

初稿或修改稿

基于数值模拟的太阳能直拉硅单晶热场降耗研究

邓先亮, 吴亮, 邓康, 任忠鸣

(上海大学材料科学与工程学院, 上海 200072)

摘要: 通过计算机数值模拟仿真技术分析了 TDR-95A-ZJS 型 22 英寸太阳能直拉硅单晶热场结构中影响能耗的主要因素。基于模拟结果提出了通过改变部分热场结构及保温毡布局等优化措施可有效降低原有热场功耗。实际生产实验表明, 优化后的热场在保证晶体生长原有质量前提下较原有热场节能 29%。

关键词: 数值模拟; 直拉硅单晶; 热场; 功耗;

中图分类号: TG?? 文献标识码: A 文章编号: 1002-185X(2011)0?-0??-0?

1 引言

本世纪以来随着半导体和光伏产业的飞速发展, 对单晶硅片的需求量日益增加。目前直拉法 (Czochralski 法) 是生产单晶硅常用的方法之一, 其显著优势是可生产出高质量、大直径的半导体级或太阳能级单晶硅片, 主要用来制作 LSI、晶体管、传感器等半导体器件及硅基高效太阳能电池^[1]。

硅单晶炉的热场主要由导流筒、各种石墨件、加热器及保温材料等成套部件构成^[2]。直拉硅单晶的生长过程中首先要将多晶硅原料装于石英坩锅内并在 1420℃ 以上的温度下熔融, 温度稳定到目标温度后将确定晶向的单晶硅籽晶与熔体熔接后引晶, 再经过过放肩、转肩、等径、收尾、冷却等工序完成单晶硅的生长过程^[3]。图 1 是当前太阳能级直拉单晶硅生产成本结构, 包括电力成本和其他辅料、人工等成本部分, 其中电力成本占最大比例 (28.3%)。因此, 降低单晶生长过程的功耗对于进一步降低硅片制造成本、实现太阳能平价上网具有重要意义。

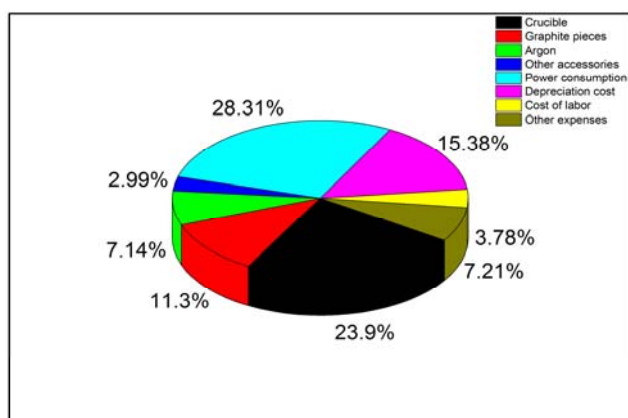


图 1 太阳能单晶硅生产成本分析图

Fig.1 Photovoltaic single silicon crystal production cost structure
由于直拉单晶长晶实验周期长、成本高, 本文将主要

利用计算机数值模拟仿真技术开展一系列模拟计算, 逐步优化其热场结构以实现长晶功耗的降低, 并根据最终模拟仿真优化结果开展热场改造及实验, 实现降低直拉单晶热场功耗目的。

2 模型

2.1 数学模型

本文模拟软件采用比利时鲁汶天主教大学开发的晶体生长专业软件 FEMAG-CZ。该软件以实际炉体结构及晶体生长工艺参数为依据, 采用有限元法对晶体生长过程中的传热和传质过程进行全局性数值模拟, 可以精确预测整个生长炉内的全局温度分布^[4]、固液界面的形状、熔体/气流的流动, 并能对晶体生长过程的各种杂质及掺杂元素、晶体生长过程的热应力、晶体生长点缺陷等进行计算与分析^[5]。其采用的基本控制方程如下:

