

# FEMAG 定向凝固法多晶硅生长数值模拟方案

## 目录

1. 背景介绍 .....	1
1.1 多晶硅与太阳能电池 .....	1
1.2 多晶硅的定向凝固法制备 .....	1
2. 问题及需求 .....	2
2.1 定向凝固法制备多晶硅的现状 .....	2
2.2 定向凝固法制备多晶硅的模拟需求 .....	2
3. FEMAG 解决方案 .....	2
3.1 FEMAG/DS 的技术案例 .....	2
4. 关于 FEMAG .....	8
5. 关于中仿科技（CnTech）公司 .....	8

## 1. 背景介绍

### 1.1 多晶硅与太阳能电池

众所周知，硅是一种良好的半导体材料，多晶硅是硅单质的一种多晶体形态，它与单晶硅的区别在于多晶硅是由很多取向不一致的小晶体组成，不像单晶硅那样是一个整体，晶面取向一致。

多晶硅在工业上主要用于半导体产业，是目前市场上最主要的光伏材料，在太阳能电池的制备中得到广泛应用。多晶硅用于太阳能电池主要是得益于其本身良好的半导体特性以及光伏特性，此外低廉的生产成本以及较高的能量转化效率使得其应用发展很快。实际上，超过 90% 的太阳能电池材料都是晶体硅。根据欧洲 Joint Research Centre 的预测，2030 年太阳能发电将占世界电力供应的 10% 以上，2050 年将占 20%，21 世纪末将起主导作用。可见多晶硅将会在未来几十年内的光伏产业中发挥巨大的作用。

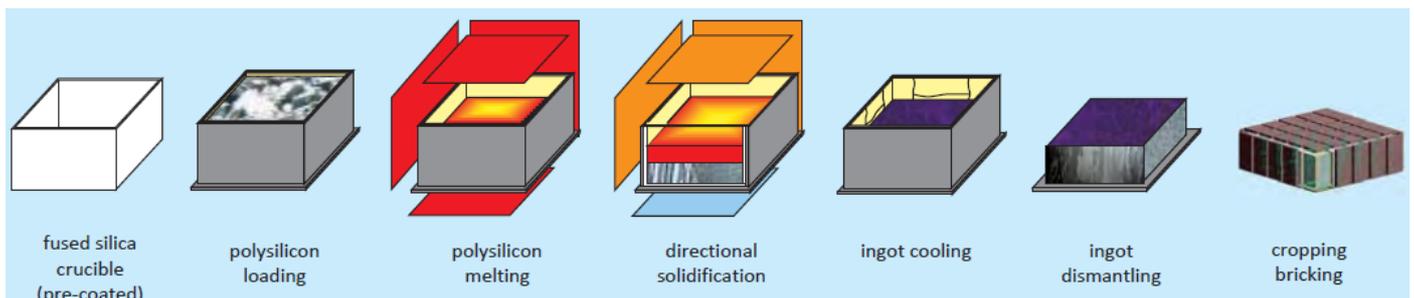


### 1.2 多晶硅的定向凝固法制备

定向凝固技术是一种先进成熟的材料生长技术，在工业和高技术领域以及科研领域都很广泛的应用。

定向凝固技术可以用来生产制备磁性材料、航空发动机叶片以及各种人工晶体等。多晶硅的定向凝固法制备在工业上的应用很成熟，可以说是定向凝固技术的典型应用之一。

定向凝固法制备多晶硅所需的原料来源广，纯度要求较低，获得的硅晶体具有结晶取向一致、晶粒度均匀等特点，而且定向凝固法的生产效率高，生产成本也较低，具有较好的经济效益，因此应用在大规模生产上比较有优势。此外用定向凝固法制备的多晶硅大多为方片，比传统提拉法单晶硅天然形成的圆片在组件中有更好的面积利用效率，因此近年来定向凝固技术在多晶硅的生产上应用越来越广泛。



## 2. 问题及需求

### 2.1 定向凝固法制备多晶硅的现状

对于太阳能电池等光伏产品而言，转化效率是备受瞩目的一个性能参数。影响多晶硅在太阳能电池中光电转换效率的因素主要有两个方面：一方面是硅晶体的纯度，即使材料中只含有少量的杂质，也会对电池的光电性能有很大的影响；另一方面是材料中的各种缺陷，例如多晶硅中的晶界、位错与杂质聚集而成的载流子复合中心，会大大降低多晶电池的效率。

