

中科院国家微重力重点实验室，2015年1月7日，北京

晶硅生长过程中的熔体流动及其磁场调控

刘立军

西安交通大学 能源与动力工程学院

<http://cgsolar.xjtu.edu.cn>, Email: ljliu@mail.xjtu.edu.cn

报告内容：

- 研究组简介
- 研究背景 - 硅熔体流动及其磁场控制
- 单晶硅生长过程中熔体流动的磁场调控
- 多晶硅铸锭过程中熔体流动的磁场调控



研究组简介——研究团队



教授1名
副教授1名
讲师1名

在读博士10名
在读硕士16名
留学生3名



研究组简介——研究基础与条件

□ 计算条件

- 500核浪潮高性能计算工作站
- 自主开发的晶体生长模拟程序
- 商业通用流动传热分析软件

□ 实验条件

- 太阳能晶硅制备与加工综合实验平台

□ 学科交叉团队

- 汇集有工程热物理、材料、应用化学和应用光学等学科背景的成员

□ 校企合作

- 与硅材料国家重点实验室（浙大）、太阳能光伏材料与技术国家重点实验室（英利）有合作关系
- 与英利、晶澳、南玻、协鑫、有能、中石油等新能源领域世界知名企业开展紧密合作



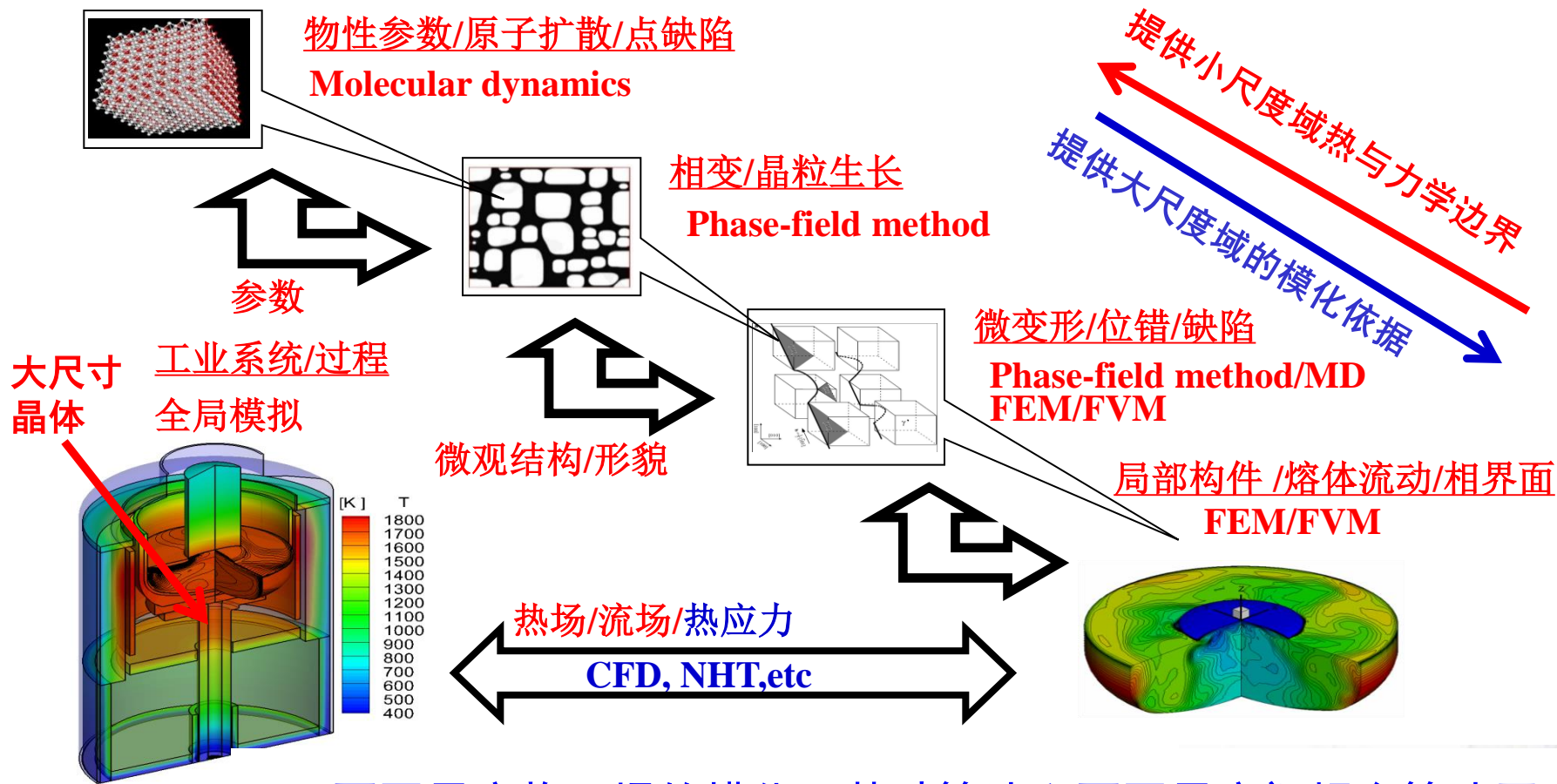
太阳能晶硅制备与加工试验平台



浪潮计算工作站群

研究组简介——研究方向 (1)

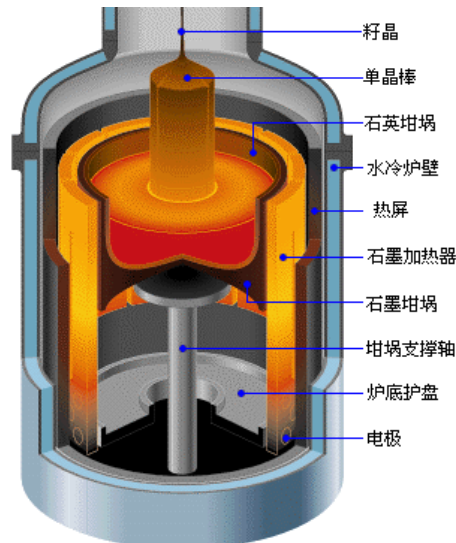
- 多尺度多物理场晶体生长热动力学系统的模化理论与模拟体系



- 不同尺度物理场的模化、基础算法和不同尺度间耦合算法开发。
- 多尺度多物理场之间的耦合作用机理。

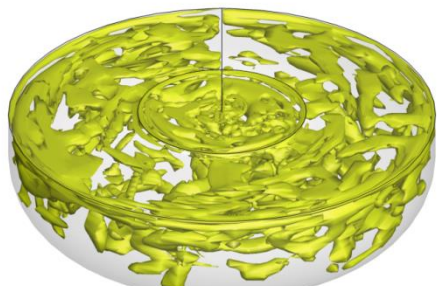
研究组简介——研究方向 (2.1)

● PV/ULSI用高效低成本晶硅材料制备过程中的科学问题与关键技术



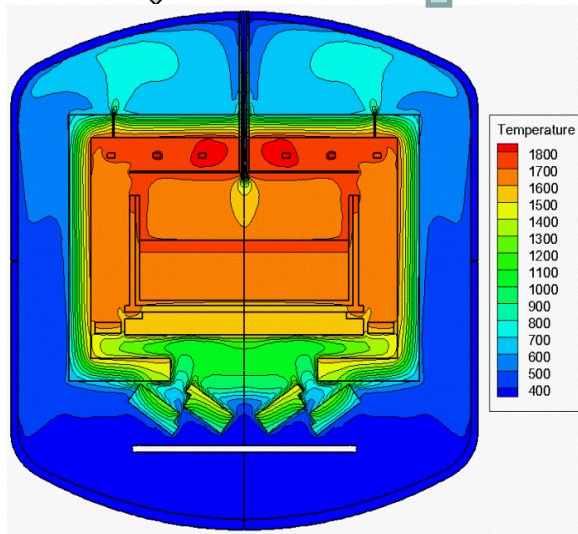
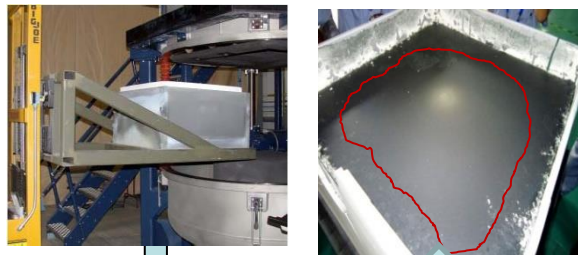
<http://www.caesar.de/241.html>

单晶炉热场



高温熔体湍流涡系结构(LES)

准单晶/多晶硅铸锭



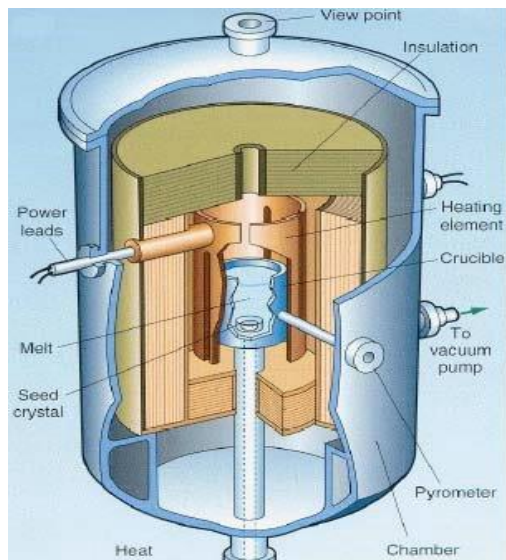
加热/化料/晶体生长/退火/冷却

- 多尺度多物理场耦合作用机理：
多相，多组分，多物理场，多传热方式，多热化学反应流动 ...
- 熔体流动/热场/相变界面控制
- 杂质输运与控制
- 系统节能
- 热应力/缺陷控制
- 热场/工艺优化
- 成核/晶粒生长原理与晶界控制
- 复杂系统的建模和基础算法开发

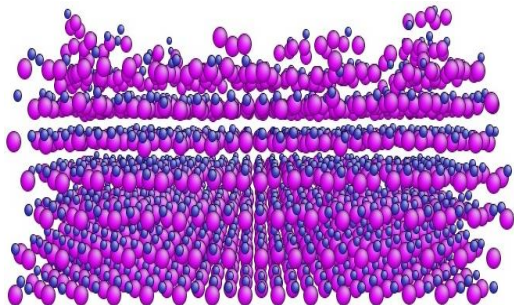


研究组简介——研究方向 (2.2)

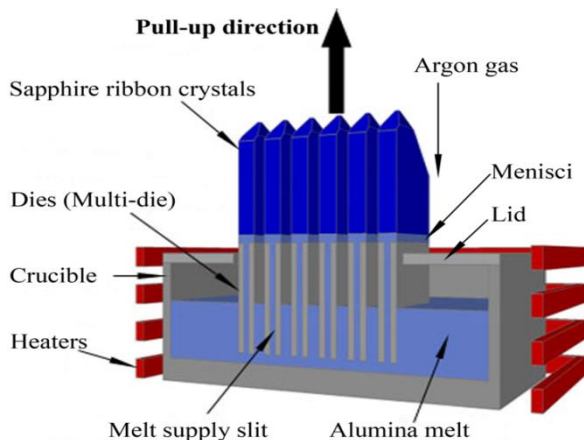
高效低成本LED用晶体生长过程中的科学问题与关键技术(蓝宝石、氮化镓等)



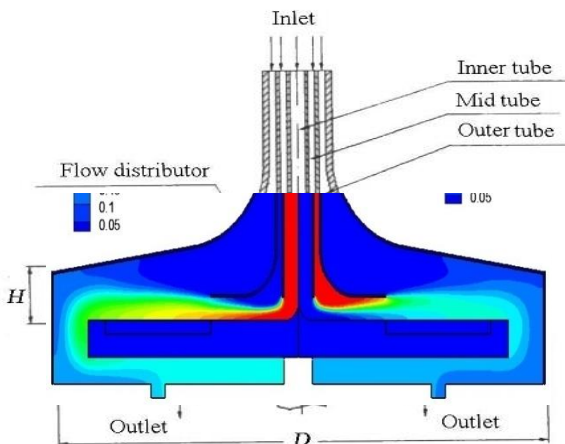
热交换法/泡生法
制备蓝宝石晶体



GaN薄膜表面微观形貌



多模具导模法制备蓝宝石带晶

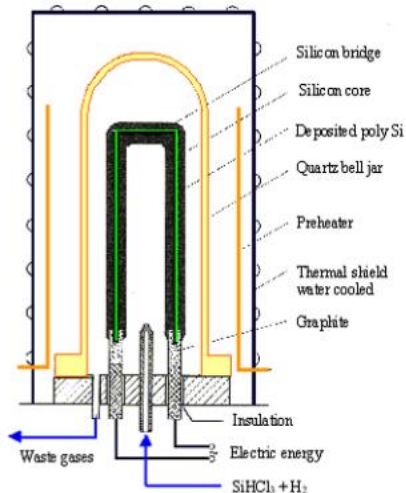


MOCVD制备GaN外延片
(NH₃与H₂组分浓度分布)

- 多尺度多物理场耦合作用机理
- 熔体流动/热场/相变界面控制
- 杂质/组分输运与控制
- 系统节能
- 热应力/缺陷控制
- 热场/工艺优化
- 复杂系统建模和基础算法开发
- 不同介质中和不同表面条件下的辐射问题：气/液/固，透明/半透明，镜面/灰体 ...
- 热化学反应途径、流动输运与表面反应机理
- 纳米颗粒的形核与输运机理