$$\rho c \frac{DT}{Dt} = \nabla(K \nabla T) + W \quad (1)$$

$$\nabla \cdot (\rho u) = 0 \quad (2)$$

$$\rho_0 (u \cdot \nabla) u = -\nabla p + \nabla \cdot ((\mu + \mu_T)(\nabla u + \nabla^T u)) - \rho_0 \beta_T (T - T_0) g + J \times B \quad (3)$$

$$\rho u \cdot \nabla u = -\nabla p + \nabla \cdot \left[(\mu + \mu_A) \left(2d - \frac{2}{3} \nabla \cdot u I \right) \right] + g(\rho - \rho_0) \quad (4)$$

$$T = T_m \quad (5)$$

$$-K_l \nabla T_l \cdot n = -K_s \nabla T_s \cdot n - \rho_s v_g \Delta H \quad (6)$$

其中, T 为温度场、 ρ 为介质密度、 C 为介质的比热、 K 为介质的导热系数、 W 为单位体积提供的热源, u 和 B 分别代表速度场和外加磁场, P 、 μ 、 β_T 、 g 、 J 、 I 分别代表压强、动力粘度系数、液流的体积膨胀系数、重力加速度、电流强度和单位张量, d 为平均应变速率张量, T_s 是晶体溶化温度, K_l 为熔体的导热率; K_s 为晶体的导热率

收到初稿日期: 2011-03-31; 收到修改稿日期: 2011-09-01

作者简介: 邓先亮, 男, 1990 年生, 硕士生, 上海大学材料科学与工程学院, 上海 200072, 电话: 021-56331694, E-mail: dxl1314@shu.edu.cn

是液相的外法向单元, V_g 是晶体的生长速度, ΔH 是单位质量晶体的凝固潜热。(1)~(6)分别为能量控制方程、连续性方程、流体动量控制方程、气体动量控制方程、固液界面控制方程。

本文所优化的 TDR-95A-ZJS 型 22 英寸太阳能直拉单晶原始热场结构如图 2 所示。

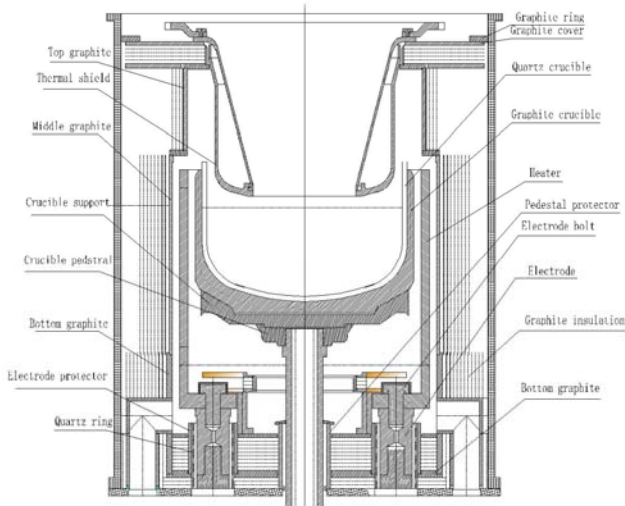


图 2 单晶炉热场结构简图

Fig.2 Schematic structure of hotzone in Czochralski silicon single crystal growth furnace

2.2 模拟工艺参数

下表 1 是模拟过程中采用的基本物性参数表。

表 1 模拟过程所用材料物性参数

Tab1. Physical properties of the main materials used in simulation

Property	Value
Emissivity	0.46(crystal);0.507(melt);0.2(steel) 0.7(graphite);0.2(steel) 0.55(insulator);0.7(quartz)
Thermal conductivity ($W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$)	$75(T/300)^{-0.32} \exp(-5.3 \cdot 10^{-4}(T-300))$ (crystal) 64 (melt);5.82(quartz);15(steel) $0.018+2.5 \cdot 10^{-5}T$ (Ar) $105(T/300)^{-0.3} \exp(-3.5 \cdot 10^{-4}(T-300))$ (graphit)
Thermal expansion coefficient	$5.2 \cdot 10^{-6}$ (crystal)
Specific heat/($J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$)	1084.66(cryatal) 1000 (melt)
Density/($kg \cdot m^{-3}$)	2284.86 (crystal); 24200 (melt)
Melting temperature of silicon/K	1683

