

任丙彦 褚世君" 吴 鑫 于建秀 孙秀菊

(河北工业大学材料学院,天津 300130)

摘要:利用数值模拟,对 CZ 硅单晶生长系统中导流系统调整和改进,得到不同导流系统下的氩气流场和全局温场.研究 发现在导流系统中引入导流筒及冷却功能后,氩气流场得到明显的改善,晶体中纵向温度梯度均匀性改善,固液界面趋于 平坦,有利于结晶潜热的散发和单晶径向电阻率的均匀性.研究表明改进导流系统能提高结晶潜热散发速率,有利于提高 晶体拉速.

关键词:数值模拟;直拉硅单晶;结晶潜热;导流筒 EEACC:0510 中图分类号:TN 304.1⁺2 **文献标识码:A 文章编号:**0253-4177(2008)09-1790-04

1 引言

21世纪,能源危机成为举世瞩目的话题,全球化石 燃料将出现生产和消耗的峰值,人类必须在此之前找到 新的替代能源^[1].在此背景下,世界光伏市场发展迅猛. 作为光伏行业的主导产品,晶体硅太阳能电池占据了市 场份额的 90%,其中单晶硅太阳电池的转化效率较高, 但其生产成本也高^[2].降低单晶硅太阳电池的成本有两 个关键因素:(1)扩大晶体直径;(2)提高拉晶速率.然 而,晶体直径扩大和拉速提高的同时,使得结晶潜热的 散发更加困难.因此,结晶潜热的散发成为影响太阳电 池成本的关键因素.作者对原有国产 TDR-80 单晶炉导 流系统进行了分析改进,应用有限元法对全局氩气流场 及全局热场进行了数值模拟计算,分析了导流系统的改 进对结晶潜热的散发及温场的影响,并对其机理进行了 讨论.

2 理论分析

温场是指单晶炉热系统中的温度分布,对晶体的生 长极其重要.虽然单晶炉的整体温度场主要由加热器和 保温部件所决定,但生长过程中固液界面的形状很少受 此影响,此时晶体的热传导是主要的散热因素^[3].

3 数值模拟

本模拟是基于国产 TDR-80 单晶炉进行的.在 450mm 热系统中采用不同的导流系统生长直径为 200mm 的 p型[100]硅单晶.采用双热源并对导流系统 进行了多步改造,具体为:(1)复合式热屏;(2)复合式导流系统(热屏与导流筒组合);(3)增强型复合导流系统(热屏与冷却套筒组合).改造前后热系统如图1所示.

3.1 氩气流场数值模拟

为了对氩气流动进行定量分析,我们对氩气流进行 了数值模拟计算.计算中氩气的入口速度、入口温度作 为已知条件给出.其他物理性质及参数如表1所示.

炉内氩气流为湍流,本文使用带旋流修正k-e湍流



图 1 导流系统改造示意图



表 1 氩气的物理性质及参数

Table 1 Physical properties and data of argon

Parameter	Value	
Conductivity	$0.2373 W/(m \cdot K)$	
Density	$0.558 kg/m^3$	
Heat capacity	520.8J/(kg • K)	
Viscosity	$4.95 \times 10^{-6} \text{kg/(m \cdot s)}$	
Pressure	1500Pa	

^{*}国家自然科学基金资助项目(批准号:60576002)

^{*} 通信作者.Email:jackeychucn@163.com 2008-03-14 收到,2008-06-02 定稿

模型的方程计算[4],

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_{i}}(\rho k\mu_{j}) = \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left[\left(\mu + \frac{\mu_{t}}{\sigma_{k}} \right) \frac{\partial_{k}}{\partial x_{i}} \right] + G_{k} + G_{b} - \rho \varepsilon - Y_{M} + S_{k}$$
(1)

$$\frac{\partial t}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial x_i}{\partial x_i}(\rho \varepsilon \mu_i) = \frac{\partial x_i}{\partial x_i}\left[\left(\mu + \frac{\partial x_i}{\partial \varepsilon}\right)\frac{\partial x_i}{\partial x_i}\right] + \frac{\partial C_i S}{\partial \varepsilon} = \frac{\partial C_i}{\partial \varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{\varepsilon} + C_i \frac{\varepsilon}{\varepsilon} C_i S = \frac{\partial C_i}{\partial \varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{\varepsilon} + C_i \frac{\varepsilon}{\varepsilon} C_i S = \frac{\partial C_i}{\partial \varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{\varepsilon} + C_i \frac{\varepsilon}{\varepsilon} C_i S = \frac{\partial C_i}{\partial \varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{\varepsilon} + C_i \frac{\varepsilon}{\varepsilon} C_i S = \frac{\partial C_i}{\partial \varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{\varepsilon} + C_i \frac{\varepsilon}{\varepsilon} C_i S = \frac{\partial C_i}{\partial \varepsilon} \frac{\varepsilon}{\varepsilon} + C_i \frac{\varepsilon}{\varepsilon} C_i S = \frac{\partial C_i}{\partial \varepsilon} \frac{\varepsilon}{\varepsilon} + C_i \frac{\varepsilon}{\varepsilon} C_i S = \frac{\partial C_i}{\partial \varepsilon} \frac{\varepsilon}{\varepsilon} + C_i \frac{\varepsilon}{\varepsilon} C_i S = \frac{\partial C_i}{\partial \varepsilon} \frac{\varepsilon}{\varepsilon} + C_i \frac{\varepsilon}{\varepsilon$$