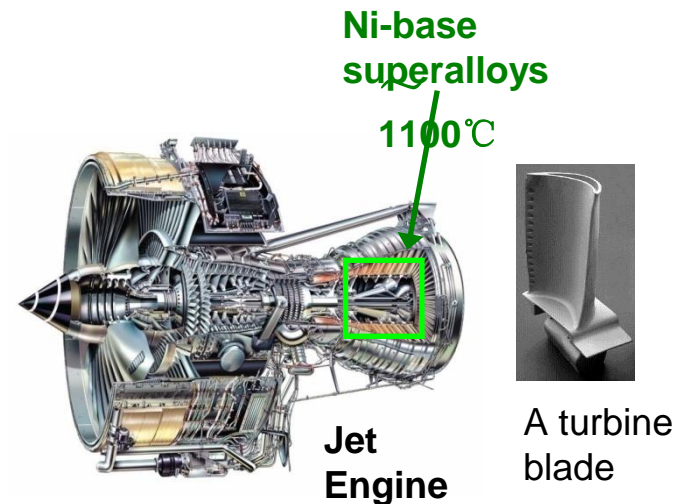
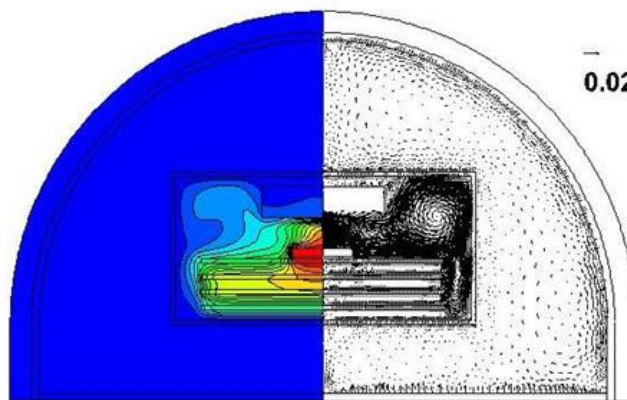
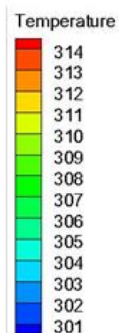
研究组简介——研究方向 (3.1)

- 复杂过程和系统的热管理和优化



多晶硅提纯CVD反应器

飞行器热环境模拟

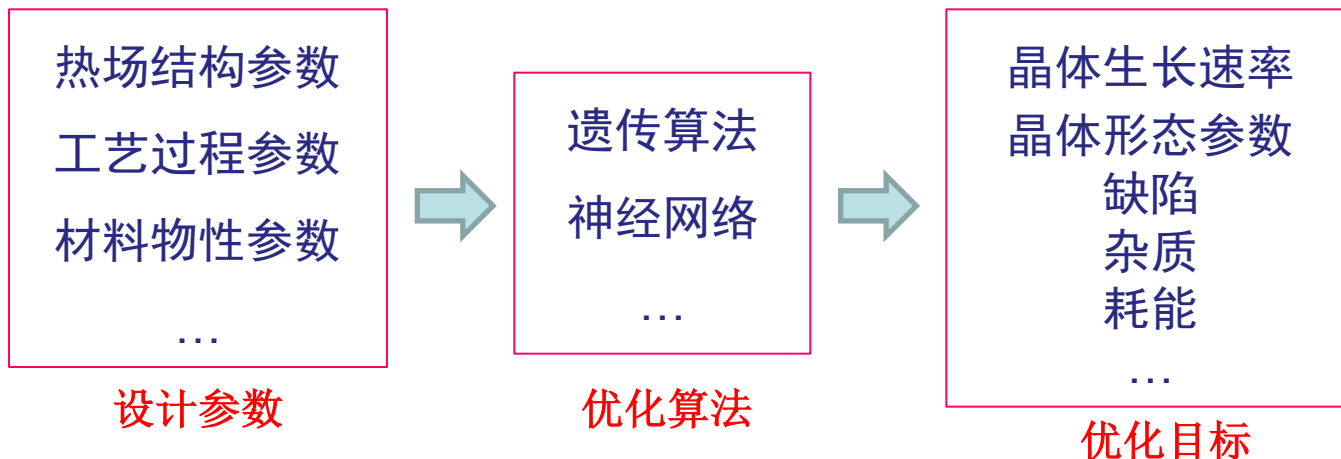


发动机叶片的氧化与失效



研究组简介——研究方向 (3.2)

- 多参数热动力学系统的多目标优化方法与应用



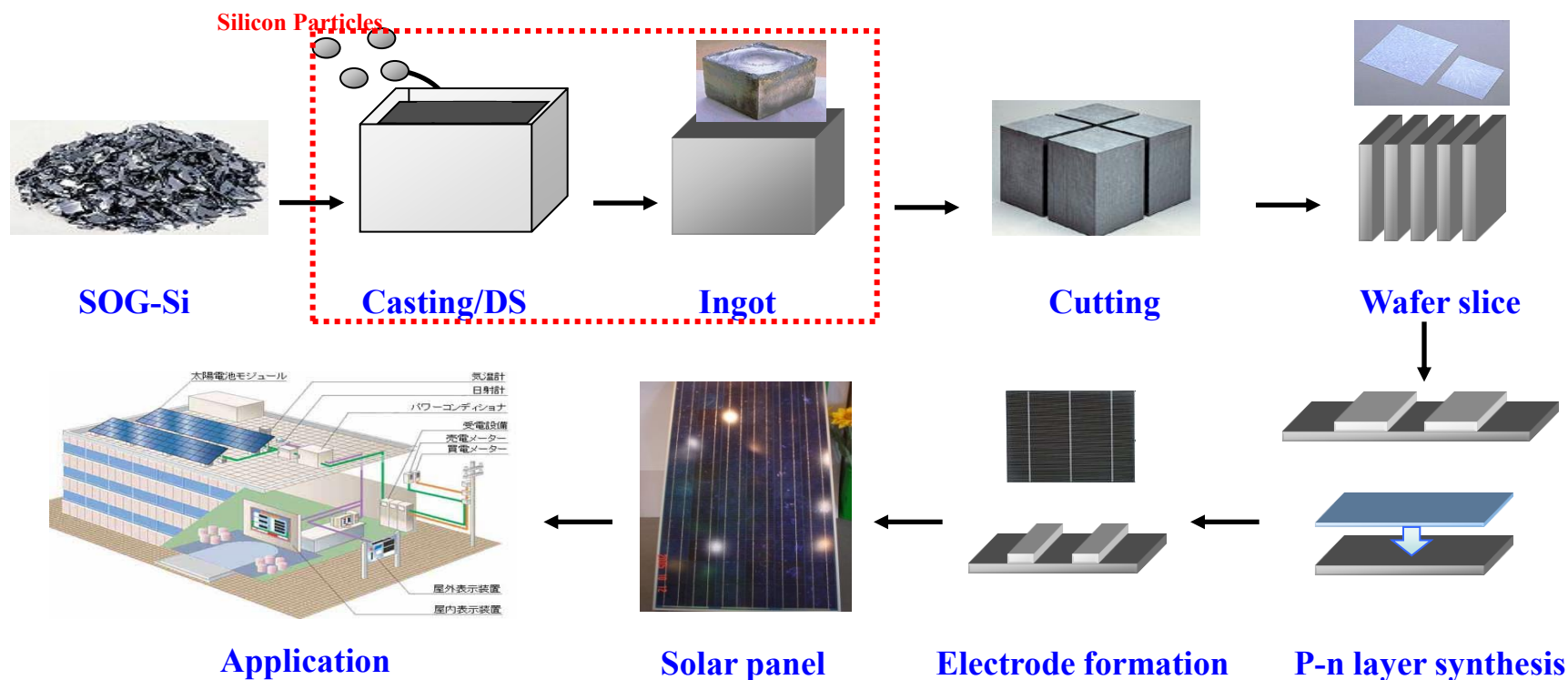
拟解决问题:

- 目标函数的构建
- 合适样本的选取
- 高速寻优算法的开发



研究背景 - 硅熔体流动及其磁场控制

• 太阳能光伏产业链



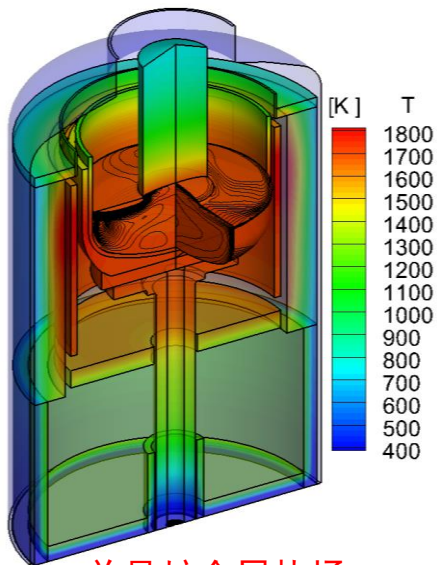
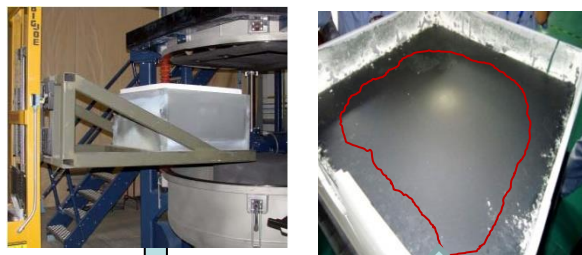
硅晶体质量直接影响后续加工、器件性能和成本！



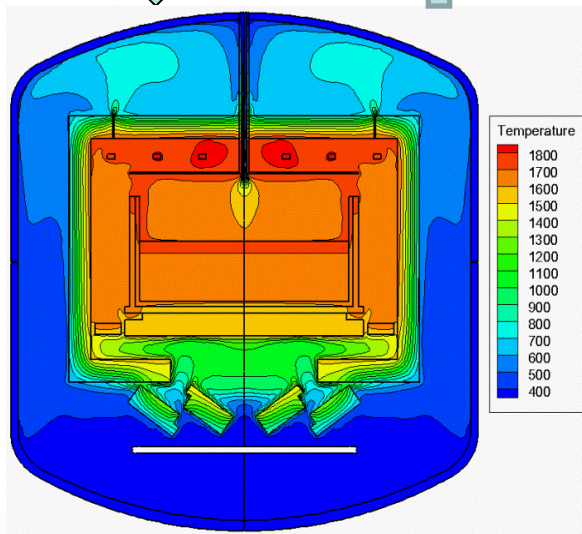
研究背景 - 硅熔体流动及其磁场控制

晶硅生长过程中的传热传质热物理问题

多晶/准单晶铸锭硅



单晶炉全局热场



加热/化料/长晶/退火/冷却

- 多尺度多物理场的耦合机理：
多相, 多组分, 多物理场, 辐射/传导/对流/相变多传热方式, 热化学反应流动, ...

- 熔体流动/热场/凝固界面控制

- 杂质输运与控制

- 节能问题

- 热应力/缺陷控制

- 热场/工艺设计与优化

- 成核/晶粒尺寸/晶界控制

.....



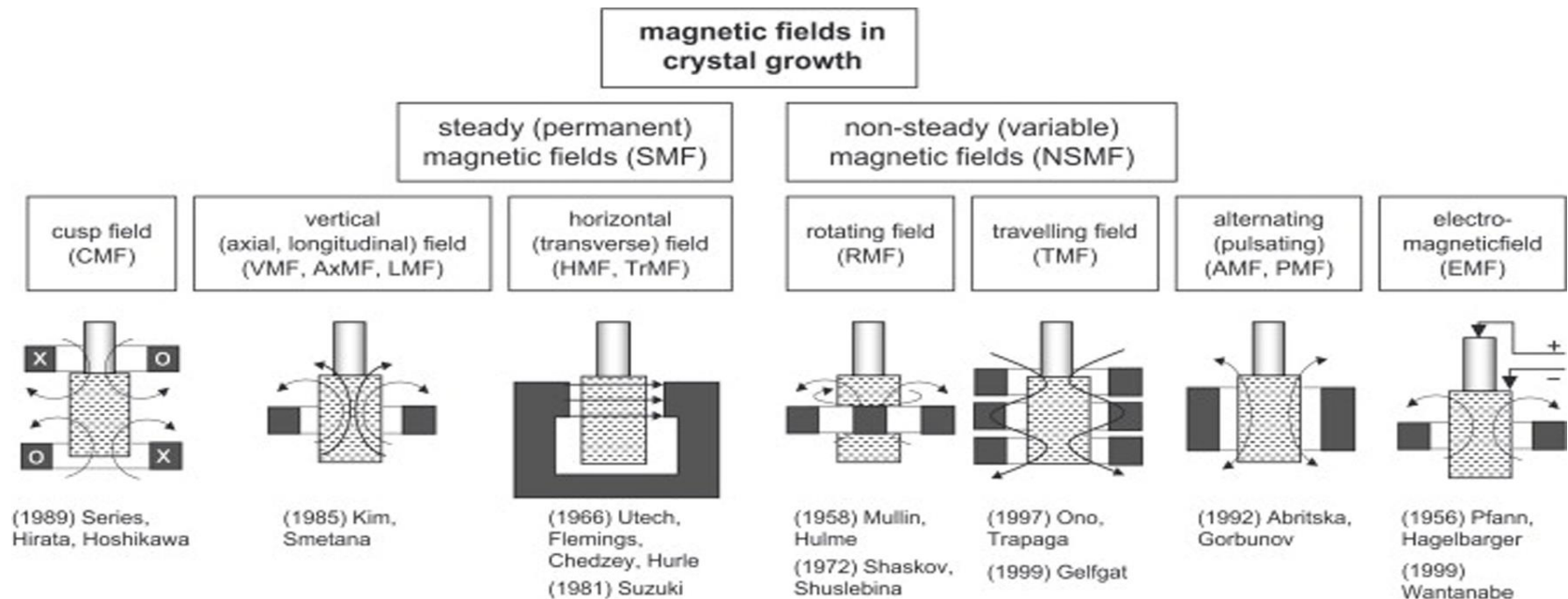
多尺度多物理场复杂非线性热动力学系统



研究背景 - 硅熔体流动及其磁场控制

• 熔体对流的磁场控制

- ◆ 恒定磁场（抑制流动）：轴向磁场，水平磁场，勾形磁场
- ◆ 非恒定磁场（强化或抑制流动）：旋转磁场，行波磁场，交变磁场，电磁场



存在问题： 磁场可调参数较多，当前研究并不系统，控制机理尚未明晰，离规模化应用还有较大差距

单晶硅生长过程中熔体流动的磁场调控

• 2D/3D耦合数值模型

二维全局热场模拟

- ◆ 辐射、对流、导热、相变
磁场和杂质耦合求解
- ◆ 熔体湍流的处理
低Re数 $k-\varepsilon$ 模型
热浮力对流和磁场修正

熔体区域非稳态三维模拟

- ◆ 大涡模拟 (LES)
动力模式SGS模型
- ◆ 热边界条件：2D全局模拟结果获得



单晶硅生长过程中熔体流动的磁场调控

- 贴体网格中大涡模拟技术的开发

传统方式:

N-S(Cartesian) → 过滤 → LES(Cartesian) → 坐标系变换 → LES(curvilinear)

替代方式:

N-S(Cartesian) → 坐标系变换 → NS(curvilinear) → 过滤 → LES(curvilinear)