应用定向凝固法生产多晶硅，是通过控制炉体内硅熔体的温度场，形成特定方向的温度梯度从而使熔体沿着与热流相反的方向定向凝固，并获得具有特定取向柱状晶的技术过程。为了保证结晶过程平稳，降低晶体中结构缺陷和杂质，就要求前方熔体中尽可能不含游离晶核，此外还要求温度梯度大小保持在适合的范围，温度梯度方向不出现波动等，因此对设备和温度场的控制要求都比较高，总之，在实际生产中使用定向凝固法，可能会遇到的困难主要有以下两大方面：

- (1) 熔体温度场的设计和控制要求高，但是实际测量和控制手段有限，不容易实现精确控制；
- (2) 太阳能级多晶硅对缺陷和杂质的要求苛刻，成品率不高，实际生产前需要对炉体进行大量优化，此外还需要对所生产的产品质量进行综合预测分析。

### 2.2 定向凝固法制备多晶硅的模拟需求

由于决定多晶硅光电转化效率的因素例如晶粒尺寸、晶体缺陷、内应力及杂质分布等，都与定向凝固工艺密切相关，特别是与炉体中的温度场，流场等密切相关。因此，为了提高多晶硅的质量，必须对定向凝固的工艺过程加以分析和优化，这主要是对定向凝固炉体热场，熔体流场的多物理场的分析与优化。

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这一类实际问题的一种重要手段。运用数值模拟技术对多晶硅定向凝固技术所涉及的多物理场进行分析和研究，成为目前国内外广泛采用的分析手段，且有很多成功的案例。

应用数值模拟仿真技术不仅能综合分析多晶硅缺陷与温度场，流场的关系，还能分析多晶硅定向凝固工艺中，热导率、加热功率、氩气流动状态、外加磁场及定向凝固系统结构等对温度场的影响，可为缩减能耗，优化生产提供重要的参考信息。

## 3. FEMAG 解决方案

FEMAG/DS 是 FEMAG 软件专门为定向凝固技术开发的专用软件，该软件致力于为定向凝固晶体生长技术提供专业的仿真模拟与数据分析服务，可以实现的模拟参数包括热场，流场，应力，缺陷分布等，还可以用于分析炉体结构，热功率，气流状态等，实现工艺的优化设计。

### 3.1 FEMAG/DS 的技术案例

#### 3.1.1 网格划分策略

FEMAG/DS 软件支持对晶体生长炉全局的非结构网格自动生成，此外还针对了磁场作用下磁流体边界层效应，FEMAG 特别提供了 BLM 网格划分等多种先进的网格划分策略，能够很好的适应特定的复杂的结构和物理情景。