晶硅生长条件如表 2 所示, 采用 FEMAG-CZ 准稳态模拟技术, 模拟晶体长度为 250mm、对应等径拉速为 0.9mm/min。

表 2 晶体生长条件

Tab2. Crystal growth conditions

晶体直径	总投料量	晶体总长度	晶体转速
200mm	120kg	1450mm	8rpm/min
坩埚转速	氩气流量	炉内压力	导流罩距液面距离
-10rpm/min	60L/min	20torr	25mm

3 模拟优化过程与分析讨论

本文热场优化基本过程如下: 首先使用 FEMAG-CZ 缺省材料库将模拟计算需求功率结果与实际生产过程进行分析比较, 以便对部分缺省材料库中物性参数进行修正, 使模拟计算热场中物性参数的选择更接近实际生产; 然后, 基于修正的物性参数, 在给定对工艺参数条件下对热场结构或使用材质进行一系列的修改与模拟计算实验, 以便分析每次热场结构的单独改变对功率需求的影响; 最后, 根据模拟计算结果, 综合分析热场结构及布局的改变对加热器功率需求、温度场/流场分布的影响, 确定、计算综合优化后的热场, 并开展热场改造与生产实验, 评估热场改造效果。

3.1 缺省材料库物性参数修正

该热场实际生产过程中加热器功耗基本保持在 72KW~79KW。我们选取多种保温层物性参数开展模拟仿真实验, 以便使模拟结果匹配实际生产过程功率需求。经过多次的模拟实验, 我们选取保温层导热系数 $0.55 W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$, 在该导热系数情况下模拟计算需求功率为 72.90KW, 能比较好的接近实际生产需求功率。后续的模拟结果将在以此基础上进行。

3.2 热场的分析优化

直拉单晶长晶在高温、封闭的低真空度环境下进行。在热场内部, 传热主要通过高温辐射、传导/对流导热等方式实现。通过模拟手段我们对原热场高功耗原因进行了分析。图 3 为模拟所得的热场导热边界热量损失分布图, 通过该图可以发现, 在原有热场中存在多处热量散失较严重。如加热器顶部的石墨保温桶由于直接接受加热器的高温辐射, 温度较高。而石墨材料由于具有优异的导热性能(为石墨保温软毡 100 倍以上), 很大部分加热器辐射热量由于这部分结构设计不合理而损失掉; 同时, 由于上保温层偏薄, 导致热场上部保温层保温效果不理想。模拟计算结果表明, 仅对上保温石墨套结构进行适当修改就可降低加热器功耗约 13%。

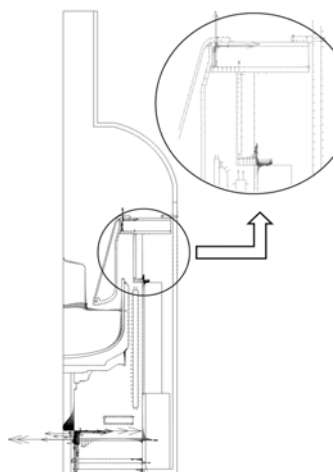


图3 热场边界导热热量损失分布图

Fig3 Conductive heat fluxes along boundary

此外,我们分别单独对应热场中的顶环、下保温盖外环、下保温盖外环、中轴保护套、下保温筒及护盘等进行细微修改及考虑上述的综合修改,如保持原尺寸或结构但使用与石墨筒相近强度但导热系数小得多的石墨硬毡等,得到如图4所示的加热器需求功率图。