$$C_1 S_{\varepsilon} = \rho C_2 \frac{1}{k + \sqrt{v\varepsilon}} + C_1 \frac{1}{k} C_{3\varepsilon} O_b + S_{\varepsilon} \quad (2)$$

$$C_1 = \max\left[0.43, \frac{\eta}{\eta+5}\right] \tag{3}$$

$$\eta = S \frac{k}{\varepsilon} \tag{4}$$

式中 G_k 是由层流速度梯度而产生的湍流动能; G_b 是 由浮力而产生的湍流动能; Y_M 由于在可压缩湍流中, 过渡地扩散产生的波动; C_2 , $C_{1\epsilon}$ 是常量; σ_k 和 σ_ϵ 是k方 程和 e 方程的湍流 Prandtl 数; S_k 和 S_ϵ 为自定义数值. 对于温度边界条件,晶体和液面部分参考 Kinney 等 人^[5]的工作确定.

3.2 热场的数值模拟

边界应该满足:

在直拉硅单晶生长中,热场的微分方程和边界条件 为^[6,7]

$$\rho c \frac{\partial \varphi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(k_x \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(k_z \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) - \rho Q = 0 \quad (\text{ a } \Gamma \text{ b } \mathbb{R} \text{ L})$$
(5)

$$\varphi = \Phi \quad (\alpha \Gamma_1 \, \partial R \perp) \tag{6}$$

$$k_{x} \frac{\partial \varphi}{\partial x} n_{x} + k_{y} \frac{\partial \varphi}{\partial y} n_{y} + k_{z} \frac{\partial \varphi}{\partial z} n_{z} = q \quad (\text{ab} \ \Gamma_{2} \ \text{RL})$$

$$k_x \frac{\partial \phi}{\partial x} n_x + k_y \frac{\partial \phi}{\partial y} n_y + k_z \frac{\partial \phi}{\partial z} n_z = h(\phi_a - \phi)$$

(在 Γ₃ 边界上) (8)

$$\Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma_3 = 0 \tag{9}$$

其中 Γ 是全部边界; ρ 为材料密度;c为材料比热;Q为物体内部的热源密度;q为 Γ_2 边界上的给定热流量; h为放热系数; k_x , k_y , k_z 分别是材料沿x,y,z方向的 热传导系数; n_x , n_y , n_z 为边界外法线余弦.联立(1)~ (3)式的微分方程,采用加权余量伽辽金(Galerkin)法 对方程组离散化,把单元上的加权余量方程合并起来, 得到总的离散化方程.对硅熔体温度场进行求解.计算 过程中所用材料属性如表 2 所示.

	表 2 材料属性	
Table 2	Material characteris	stic

	Emissive	Conductivity /(W/(m • K))
Silicon ingot	0.55	24
Silicon molten	0.31	67
Quartz crucible	0.50	3.2
Graphic crucible	0.90	41.9
Thermal shield	0.40	105
Solidified graphic felt	0.70	2.5
Cooling cover	0.10	195



图 2 加导流筒前后氩气流速对比

Fig. 2 Comparison of the argon velocity (a) Without the guide shell; (b) With the guide shell

4 结果与讨论

晶体生长对热场的基本要求是^[8]:(1)生长界面附 近的熔体具有一定的过冷度,界面附近以外的熔体必须 高于熔点;(2)在熔体中,径向温度梯度适当地减小,纵 向温度梯度应适当地增大;(3)在生长的晶体中,纵向温 度梯度越大时结晶潜热散发的越迅速,生长速率越高.

从图 2(a)可以看出,直拉炉中的热屏能起到一定 的导流作用,氩气能以较高的速率吹拂硅单晶棒的下 端,但其对晶体上端的吹拂并不明显,不能充分发挥其 对晶体的冷却作用;在引入导流筒后,如图 2(b)所示, 高速的氩气流被限制在硅棒的周围,对硅棒表面的吹拂 作用非常明显.

从图 3(a)可以看出,传统的复合式热屏热系统能 在很大的程度上减弱加热器对晶体和固液界面的辐射, 并能加强氩气流对结晶前沿的吹拂及其携带结晶潜热 的能力.图 3(b)中引入复合式导流系统,使晶体表面和 固液界面受到的辐射进一步减弱,氩气的流动更加接近 结晶前沿,加强了氩气与晶体表面及结晶前沿的热交 换,晶体与熔体间的纵向温度梯度加大,生长界面较为



图 3 热场分布对比

Fig. 3 Comparison of the thermal field (a) Thermal shield;(b) Guide shell; (c) Cooling cover

平坦.图3(c)中在复合式导流系统的基础上将简单的导流筒改进为悬挂式冷却套筒,在保证氩气流动图形的同时保持流过导流筒氩气的温度,降低硅单晶上部的温度,使温度梯度进一步加大,生长界面趋于平坦,有利于结晶潜热的散发,降低缺陷^[9]和硅单晶中径向电阻率的均匀性.