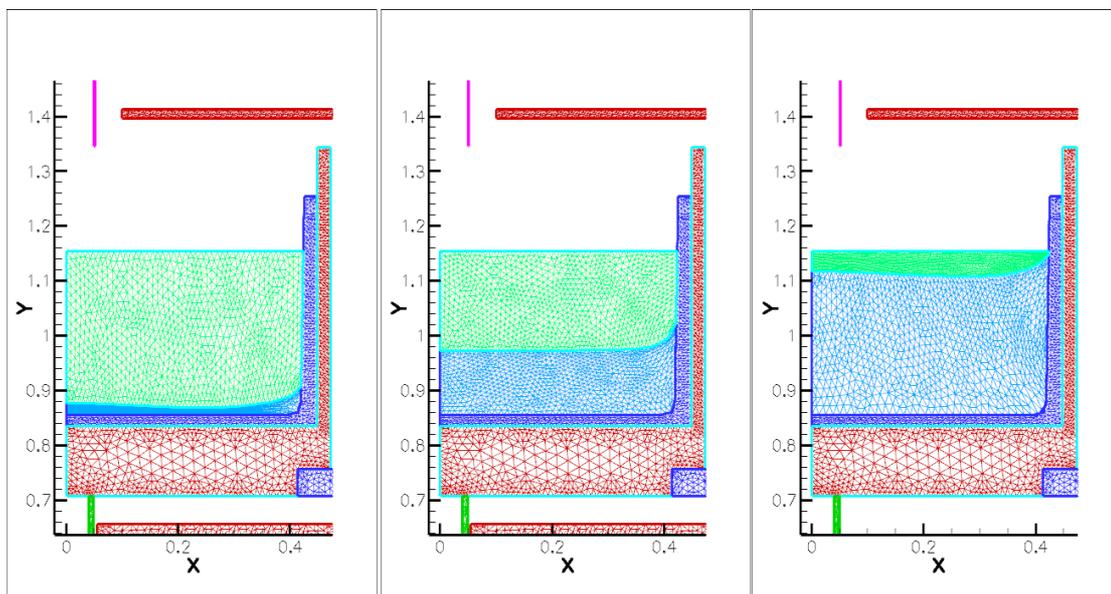


图 3.1 不同生长阶段的网格划分

### 3.1.2 温度场

FEMAG/DS 软件支持热传导模型的高级算法，除了可以计算传统的传热条件外，还能够在计算中考虑辐射传热，提高炉体温度场模拟的精度。图 3.2 是用 2D 模拟多晶硅定向凝固时全局热场的案例，由图可以看到在多晶硅生长的五个不同阶段的分布情况，模拟考虑了炉体所有组件的边界条件和辐射传热，精确度高。