- 一般曲线网格上的动力模式亚格子应力模型的构建

$$\mu_{sgs} = 2\rho C_D (\mathbf{x}, t) \bar{\Delta}^2 |\bar{\mathbf{S}}|$$

动态模型系数的求解是动力模式亚格子应力模型实施的关键

模型1: 原始速度形式的动力模式Smagorinsky模型 (物理空间)

模型2: 逆变形式的动力模式Smagorinsky模型 (计算空间)

替代模型: 协变形式的动力模式Smagorinsky模型 (计算空间)



单晶硅生长过程中熔体流动的磁场调控

- 一般曲线网格上的动力模式亚格子应力模型的构建

模型1:
$$\left[(\tau_{ij})_F - \frac{1}{3} (\tau_{kk})_F \delta_{ij} \right]_G = -2(C_D \Delta_F)^2 |\bar{S}| \bar{S}_{ij}$$

$$(\tau_{ij})_{FG} - \frac{1}{3} (\tau_{ij})_{FG} \delta_{ij} = -2C_D \Delta_G^2 |\bar{S}| \bar{S}_{ij} \quad \text{代入Germano等式}$$

$$L_{ij} - \frac{1}{3} L_{kk} \delta_{ij} = -C_D M_{ij} \quad M_{i,j} = 2(\Delta_G^2 |\bar{S}| \bar{S}_{ij} - \Delta_F^2 |\bar{S}| \bar{S}_{ij})$$

Lilly最小二乘法求解

$$C_D(\mathbf{x}, t) = \frac{M_{ij} L_{ij}}{M_{ij} M_{ij}}$$

模型2: 逆变形式

$$\left. \begin{aligned} L_i^k &= \bar{u}_i \bar{U}^k - \bar{u}_i \bar{U}^k \\ M_i^k &= 2(\Delta_G^2 |S| S_i^k - \Delta_F^2 |\bar{S}| \bar{S}_i^k) \end{aligned} \right\} \Rightarrow C_D(\mathbf{x}, t) = \frac{M_i^k L_i^k}{M_i^k M_i^k}$$

替代模型: 协变形式

$$\left. \begin{aligned} L_{\xi_l \xi_m} &= \bar{u}_{\xi_l} \bar{u}_{\xi_m} - \bar{u}_{\xi_l} \bar{u}_{\xi_m} \\ M_{\xi_l \xi_m} &= 2(\Delta_G^2 |S_c| S_{\xi_l \xi_m} - \Delta_F^2 |\bar{S}_c| \bar{S}_{\xi_l \xi_m}) \end{aligned} \right\} \Rightarrow C_D(\mathbf{x}, t) = \frac{L_{\xi_l \xi_m} M_{\xi_l \xi_m}}{M_{\xi_l \xi_m} M_{\xi_l \xi_m}}$$

单晶硅生长过程中熔体流动的磁场调控

• 熔体湍流模拟及其不稳定性分析

熔体流动驱动力

- (1) 热浮力
- (2) 坩埚转动
- (3) 晶体转动
- (4) 表面张力
- (5) 氩气剪切力

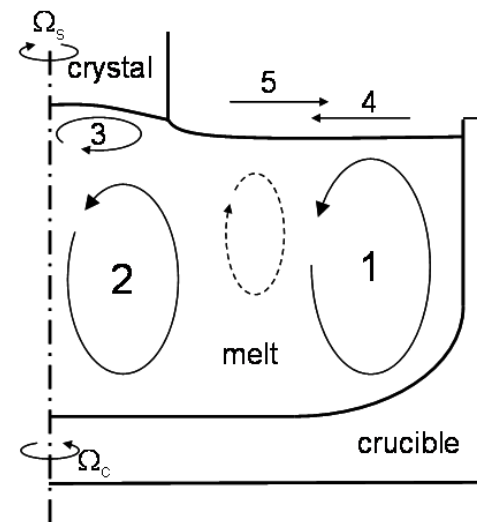
计算条件

◆ 计算网格: $80 \times 60 \times 60 = 182000$

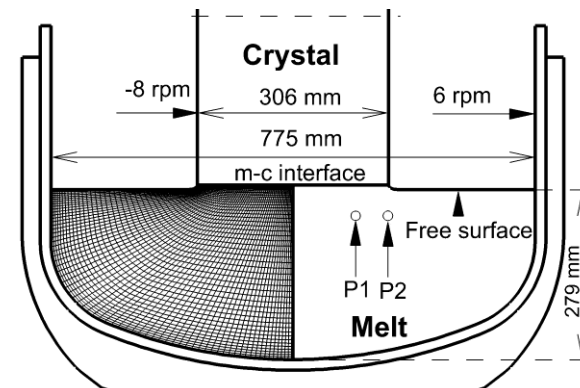
◆ 时间步长: 0.01 s

$$Re = 1.8 \times 10^5, \quad Gr = 3.2 \times 10^{10}$$

$$Ma = 3.5 \times 10^5, \quad Ra = 4.2 \times 10^8$$



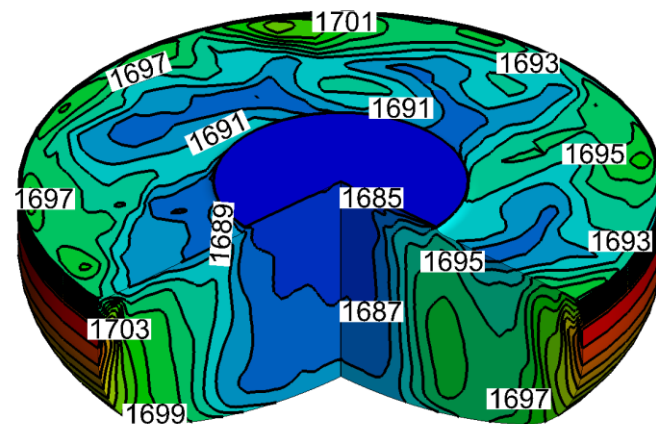
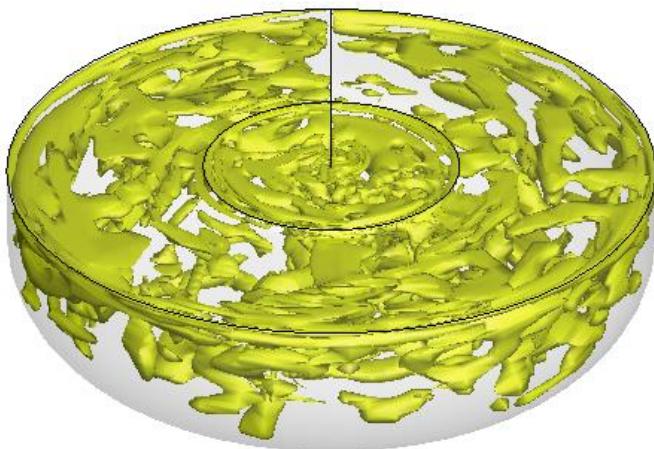
熔体典型时均流动结构



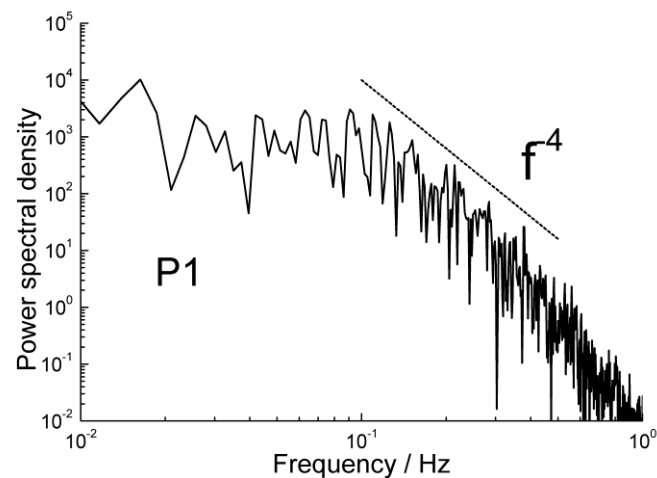
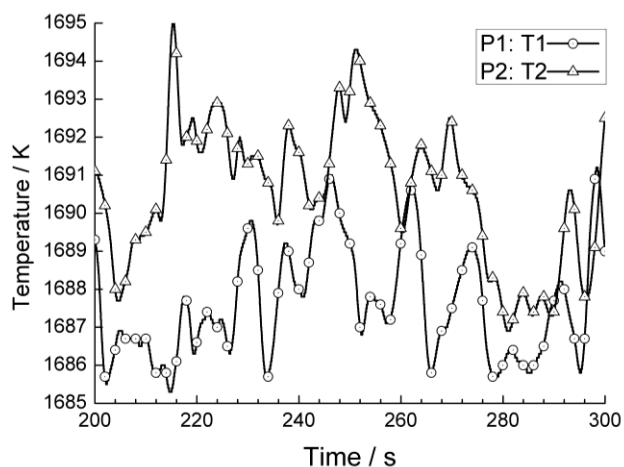
计算条件及网格