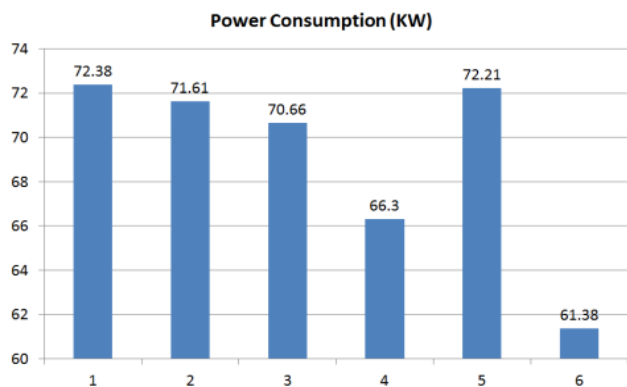


图4 材质或结构改变对功耗降低的影响

Fig.4 The impact of material/structure changes on power consumption

保温层的保温效果对长晶过程中加热器功率需求有非常重要影响。考虑到炉体的总体结构,保温桶外侧最多容纳的碳毡层数为12(每层石墨碳毡厚度10mm),所以我们分别模拟计算了上、中保温筒外侧软碳毡层数逐步增加到12层对热场功耗的影响。图5为上保温桶外侧碳毡层数由3层增加到12层的热场功率需求变化,图6为中保温桶外侧碳毡由8层增加到12层的热场功率需求变化。

从图5可以看出,随着上保温筒保温毡层数的增加,加热器需求功率迅速降低,但增加至8层后加热器功率需求趋势逐步降缓。而原热场中保温筒外侧保温碳毡为8层,加热器功率需求趋势随中保温筒保温毡层数的增加也逐步降低,但远不如上保温毡从3层增加至8层(见图6)。

基于上述分析,考虑到以最低的成本、最小的热场改

动要求及碳毡材料成本等因素,最终采取的热场优化方案为:把顶环、下保温盖外环、下保温盖外环、中轴保护套、下基保温桶及护盘材料替换为石墨硬毡,上保温桶外侧石墨软碳毡层数增加到8层,中保温桶外侧石墨软碳毡层数增加到12层。

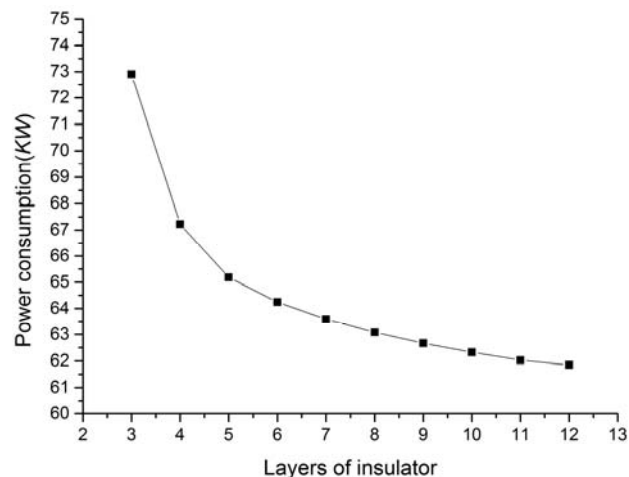


图5 上保温罩外侧碳毡层数和功耗的关系

Fig.5 The relationship between top graphite felt insulator layers and power consumption

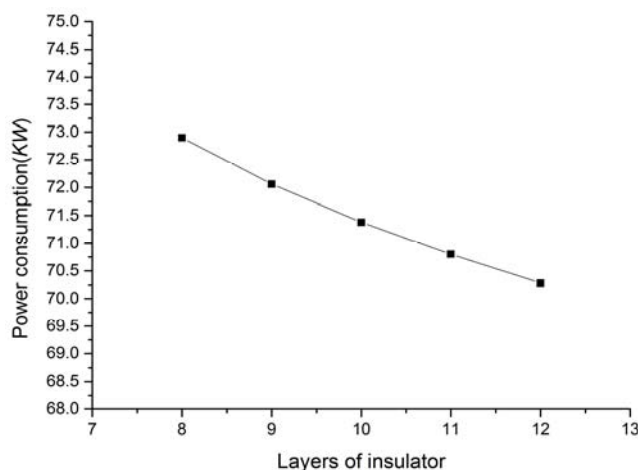


图6 中保温罩外侧碳毡层数和功耗的关系

Fig.6 The relationship between middle graphite felt insulator layers and power consumption