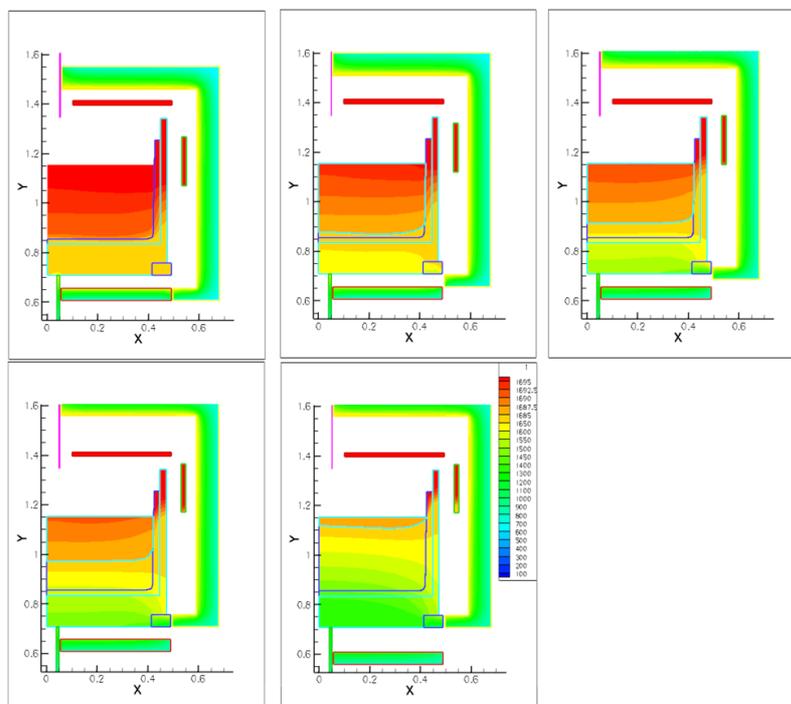


图 3.2 多晶硅定向凝固五个生长阶段和对应的全局温度场模拟

图 3.3 是用 FEMAG 对多晶硅定向凝固进行三维模拟的温度场分布以及对应的等温面示意图。

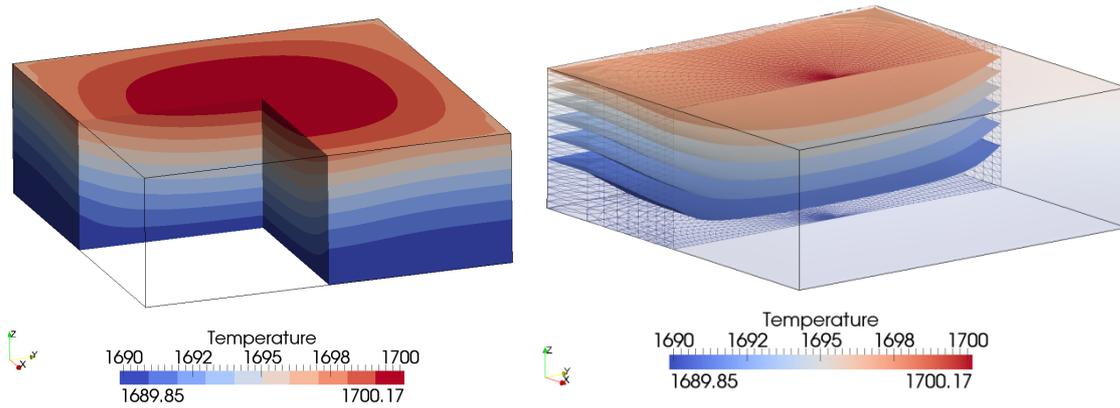


图 3.3 多晶硅温度场和等温面的三维模拟

### 3.1.3 气体流动模拟

FEMAG/DS 包含气体的流动模型，可以分析气体流动速率对熔体自由表面以及生长炉温度场的影响，下图案例显示了在不同的气流速率环境下，多晶硅以及炉体中温度场的分布情况。左图气流速率为  $5 \times 10^{-4} \text{ (m}^3/\text{s)}$  ,右图速率为  $2 \times 10^{-3} \text{ (m}^3/\text{s)}$ 。

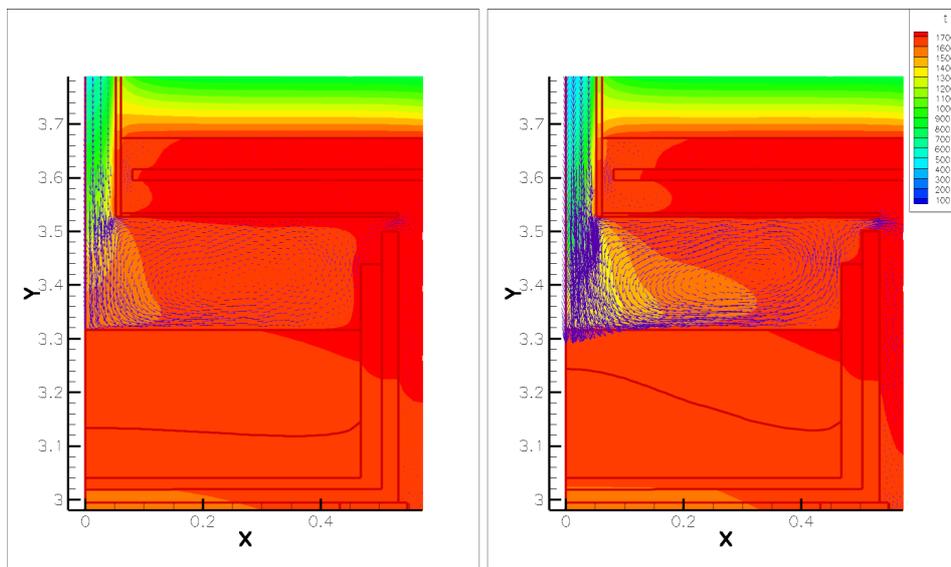
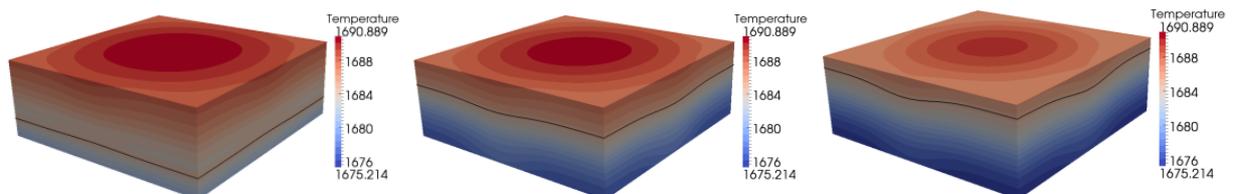