单晶硅生长过程中熔体流动的磁场调控

瞬态模拟结果

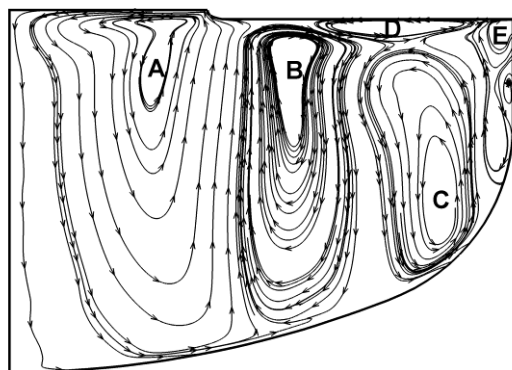


时序温度频谱分析

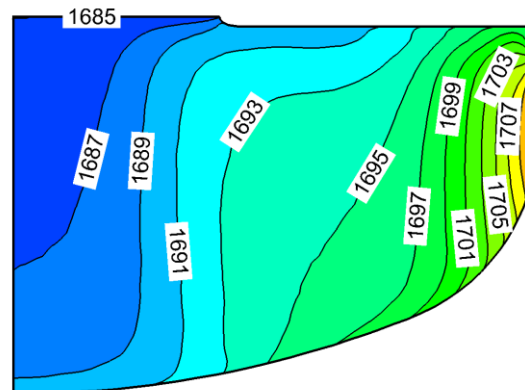


单晶硅生长过程中熔体流动的磁场调控

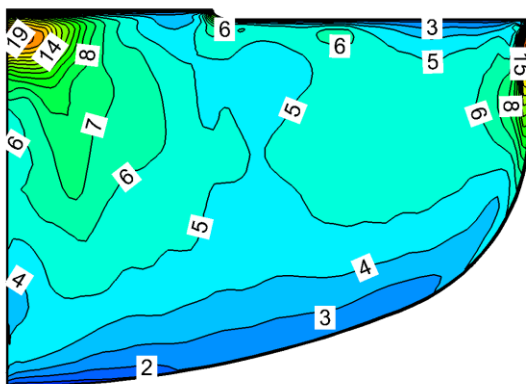
统计场模拟结果



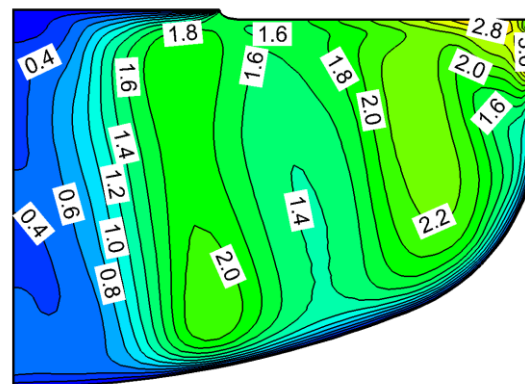
时均流场



时均温度场



轴向速度脉动分布

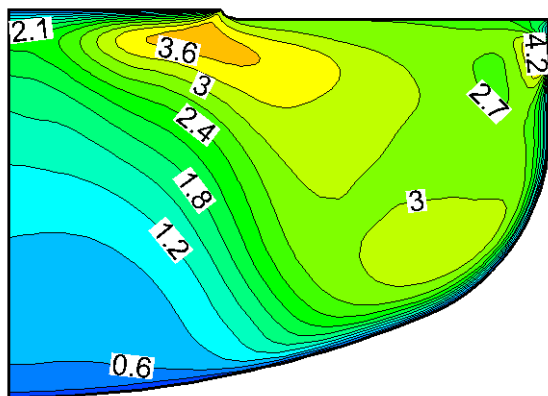


温度脉动分布

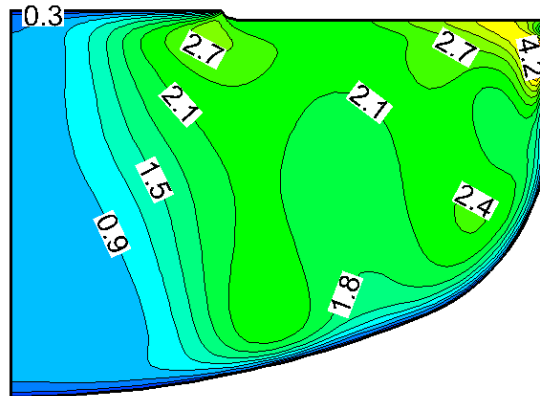


单晶硅生长过程中熔体流动的磁场调控

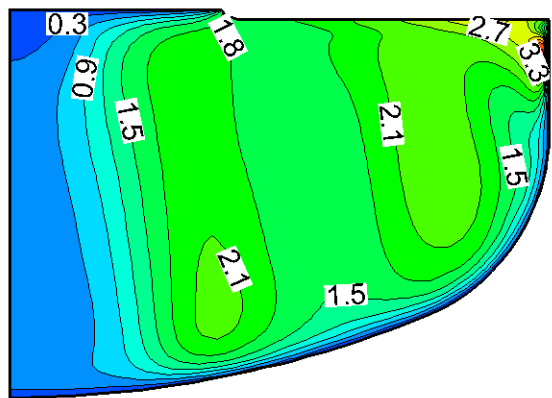
坩埚转速对熔体温度脉动场的影响



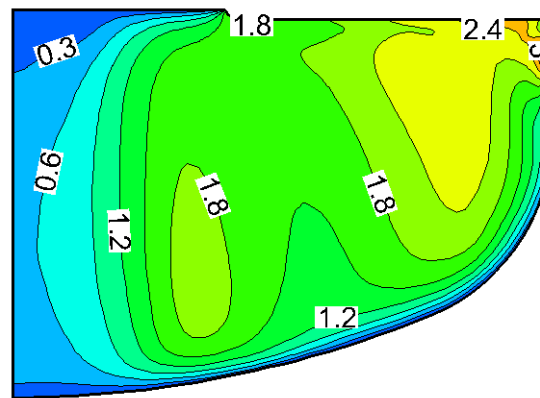
2/-8 rpm



4/-8 rpm



6/-8 rpm

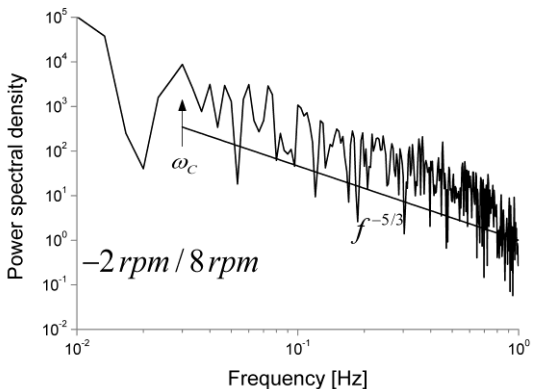


8/-8 rpm

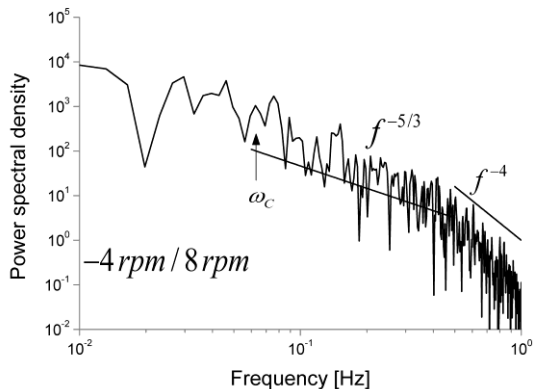
子午面
温度脉动

单晶硅生长过程中熔体流动的磁场调控

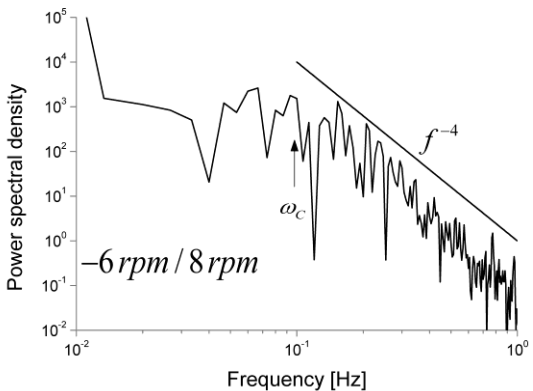
坩埚转速对熔体对流脉动场的影响



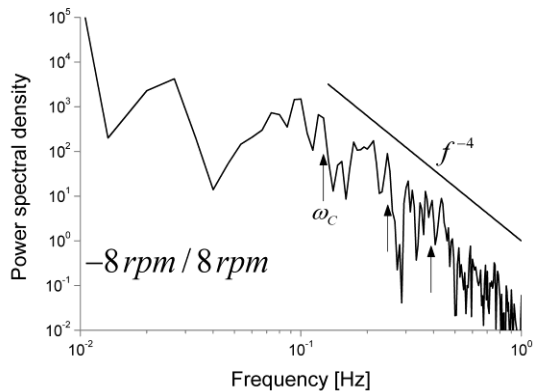
2/-8 rpm



4/-8 rpm



6/-8 rpm



8/-8 rpm

时序温度
频谱分析



单晶硅生长过程中熔体流动的磁场调控

• 熔体流动不稳定性的磁场控制

恒定磁场 → 抑制对流和温度脉动
 → 改善晶体生长条件 → 提高晶体质量

磁场条件：

水平磁场TMF： $B=0.2\text{ T}$

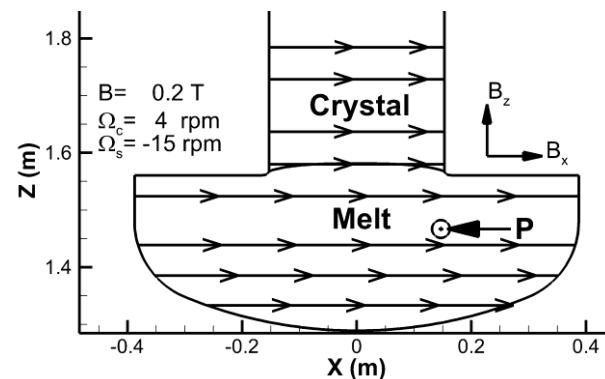
勾形磁场CMF： $\mathbf{B} = B_0 / R_c [x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + 2(z - H_0)\mathbf{k}]$

$$B_0 = 0.2\text{ T}$$

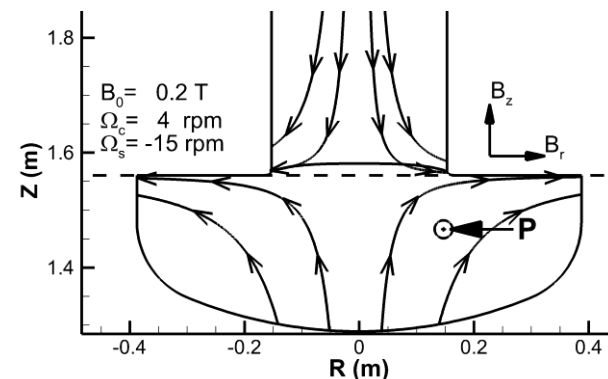
计算条件：

计算网格：250,000

时间步长：0.01 s



水平磁场 (TMF)



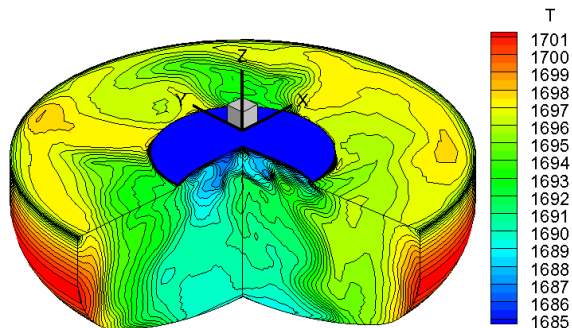
勾形磁场 (CMF)



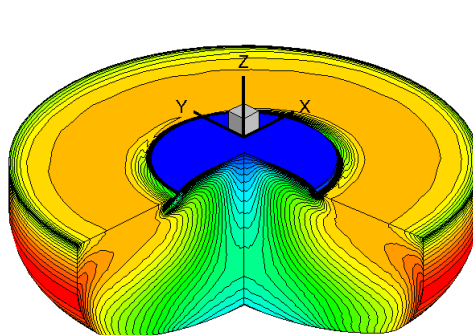
单晶硅生长过程中熔体流动的磁场调控

瞬态场模拟结果

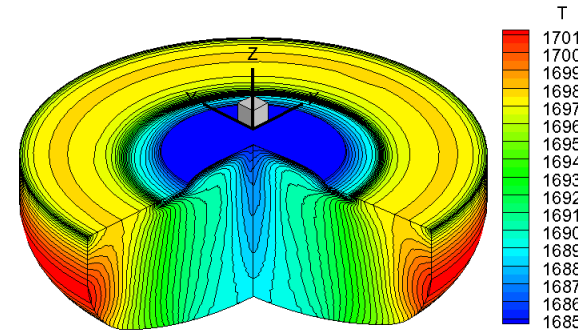
无磁场



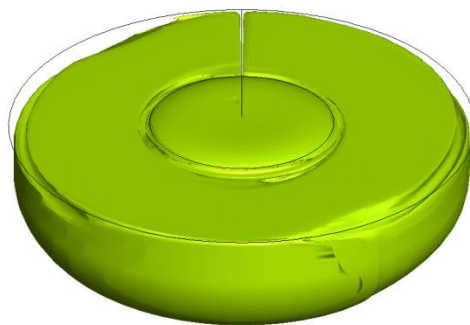
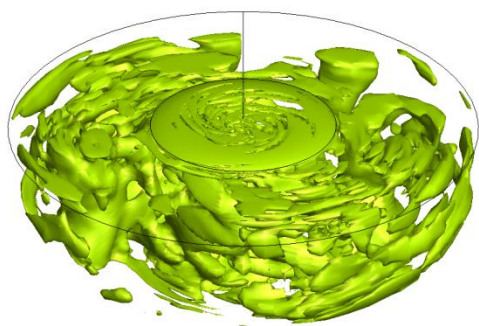
TMF=0.2 T



CMF=0.2 T



瞬态温度分布



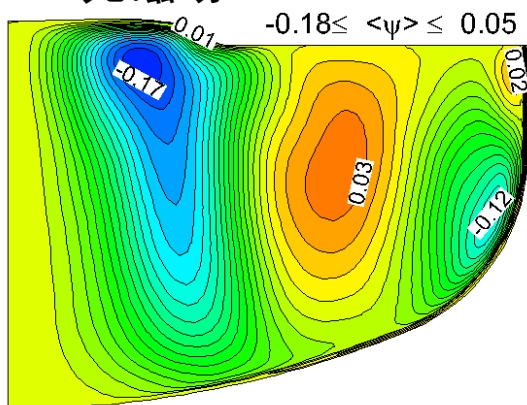
瞬态流动结构



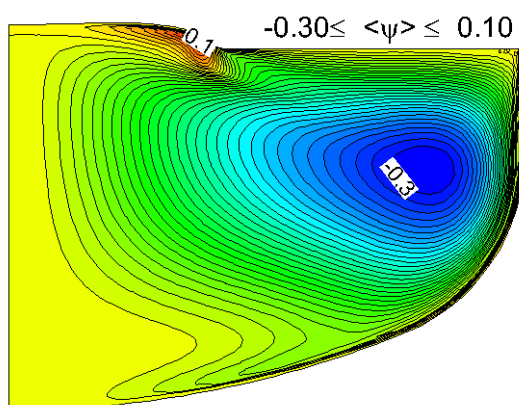
单晶硅生长过程中熔体流动的磁场调控

时均场模拟结果

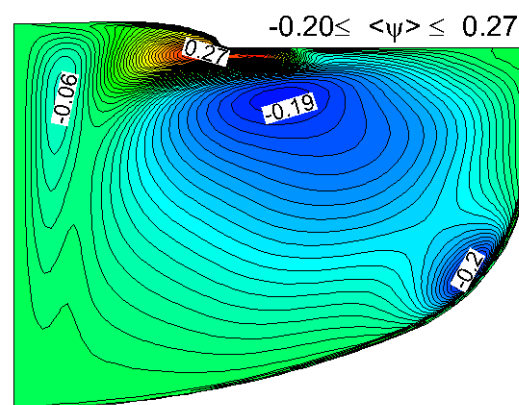
无磁场



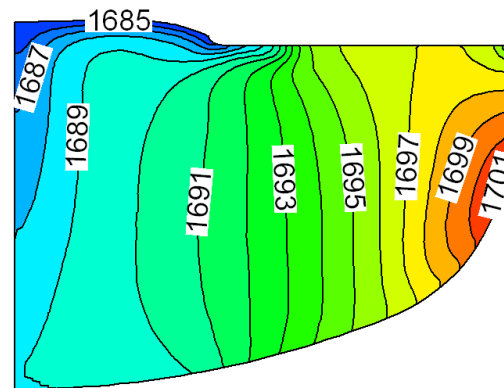
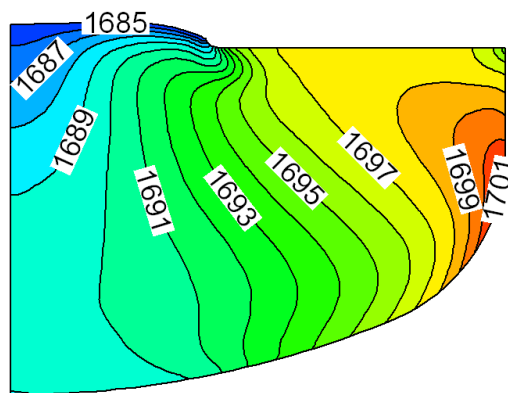
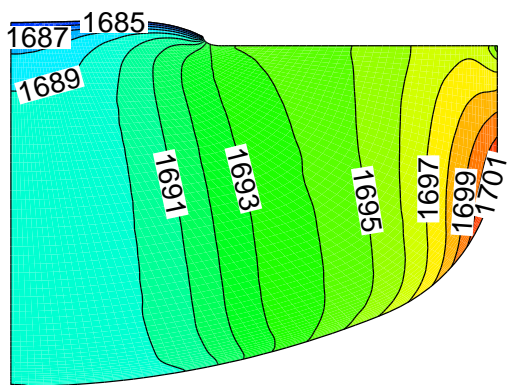
TMF=0.2 T