3.3 综合改进后热场与原热场模拟比较

图4、图5及图6分别分析了通过单独修改对应结构或材质对加热器功率需求的影响。我们在综合了上述所有单独修改后,模拟计算最终热场加热器需求功率仅为51.58KW,较原热场加热器需求功率下降29%。

3.3.1 改进前后温度场和流场的对比

图7是原热场(左)与综合优化后新热场(右)温度场比较图。从图7可以看出,改进后热场与原热场温度场分布主要差别在于改进后的热场加热器上高温区明显缩小,上导流筒附近温度稍高且温度梯度更均匀。因此,改

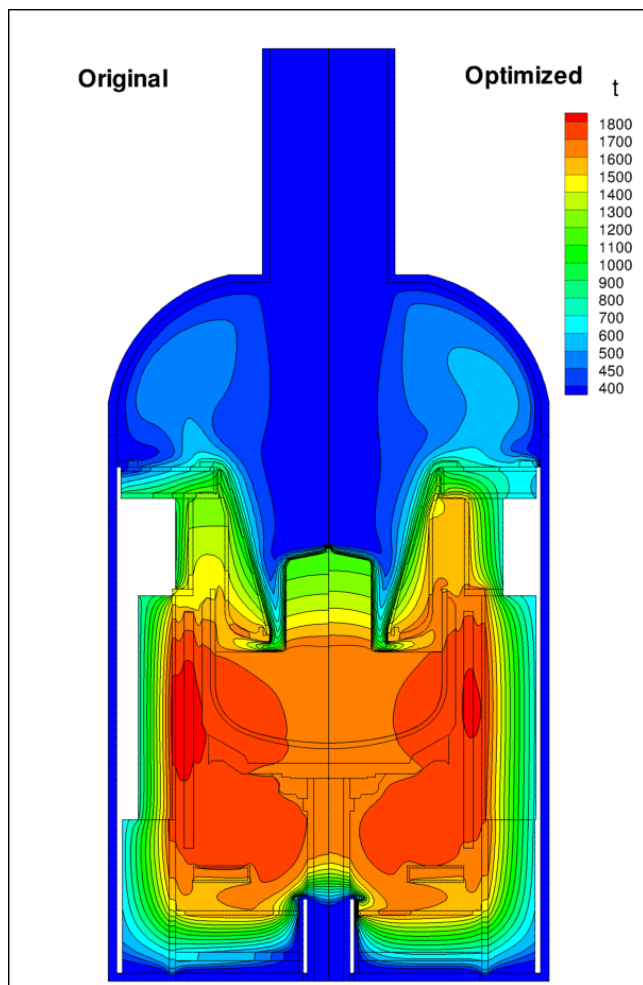


图 7 优化前后温度场对比

Fig7 Comparison of temperature field before and after optimization

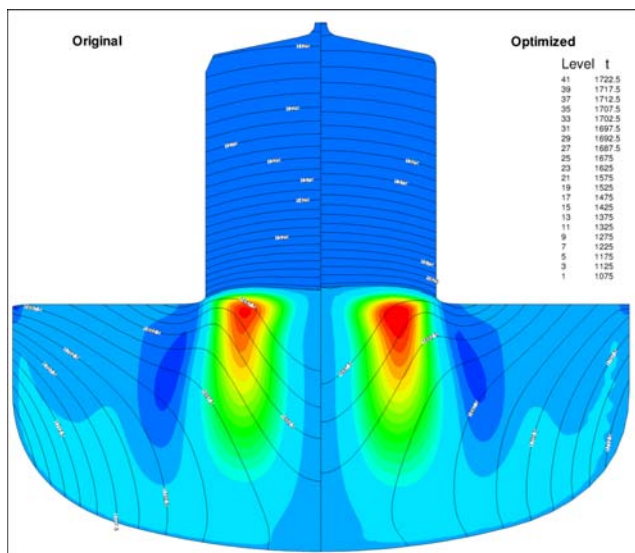


图 8 优化前后流场对比

Fig8 Comparison of flow/temperature field in melt/crystal before and after optimization