图 3.4 不同气流速率下温度场分布情况

### 3.1.4 熔体流场热场耦合分析

FEMAG/DS 可以实现定向凝固过程中熔体复杂流场和热场的耦合分析，包括由温度梯度和表面张力引起的 Marangoni 效应，以及对流对温度场的影响等等。

下图是对定向凝固过程的三维模拟，图中显示了温度梯度变化以及熔体流动的变化。



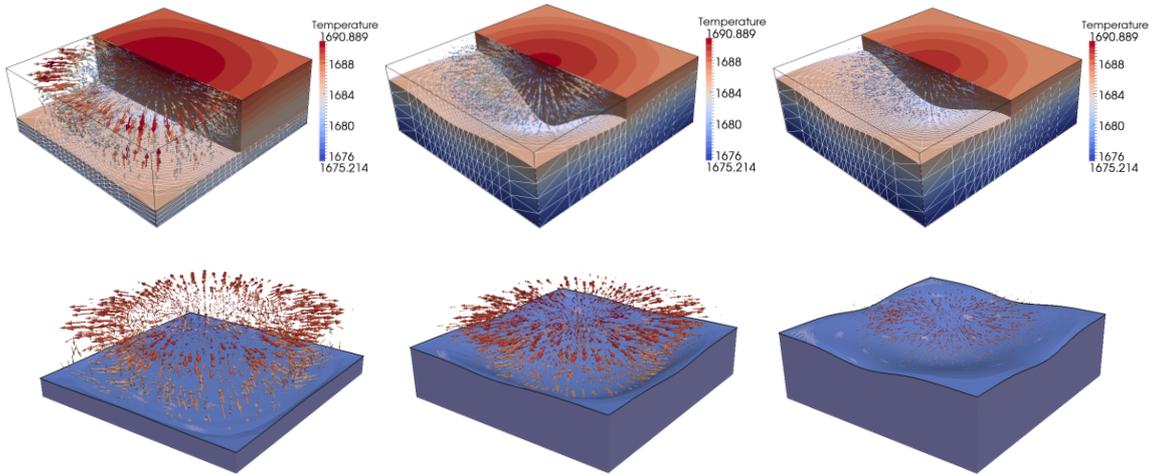


图 3.5 温度场以及熔体流动模拟图

在定向凝固工艺中，因为熔体的流动不剧烈，因此 Marangoni 效应比较显著。图 3.6 案例是对 Marangoni 效应的分析，(a) 图是没有 Marangoni 效应对应的温度场和流场分布情况，(b) 图是存在 Marangoni 效应的情况下对应的温度场和流场，可以到熔体内由于横向温度梯度和表面张力的影响产生的 Marangoni 效应对熔体流动影响也是很大的。图 3.7 图 3.8 用 3D 模拟来展示了强 Marangoni 效应下的熔体流动情况以及对应的温度梯度。