CMF=0.2 T



时均流动结构



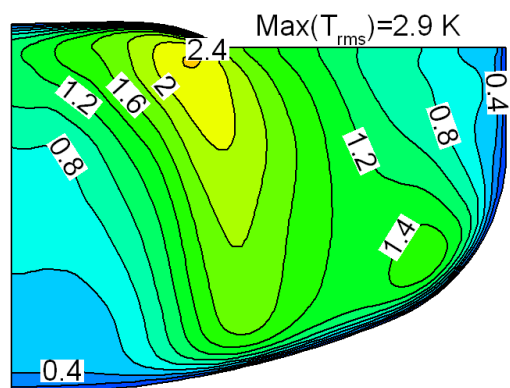
时均温度分布



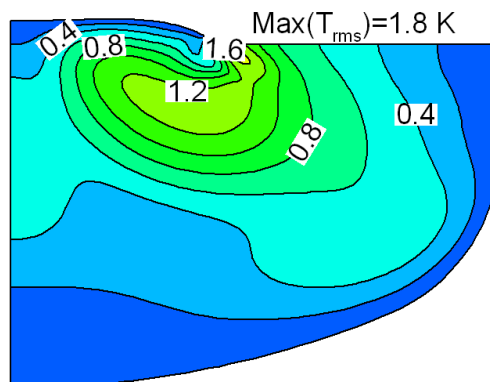
单晶硅生长过程中熔体流动的磁场调控

脉动场模拟结果

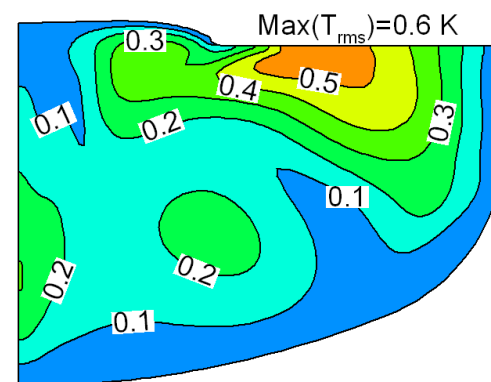
无磁场



TMF=0.2 T



CMF=0.2 T

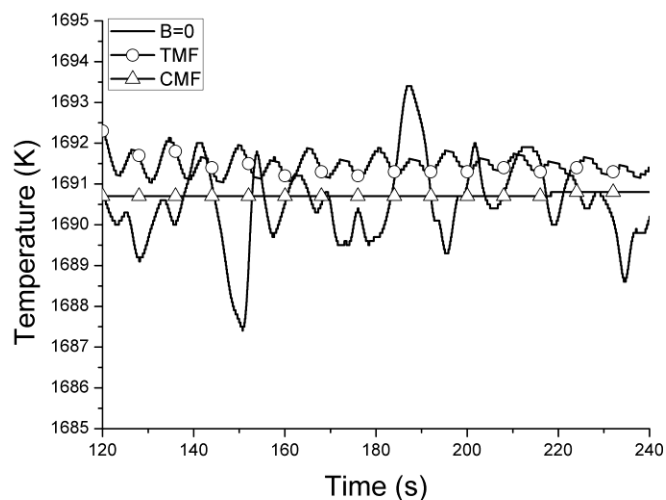


子午面温度脉动分布

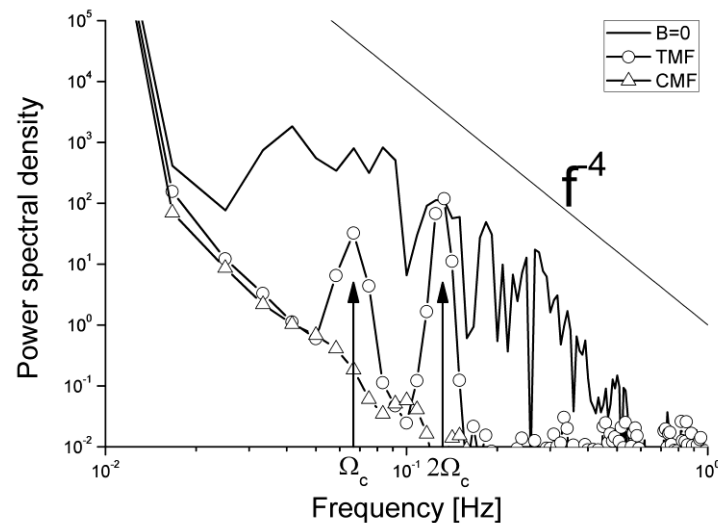


单晶硅生长过程中熔体流动的磁场调控

时序温度分析



时序温度曲线



频谱分析

无磁场： 温度随机脉动，无明显特征频率，PSD与弱湍流状态对应；

TMF： 温度有规律的振荡，特征频率为坩埚转速的整数倍；

CMF： 温度振荡基本消失，脉动能量非常小。



单晶硅生长过程中熔体流动的磁场调控

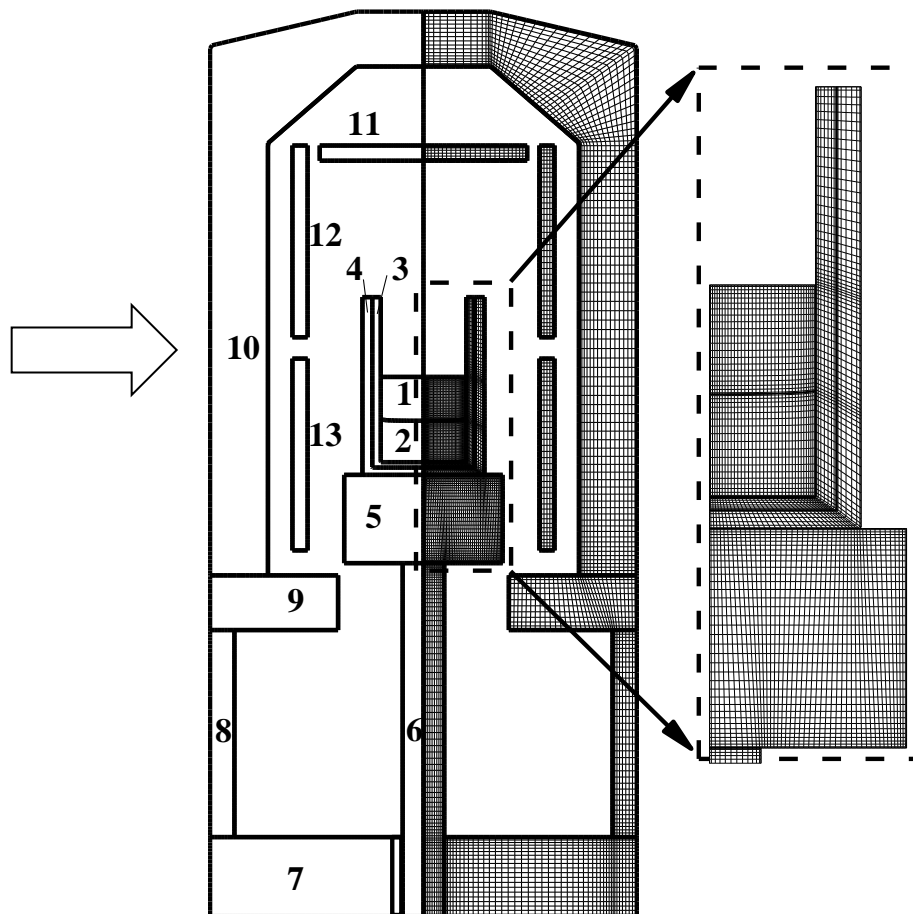
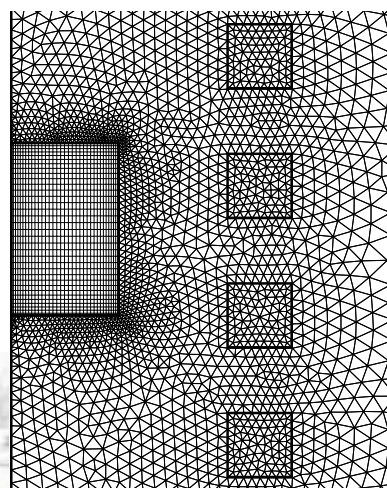
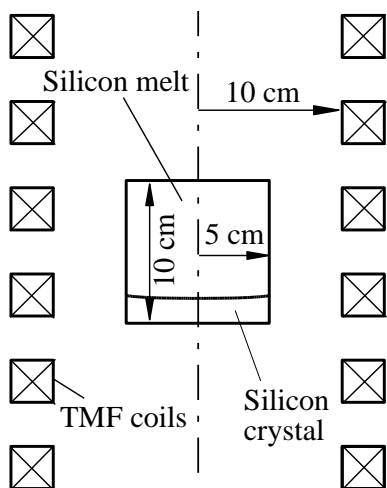
小结：

- ◆ 结晶区的温度脉动特征区域处于晶体/熔体/气体三相点附近；
- ◆ 提高坩埚转速对结晶区的热浮力对流有明显抑制作用；
- ◆ TMF主要抑制熔体中的热浮力对流，坩埚转速引起的周期性对流特征仍然存在；
- ◆ 相同磁场特征强度下，CMF对熔体湍流的抑制能力强于TMF，同时在结晶区提供较好的晶体生长热环境，有利于保持晶体生长的连续性和稳定性。



多晶硅铸锭过程中熔体流动的磁场调控

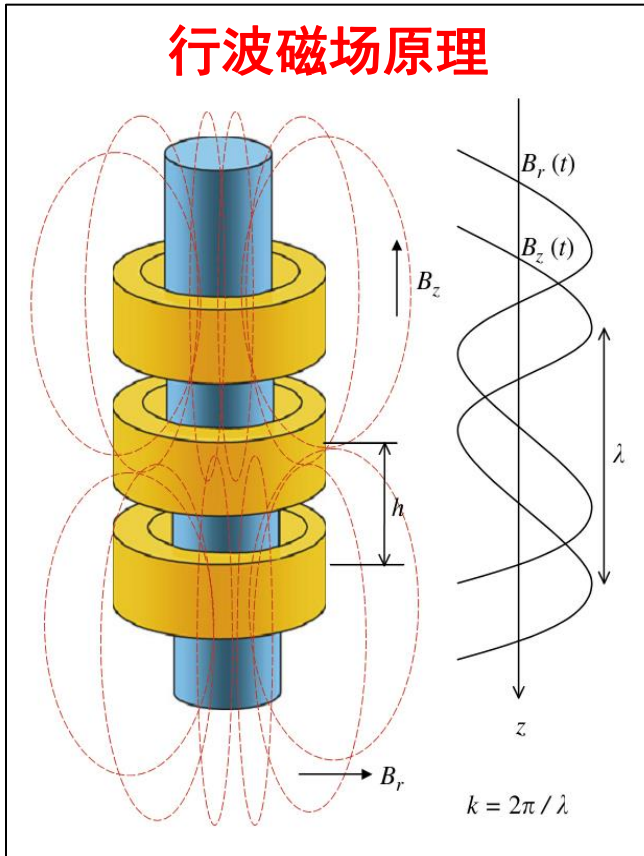
1 物理模型



- 1: 熔体
- 2: 晶体
- 3: 石英坩埚
- 4: 石墨支撑板
- 5-6: 支撑杆
- 7-10: 隔热笼
- 11-13: 加热器

行波磁场数值模型

行波磁场原理



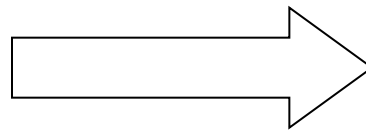
麦克斯韦方程组

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0$$

$$\nabla \cdot \vec{E} = 0$$

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \vec{J}$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$



用矢量磁位 \vec{A} 代替 \vec{B}

控制方程

$$\nabla^2 A_{\theta re} - \frac{A_{\theta re}}{r^2} = -\omega \mu_0 \gamma A_{\theta im} - \mu_0 J_{Sre}$$

$$\nabla^2 A_{\theta im} - \frac{A_{\theta im}}{r^2} = \omega \mu_0 \gamma A_{\theta re} - \mu_0 J_{Sim}$$

$$A_{\theta} = A_{\theta re} + iA_{\theta im}$$

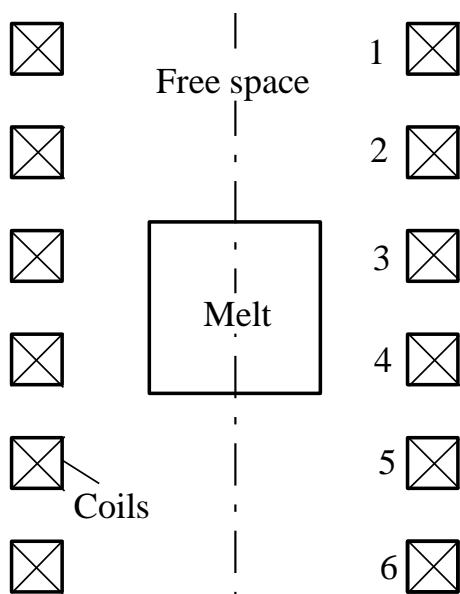
边界条件

$$r = 0, A_{\theta im} = A_{\theta re} = 0$$

$$(r, z) \rightarrow 0, A_{\theta im} = A_{\theta re} = 0$$

洛伦兹力计算模型

六线圈 行波磁场发生器



外加电流

$$J_0 \cos(\omega t)$$

$$J_0 \cos\left(\omega t + \frac{\pi}{3}\right)$$

$$J_0 \cos\left(\omega t + \frac{2\pi}{3}\right)$$

$$J_0 \cos(\omega t + \pi)$$

$$J_0 \cos\left(\omega t + \frac{4\pi}{3}\right)$$

$$J_0 \cos\left(\omega t + \frac{5\pi}{3}\right)$$

控制方程

$$\nabla^2 A_{\theta re} - \frac{A_{\theta re}}{r^2} = \begin{cases} \chi_{re} \mu_0 J_0, & (r, z) \in \Omega_c \\ -\omega \mu_0 \gamma A_{\theta im}, & (r, z) \in \Omega_m \\ 0, & (r, z) \in \Omega_f \end{cases}$$

χ_{re} 依次为 -1, -1/2, 1/2, 1, 1/2, -1/2

$$\nabla^2 A_{\theta im} - \frac{A_{\theta im}}{r^2} = \begin{cases} \chi_{im} \mu_0 J_0, & (r, z) \in \Omega_c \\ \omega \mu_0 \gamma A_{\theta re}, & (r, z) \in \Omega_m \\ 0, & (r, z) \in \Omega_f \end{cases}$$