进后的热场加热器需求功率显著下降,上导流筒附近保温

效果也得到加强,这些都有利于提高加热器及石墨热场寿命。

3.3.2 固液界面对比

图 8 为热场改进前后晶体及熔体内温度场及流场分布。通过比较图可以看出,热场改进后的熔体内温差较小,温度梯度变化更平缓。尽管熔体流动无显著变化,但改进后的晶体生长固液界面更加平坦(见图 8、图 9),有利于降低晶体内的热应力和获得更均匀的掺杂分布,进而获得低应力及径向电阻率均匀的晶体。

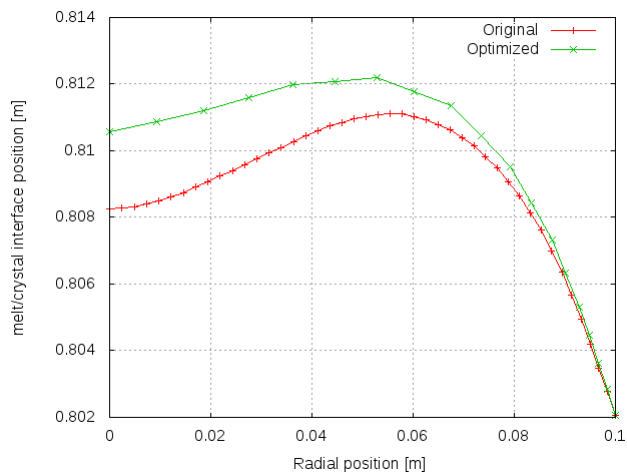


图 9 优化前后固液界面位置

Fig9 Melt/crystal interface shape before and after optimization

3.3.3 生长速率

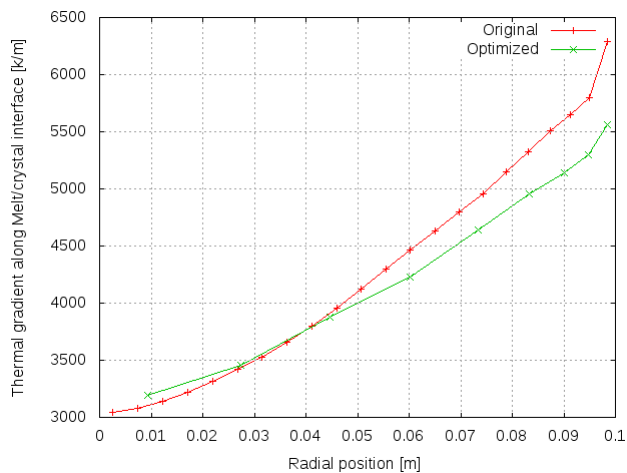


图 10 优化前后固液界面温度梯度分布

Fig10 Temperature gradient around melt/crystal interface before and after optimization

图 10 为热场改进前后晶体生长固液界面轴向温度梯度分布。晶体生长速度与其固液生长界面温度梯度正相关,而从图 10 可以看出,热场修改前后晶体生长固液界面处温度梯度基本保持不变,预期改进后晶体的结晶速率基本保持不变。

3.3.4 石英坩埚内壁温度

图 11 为热场改进前后石英坩埚内壁温度变化曲线。从图 11 可以看出,改进后的热场坩埚内壁温度较改进前平均下降约 5℃。这一方面即有利于避免坩埚高温软化变形的风险,同时也有利于降低坩埚中氧的扩散及氧在熔体中的饱和溶解度^[7]。