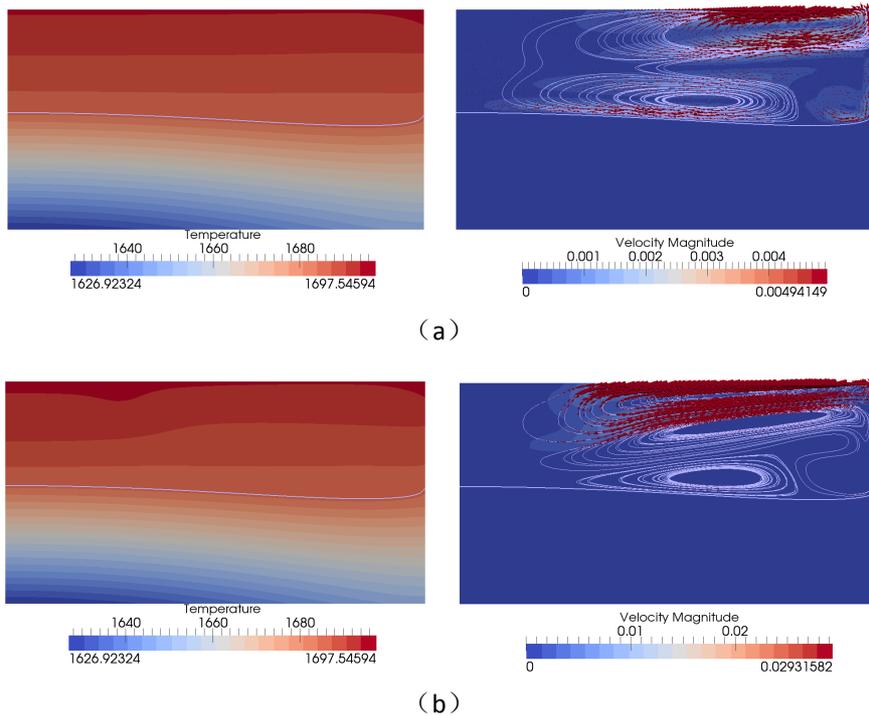


图 3.6 (a) 无 Marangoni 效应时流场和温度场，(b) 有 Marangoni 效应时流场和温度场

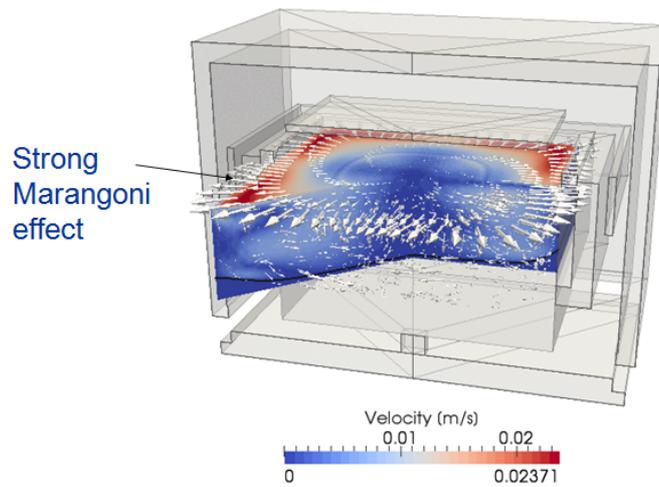


图 3.73D 模拟强 Marangoni 效应下的熔体流动

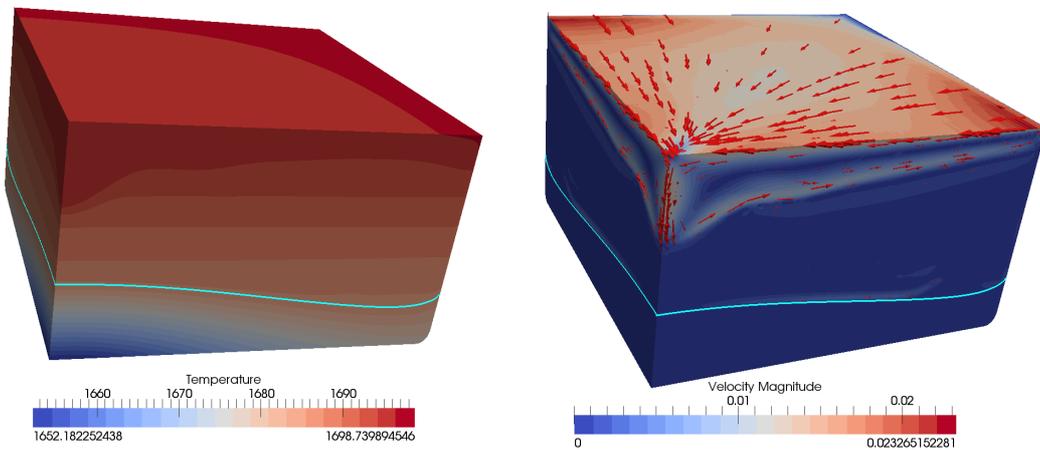
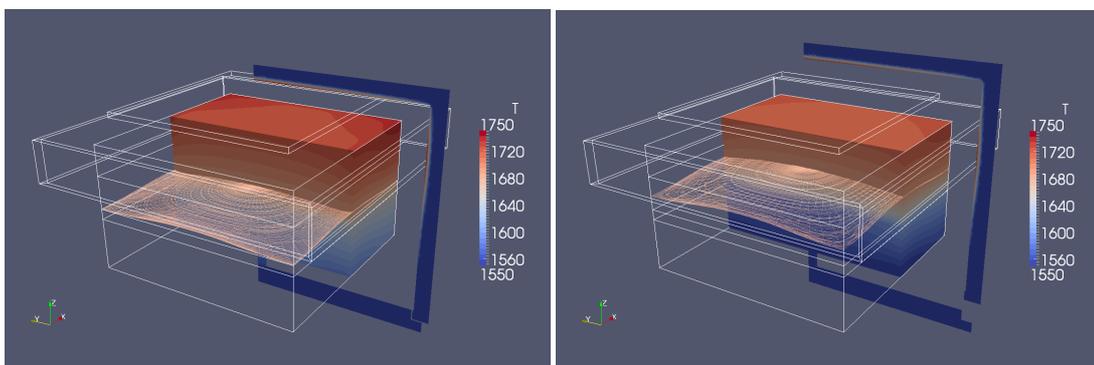
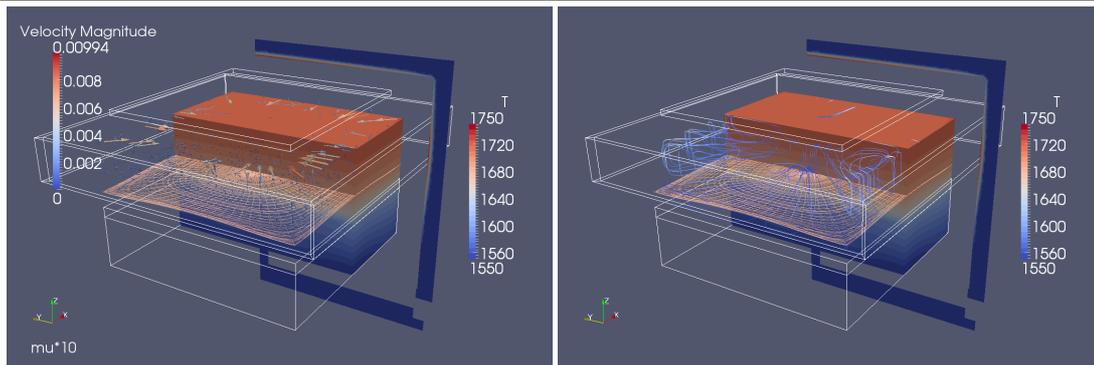