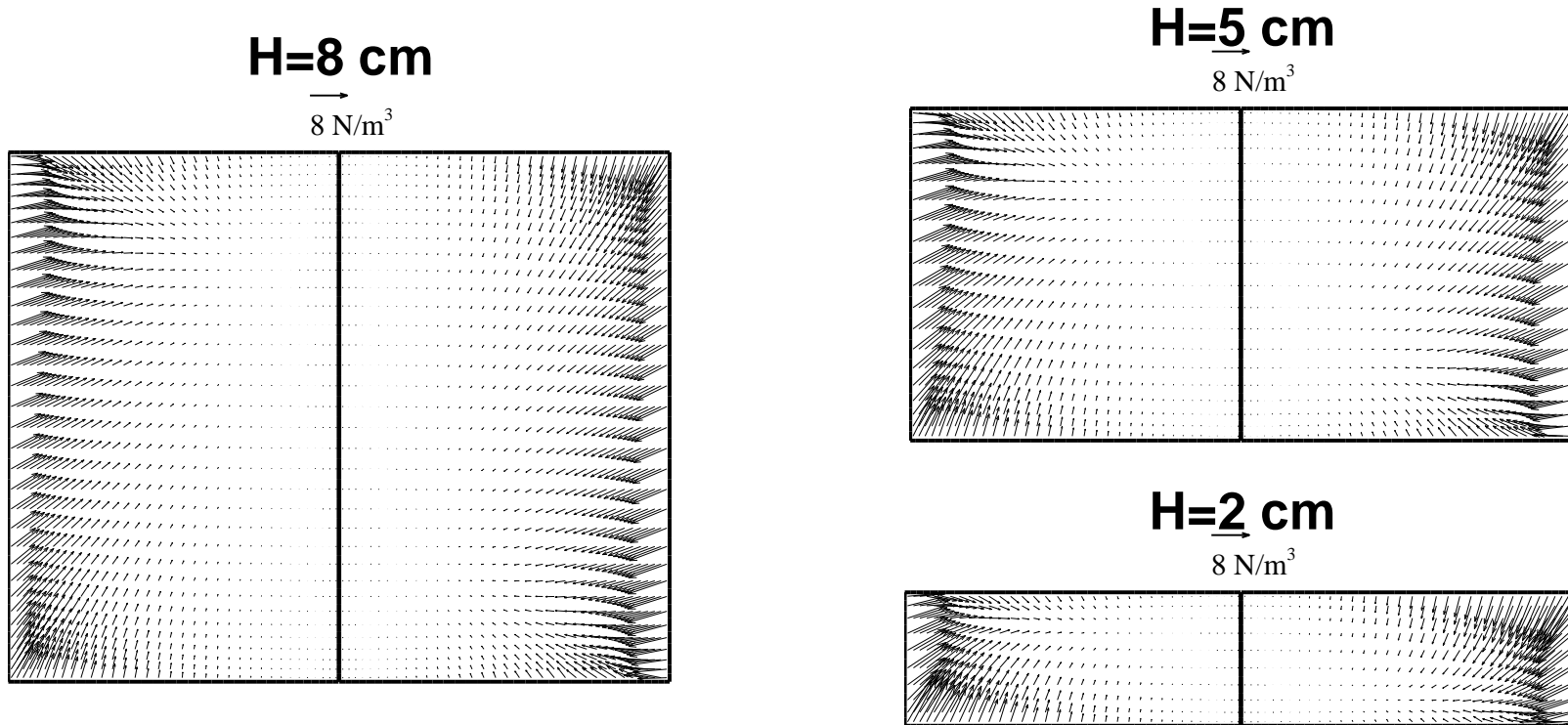
χ_{im} 依次为 0, $-\sqrt{3}/2$, $-\sqrt{3}/2$, 0, $\sqrt{3}/2$, $\sqrt{3}/2$

边界条件

$$(A_\theta)_m = (A_\theta)_f, \left(\frac{\partial A_\theta}{\partial n}\right)_m = \left(\frac{\partial A_\theta}{\partial n}\right)_f$$

2 行波磁场方向的影响

□ 洛伦兹力的分布



(左侧: TMF up; 右侧: TMF down)

✓ 相同的电流参数: 8 A、450 Hz、60°

✓ 集肤深度: $\delta_s = 1/\sqrt{\pi\mu_0\gamma f} = 2.2 \text{ cm}$

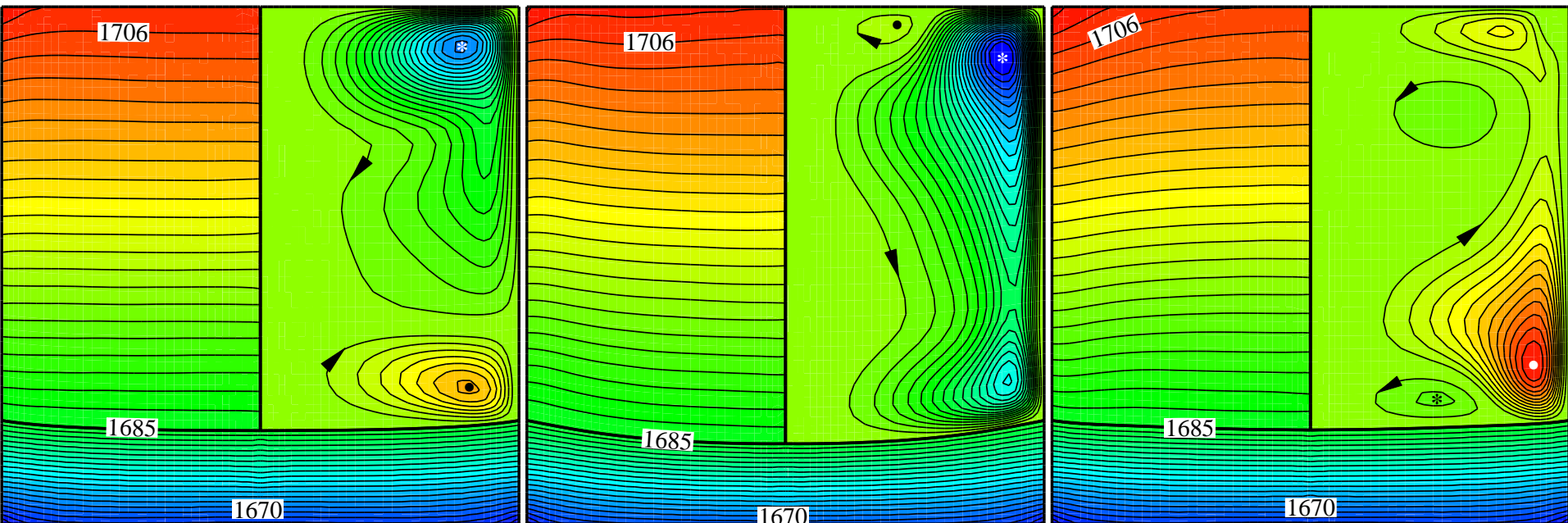
□ 温度与流函数分布

凝固20%

TMF none

TMF up

TMF down



左侧: 温度, 间隔1 K; 右侧: 流函数, 间隔 5×10^{-5} kg/s

$\psi(*) = -9.59 \times 10^{-4}$ kg/s

$\psi(*) = -1.23 \times 10^{-3}$ kg/s

$\psi(*) = -1.11 \times 10^{-4}$ kg/s

$\psi(\bullet) = 3.63 \times 10^{-4}$ kg/s

$\psi(\bullet) = 8.37 \times 10^{-5}$ kg/s

$\psi(\bullet) = 6.52 \times 10^{-4}$ kg/s

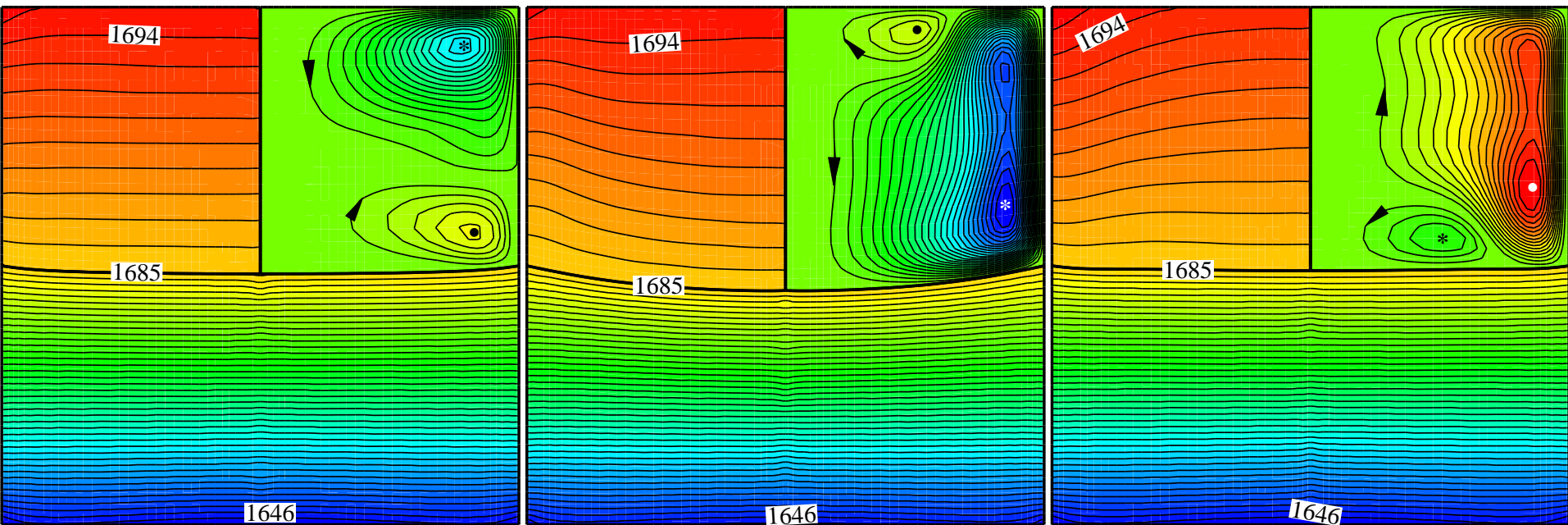
□ 温度与流函数分布

凝固50%

TMF none

TMF up

TMF down



左侧: 温度, 间隔1 K; 右侧: 流函数, 间隔 5×10^{-5} kg/s

$\psi(*) = -7.71 \times 10^{-4}$ kg/s

$\psi(*) = -1.25 \times 10^{-3}$ kg/s

$\psi(*) = -2.01 \times 10^{-4}$ kg/s

$\psi(\bullet) = 2.60 \times 10^{-4}$ kg/s

$\psi(\bullet) = 1.91 \times 10^{-4}$ kg/s

$\psi(\bullet) = 8.01 \times 10^{-4}$ kg/s

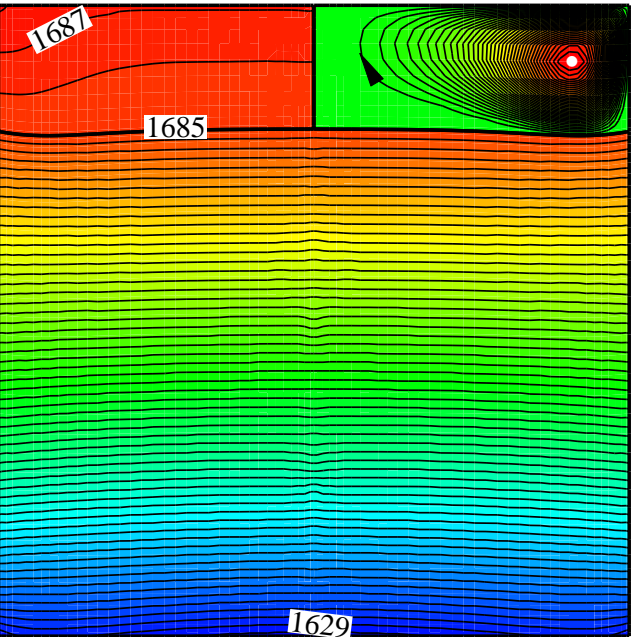
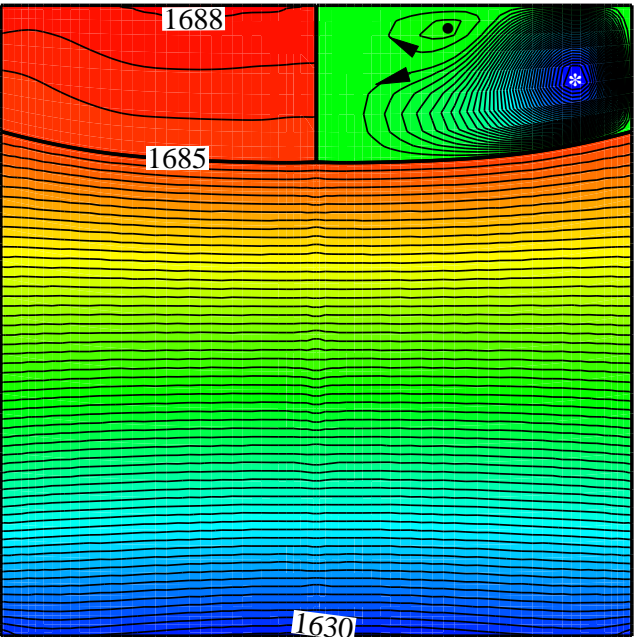
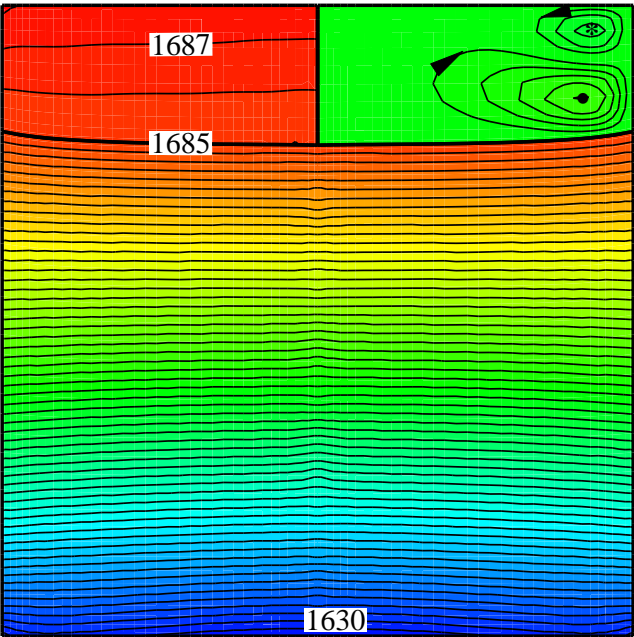
□ 温度与流函数分布