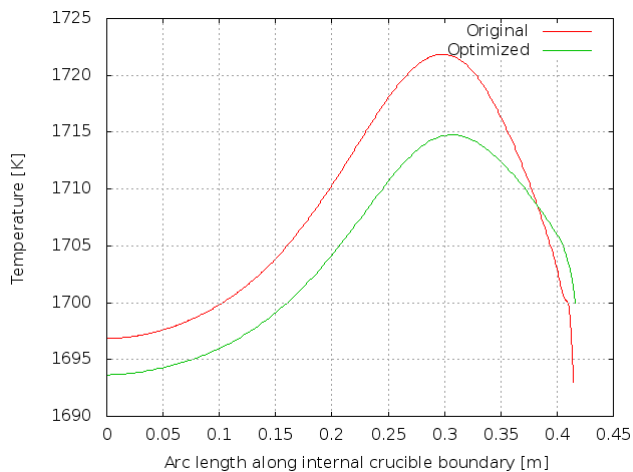


图 11 优化前后坩埚内壁分布

Fig11 Temperature profiles along inner wall of quartz crucible before and after optimization

3.4 综合改进热场实验验证

为了验证模拟结果的可靠性,我们在河南协鑫光伏材料有限公司对 TDR-95A-ZJS 型 22 英寸太阳能直拉单晶热场进行了上述改造及实验验证。改进后的热场在晶体生长长度为 250mm 时实际加热器功耗仅为 48.56KW, 相比数值模拟预测结果低 3.02KW。这个误差可能与模拟计算中对保温碳毡使用了常导热系数有关。

4 结论

基于 FEMAG-CZ 软件对 TDR-95A-ZJS 型 22 英寸太阳能直拉硅单晶热场进行了大规模模拟计算分析、优化与改造,并和实际生产进行了比较验证。改进优化后的热场在满足晶体生长条件的基础上较原有热场降耗 29%。

致谢 本文作者感谢上海高校特聘教授(东方学者)岗位计划资助

参考文献 References

- [1] Tao M. Manufacturing of Wafer-Si Solar Cells and Modules[M]. Terawatt Solar Photovoltaics. Springer London, 2014: 47-60.
- [2] Huang L Y, Lee P C, Hsieh C K, et al. On the hot-zone design of Czochralski silicon growth for photovoltaic applications[J]. Journal of crystal growth, 2004, 261(4): 433-443.
- [3] Derby J J, Brown R A. Numerical simulation technology of crystal growth[J]. Journal of Crystal Growth, 1989, 97: 152.
- [4] Dupret F, Nicodeme P, Ryckmans Y, et al. Global modelling of heat transfer in crystal growth furnaces[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 1990, 33(9): 1849-1871.
- [5] Wu L. Numerical simulation of Czochralski bulk crystal growth process: investigation of transport effects in melt and gas phases[D]. UCL, 2008.
- [6] Users manual FEMAG[J]. FEMAGSoft S.A. Louvain-la-Neuve, Belgium, www.femagsoft.com, 2008.
- [7] Hirata H, Hoshikawa K. Oxygen solubility and its temperature dependence in a silicon melt in equilibrium with solid silica[J]. Journal of crystal growth, 1990, 106(4): 657-664.

The Study of Power Consumption on Czochralski Silicon Single Crystal Growth Process for Photovoltaic through Numerical Simulations

Deng Xianliang, Ren Zhongming, Deng Kang, Wu Liang

(Department of Material Science and Engineering, Shanghai University, Shanghai 200072, China)

Abstract: Factors influencing the heater power consumption on 22inch hotzone in TDR-95A-ZJS Czochralski crystal growth furnace for photovoltaic application are analyzed by means of numerical modeling and simulations. Based on numerical simulation results, hotzone optimization through structure and graphite insulator layout modifications targeted for heater power reduction is proposed. Physical crystal growth experiments show that the heater power consumption is reduced by 29% after hotzone optimization while the crystal quality remains very similar to the ones obtained by original hotzone.

Keywords: Numerical simulation; Silicon single crystal; Power consumption; Hotzone; Czochralski

Corresponding author: Wu Liang, Ph. D., Professor, Department of Material Science and Engineering, Shanghai University, Shanghai 200072, China, Tel: 0086-21-56331694, E-mail: lwu@shu.edu.cn