以坩埚中熔硅液面为起点,以带冷却功能导流系统 中等温线为基准,在单晶轴线上分别取各个等温面处的 纵坐标和温度值,得到如图4的距离-温度曲线.

图 4 中可以看出,导流系统引入冷却功能后,单晶



图 4 不同导流系统的温度梯度 Fig. 4 Temperature gradient of different guide systems

硅棒中的温度梯度明显增大.这主要有两方面的原因: 一方面,导流筒将氩气在较高的流速下限制在硅棒上端 的表面,氩气对硅单晶棒的冷却作用加强;另一方面,冷 却型导流筒在阻止加热器和热屏对硅棒辐射的同时,还 能有效地吸收硅棒的对外辐射并将热量迅速带出.

5 结论

根据数值计算的结果,发现在导流系统中引入冷却 功能后,氩气流场明显地改善,晶体中温度梯度均匀性 增大,固液界面形状趋于平坦,有利于结晶潜热的散发, 晶体拉速的提高和单晶径向电阻率均匀性的改善.

参考文献

- [1] Wen Bo, Zhou Jianjun, Jiang Ruolian, et al. Theoretical calculation of conversion efficiency of InGaN solar cells. Chinese Journal of Semiconductors, 2007, 28(9):1392(in Chinese)[文博,周建 军,江若琏,等. InGaN 太阳电池转换效率的理论计算.半导体学 报, 2007, 28(9):1392]
- [2] Shi Zhengrong. The status and development of the Si crystal solar cells. The Seventh Chinese PV Conference, Hang Zhou, 2002; 350 (in Chinese) [施正荣. 晶体硅太阳能电池的现状与发展. 中国第七届光伏会议,杭州, 2002; 350]
- [3] Ren Bingyan, Yang Jiankun, Li Yanlin. Study on growing rate in Φ200mm CZ Si growth. Semiconductor Technology, 2007, 32(2): 107 (in Chinese) [任丙彦, 羊建坤, 李彦林. Φ200mm 太阳能用直 拉硅单晶生长速率研究. 半导体技术, 2007, 32(2):107]
- [4] Yu Huiping, Sui Yunkang, Zhang Fengyi, et al. Numerical simulation of oxygen transportation in 300mm diameter CZ Si crystal growth under cusp magnetic field. Chinese Journal of Semiconductors, 2005, 26(3):518 (in Chinese) [字慧平,隋允康,张峰翊, 等. 勾形磁场下直径 300mm CZ Si 熔体中氧浓度分布的数值模 拟.半导体学报, 2005, 26(3):518]
- [5] Kinney T A, Bornside D E, Brown R A. Quantitative assessment of an integrated hydrodynamic thermal capillary model for large-diameter Czochralski growth of silicon: comparison of predicted temperature field with experiment.J Cryst Growth, 1993, 126:413
- [6] Li Renxian. Base of finite element method. Beijing: Defence Industry Press,2002:113 (in Chinese)[李人宪.有限元法基础.北 京:国防工业出版社,2002:113]
- [7] Liu Yongcai, Ruan Yongfeng. Study of morphology in crystal growth using finite element method. Journal of Tianjin University,2000,33(2):12(in Chinese)[刘永才,阮永丰.有限元法用于晶 体生长形态的研究.天津大学学报,2000,33(2):12]
- [8] Que Duanlin, Chen Xiuzhi. Si material science and technology. Hangzhou: Zhejiang University Press, 2000; 208(in Chinese)[阙

端麟,陈修治.硅材料科学与技术.杭州:浙江大学出版社,2000: 208]

[9] Zhang Haibin, Shen Dingzhong, Ren Guohao, et al. Research progress on the numerical simulation of transport process in vertical bridgman crystal growth.Journal of Inorganic Materials,2002,17 (5):910(in Chinese)[张海斌,沈定中,任国浩,等.坩埚下降法晶体生长中输运过程的数值模拟的研究进展.无机材料学报,2002, 17(5):910]

A Guide System in *\$*200mm CZ-Si Growth*

Ren Bingyan, Chu Shijun[†], Wu Xin, Yu Jianxiu, and Sun Xiuju

(School of Material Science and Engineering, Hebei University of Technology, Tianjin 300130, China)

Abstract: By modifying the guide system, with the help of the numerical simulation, the argon flow field and the total thermal field are obtained. We find that using the guide shell and the cooling cover improves the argon flow field, the solid-liquid interface, and the temperature gradient. It is good for the emanatory of crystallization latent heat and the improvement of the radical resistivity in the crystal. It also clarifies the mechanism of the improvement of the temperature gradient and the crystallization latent heat emanation velocity by improving the guide system.

Key words: numerical simulation; CZ-Si; crystallization latent heat; guide shell EEACC: 0510 Article ID: 0253-4177(2008)09-1790-04

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 60576002)

[†] Corresponding author. Email; jackeychucn@163.com Received 14 March 2008, revised manuscript received 2 June 2008