凝固80%

TMF none

TMF up

TMF down



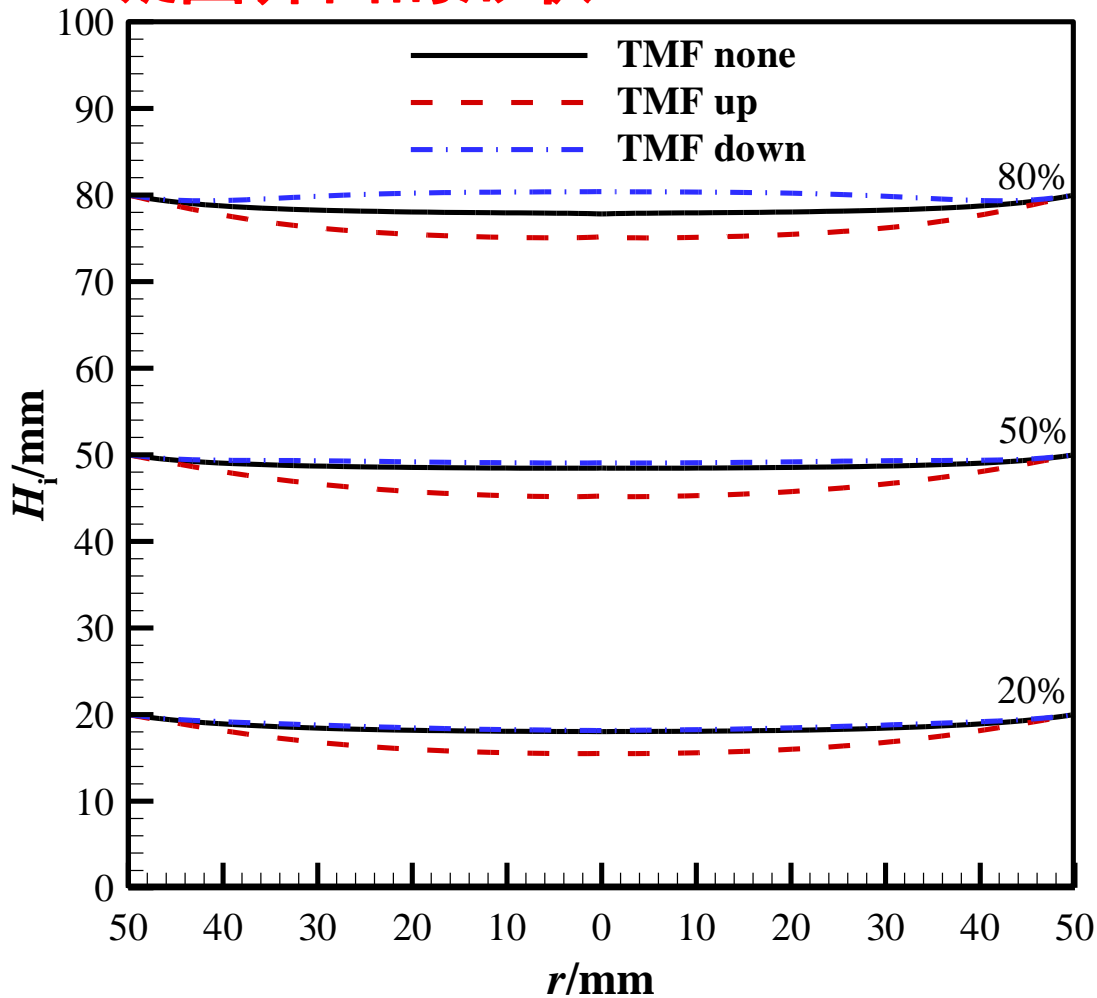
左侧: 温度, 间隔1 K; 右侧: 流函数, 间隔 5×10^{-5} kg/s

$\psi(*) = -1.7 \times 10^{-4}$ kg/s
 $\psi(\bullet) = 2.55 \times 10^{-4}$ kg/s

$\psi(*) = -1.92 \times 10^{-3}$ kg/s
 $\psi(\bullet) = 1.15 \times 10^{-4}$ kg/s

$\psi(\bullet) = 1.98 \times 10^{-3}$ kg/s

凝固界面的形状



✓ 向上的行波磁场使界面中心位置下移

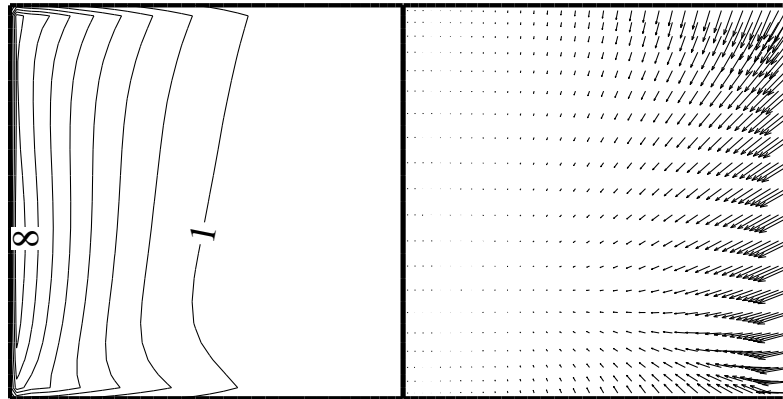
✓ 向下的行波磁场使界面中心位置上移

✓ 不同阶段影响效果不同，对电流参数需要不断调整

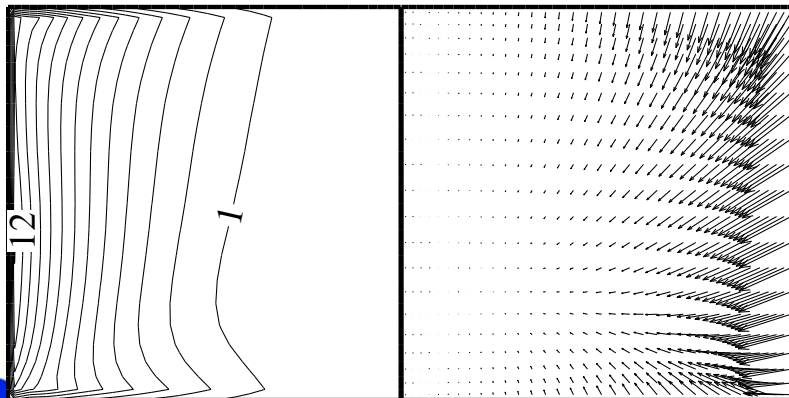
3 外加电流强度的影响

□ 洛伦兹力

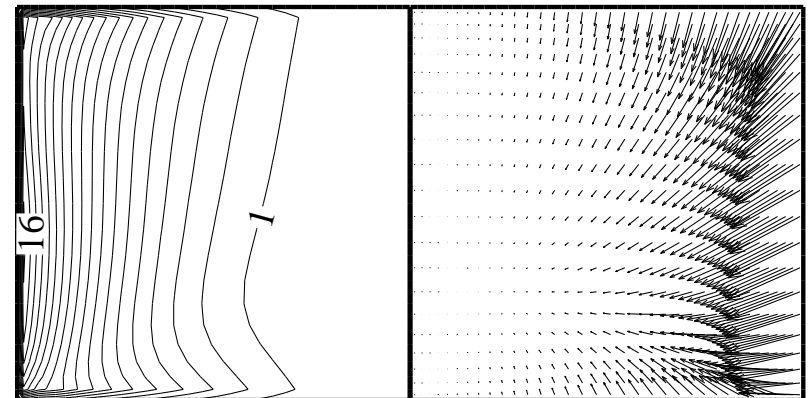
8 A \rightarrow
8 N/m³



10 A \rightarrow
8 N/m³

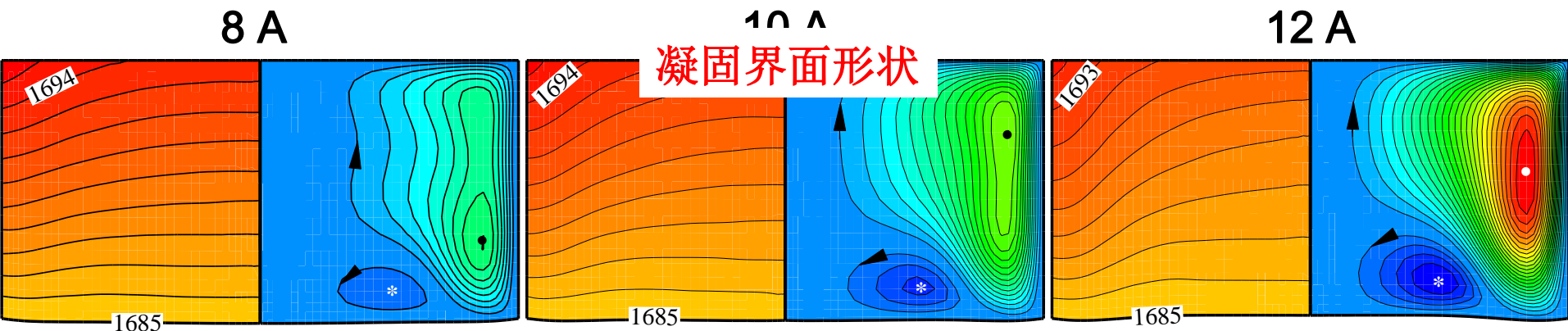


12 A \rightarrow
8 N/m³



(左侧：大小；右侧：矢量)

□ 温度分布与流动形态



左侧: 温度, 间隔1 K; 右侧: 流函数, 间隔 1×10^{-4} kg/s

$\psi(*) = -2.01 \times 10^{-4}$ kg/s

$\psi(\bullet) = 8.01 \times 10^{-4}$ kg/s

$\psi(*) = -3.35 \times 10^{-4}$ kg/s

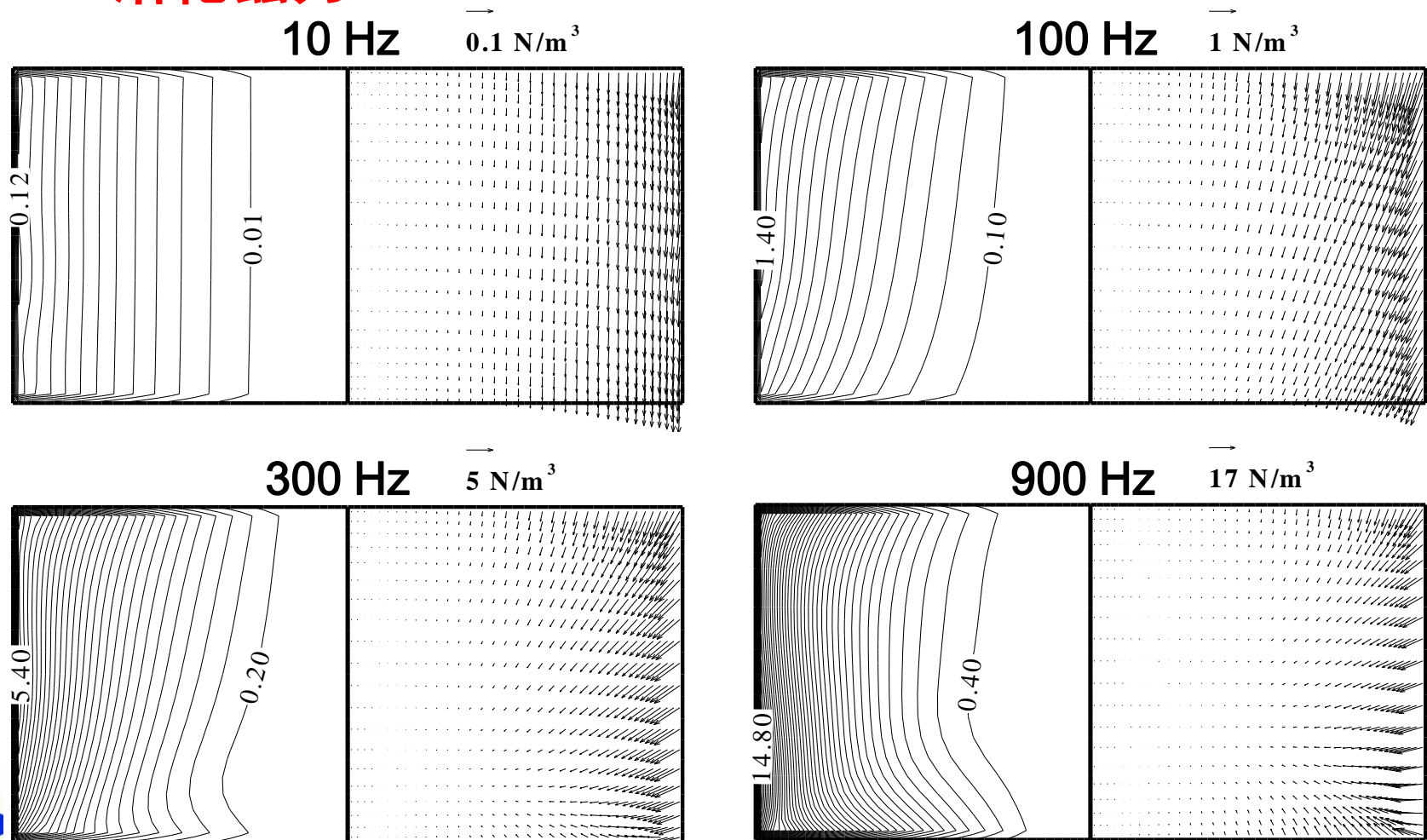
$\psi(\bullet) = 1.40 \times 10^{-3}$ kg/s

$\psi(*) = -4.99 \times 10^{-4}$ kg/s

$\psi(\bullet) = 2.49 \times 10^{-3}$ kg/s

4 外加电流频率的影响

□ 洛伦兹力

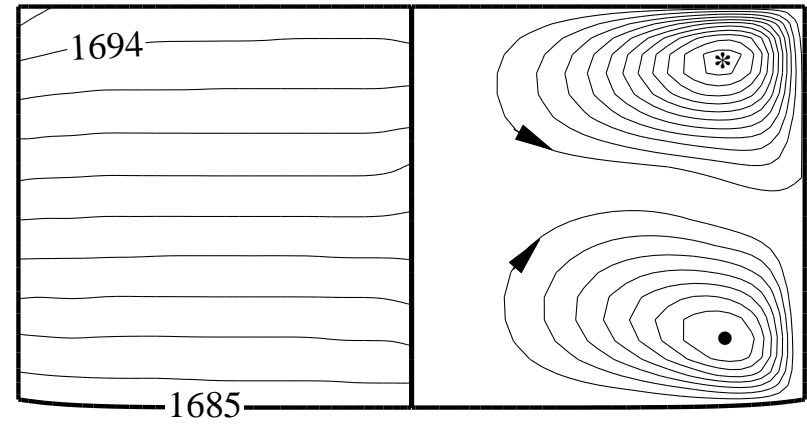
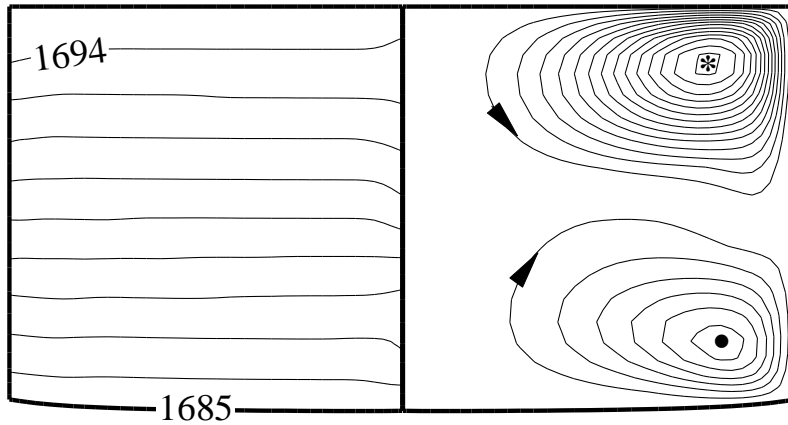


