 3) 晶体数学模型与控制参数是否匹配。

四段式晶体数学模型在籽晶段与放肩段、等径段之间形成了平滑过渡的关系,但收尾段与等径段间不能平滑过渡。任意多段式数学模型的每段自成一,曲线形状丰富多样,但需注意段间关联以及是否平滑过渡。

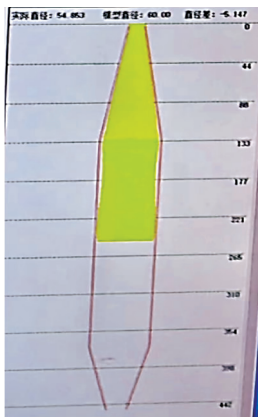
晶体数学模型不只是做出曲线形状,还需考虑模型是否符合晶体生长特性以及温场特点。

图9是某晶体数学模型与实际填充对比图。图中设置直径1为 $\varnothing 10$ mm,直径2为 $\varnothing 100$ mm,放

肩长度为 70 mm,曲线类型选择为 spline。经过多次实验发现,这种晶体在生长阶段不能达到模型的设计结果。后续实验中将放肩长度设为 133 mm,曲线类型选择线性。修改后晶体的数学模型和生长填充见图 9(b)。由图可见,模型的放肩角度明显减小,长出的合格晶体见图 9(c)。



(a) 放肩长度70 mm



(b) 放肩长度133 mm



(c) 实物晶体图

图 9 某晶体数学模型与实际晶体填充对比图

晶体数学模型除了需要符合晶体自身生长特性外,生长出的晶体也可以进一步检验生长过程的控制参数是否合理。图 10 是某型 InSb 单晶外形对比图。由图可见,利用 JGD 提拉单晶炉控制软件进行数学模型建模后,晶体在外观质量上得到较大提升。

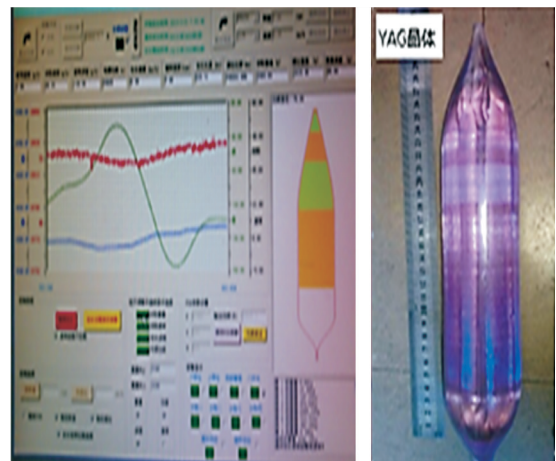


(a) 优化控制参数前

(b) 优化控制参数后

图 10 自控生长的 InSb 晶体

图 11 是某掺杂 YAG 晶体生长过程和晶体实物图。该晶体模型采用任意多段式数学模型建模。晶体数学模型共 6 段,前 4 段是晶体从籽晶逐步长大到等径的过程;第 5 段晶体模型的直径 1 与直径 2 相等,是晶体的等径段;第 6 段实现了晶体收尾功能。



(a) 多段式软件控制图

(b) 多段式晶体

图 11 任意多段式晶体数学模型下的晶体生长过程图

4 结束语

提拉法是晶体生长的重要方法,很长一段时间都是通过控制温度或者功率来间接控制晶体生长。

晶体生长过程依赖于工艺人员对温度或者功率控制的经验,生长出外形和品质较好的晶体需要花费大量时间进行探索。

JGD 提拉单晶炉控制软件在生长控制上先后建立了四段式晶体模型和任意多段晶体模型。晶体生长不再设计温度或者功率曲线,而是直接按数学模型控制晶体质量,实现了按照晶体数学模型进行闭环控制。

JGD 单晶炉控制软件建立的晶体数学模型实现了晶体形状数字化,为自动化控制生长晶体打下了坚实的基础。目前该晶体控制软件已广泛用于 YAG、LYSO、TGG^[5]、Ti:Al₂O₃^[6]、TiTaO₃^[7] 等高温晶体以及 InSb^[8]、Ge、GaSb 等低温晶体的数学建模,并实现了自动控制。

参考文献:

- [1] 赵曙光. CZ 单晶炉晶体生长控制系统[J]. 科学论坛, 2012, (34):111.
ZHAO Shuguang. CZ single crystal furnace crystal growth control system [J]. Science Forum, 2012, (34):111.
- [2] 杨军良,尚付鹏,高鹏. 激光晶体提拉生长模糊 PID 控制系统[J]. 人工晶体学报, 2009, 38(5):1175-1178.
YANG Junliang, SHANG Fupeng, GAO Peng. Laster crystal pulling method fuzzy PID control system [J]. Journal of Arrifical Crystals, 2009, 38(5):1175-1178.
- [3] 陈川贵,贺碧会,余建军,等. 单晶炉上称重电子秤系统的研究与分析[J]. 压电与声光, 2008, 30(5):598-600.
CHEN Chuangui, HE Bihui, SHE Jianjun, et al. Research and analysis of weighing electronic scale system on single crystal furnace [J]. Piezoelectrics & Acoustooptics, 2008, 30(5):598-600.
- [4] 张庆礼,刘文鹏,王小飞,等. 一种大尺寸提拉法单晶生长设计和控制方法:2016107793658[P]. 2016-08-30
- [5] 龙勇,徐扬,石自彬,等. TGG 晶体偏心生长研究[J]. 压电与声光, 2015, 37(2): 277-279.
LONG Yong, XU Yang, SHI Zibin, et al. Research on eccentric growth of TGG crystals [J]. Piezoelectrics & Acoustooptics, 2015, 37(2): 277-279.
- [6] 丁雨瞳,刘军,冯大建,等. $\varnothing 5.5\text{cm}$ Lu₃Al₅O₁₂: Pr 晶体生长与闪烁性能研究[J]. 压电与声光, 2015, 37(4):543-545
DING Yucong, LIU Jun, FENG Dajian, et al. Study on crystal growth of $\varnothing 5.5\text{cm}$ Lu₃Al₅O₁₂: Pr single crystal and its scintillation properties [J]. Piezoelectrics & Acoustooptics, 2015, 37(4):543-545.
- [7] 于明晓,龙勇,石自彬,等. 42° 钽酸锂晶体生长及性能研究[J]. 压电与声光, 2023, 45(1):26-28.
YU Mingxiao, LONG Yong, SHI Zibin, et al. Study on growth and properties of 42° rotated Y cut lithium tantalate single crystals [J]. Piezoelectrics & Acoustooptics, 2023, 45(1):26-28.