图 3.8 熔体温度梯度以及对应的熔体 Marangoni 效应流动图

对定向凝固过程，熔体的凝固界面主要受到炉体温度场的影响，同时也受到熔体对流的影响，下面案例是对太阳能级多晶硅定向凝固的热流和熔流的全局耦合分析，以及熔体流动对温度场和凝固界面的影响。



(a)



(b)

图 3.9 温度场和流场耦合分析对凝固结果的影响

(a) 图是只分析热场对凝固的影响，(b) 图同时耦合分析了热场和对流的影响，可以看到在引入对流的耦合分析后，等温凝固界面比只分析热场时的凝固界面更平直。

### 3.1.5 杂质缺陷分布动态模拟

FEMAG/DS 可以动态地模拟分析晶体和熔体中氧碳等杂质的分布，下图案例是对多晶硅晶体和熔体中氧和碳的分布情况的三维模型分析。

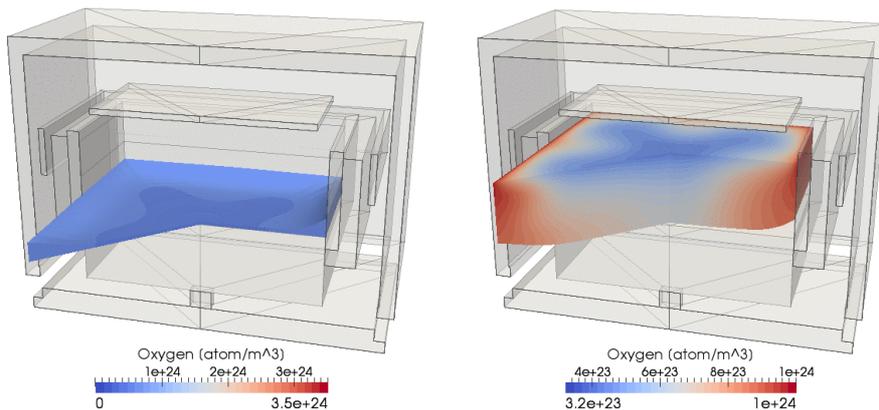


图 3.10 熔体和晶体中氧浓度分布

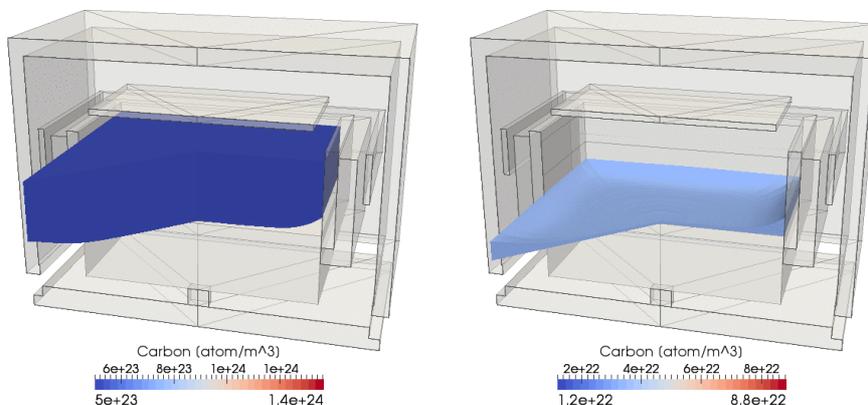


图 3.11 熔体和晶体中碳浓度分布

## 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](mailto: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