(左侧：大小；右侧：矢量)

□ 温度分布与流动形态 (电流强度相同)

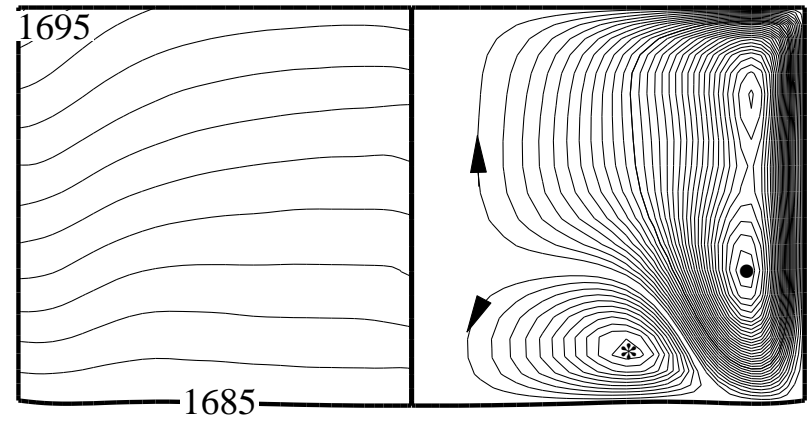
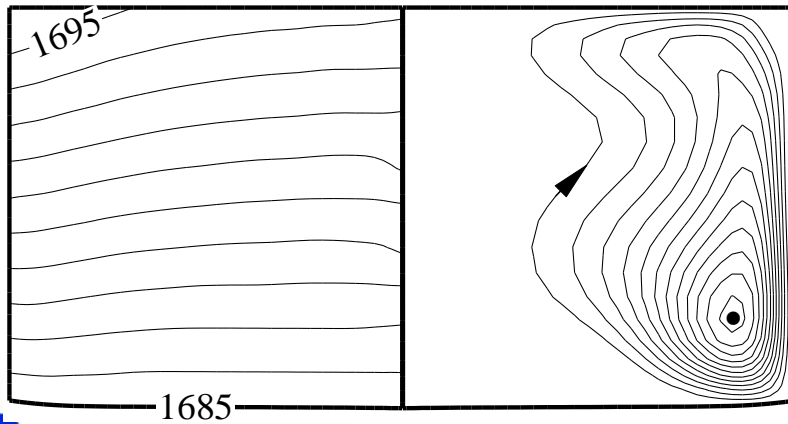
10 Hz

100 Hz



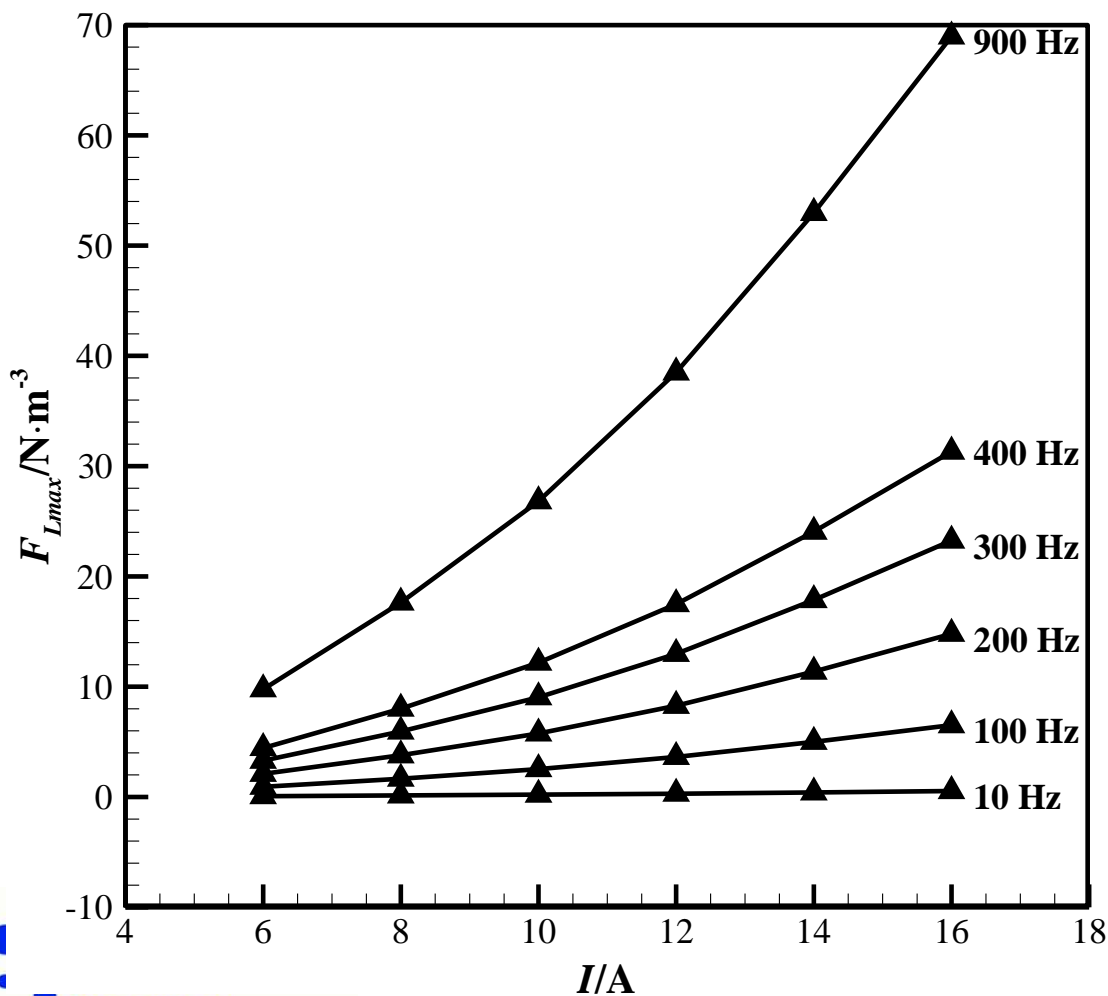
300 Hz

900 Hz



(左侧: 温度, 间隔1 K; 右侧: 流函数, 间隔 5×10^{-5} kg/s)

洛伦兹力



✓不同频率下，洛伦兹力最大值随电流强度的变化成抛物线关系

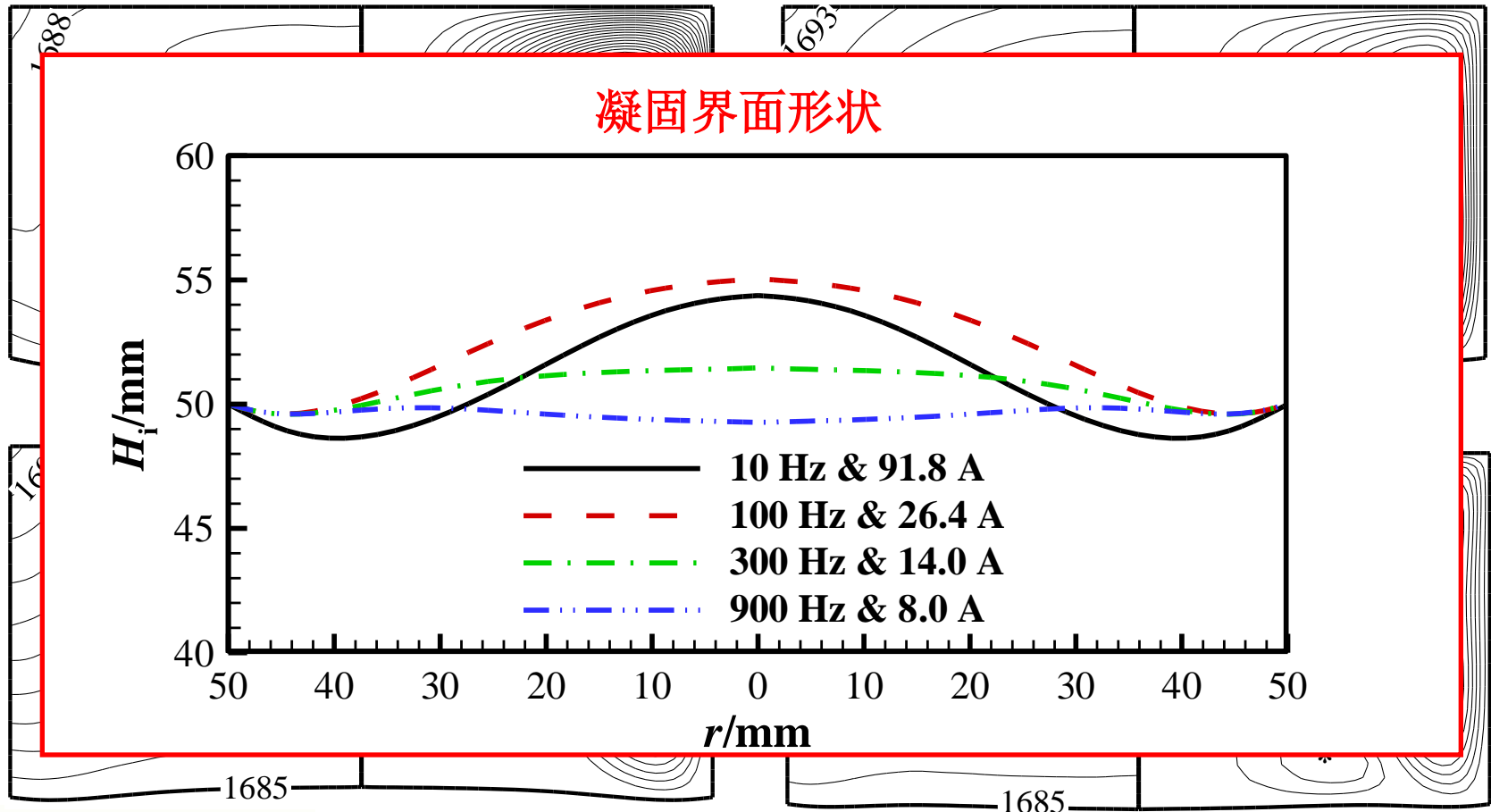
✓频率越大，变化越陡



□ 温度分布与流动形态 (洛伦兹力最大值相同)

10 Hz & 91.8 A

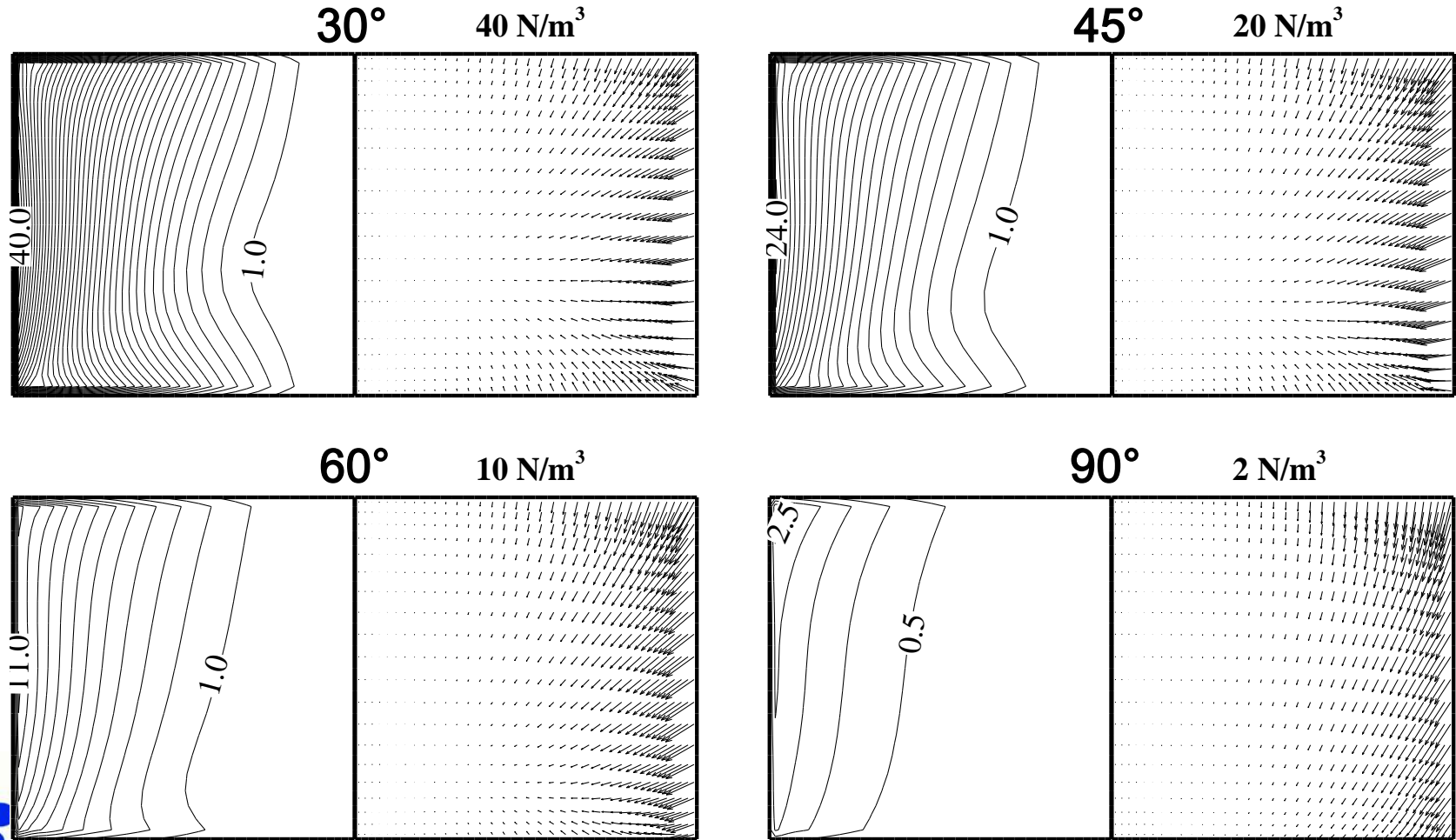
100 Hz & 26.4 A



(左侧: 温度, 间隔1 K; 右侧: 流函数, 间隔 $2 \times 10^{-4} \text{kg/s}$)

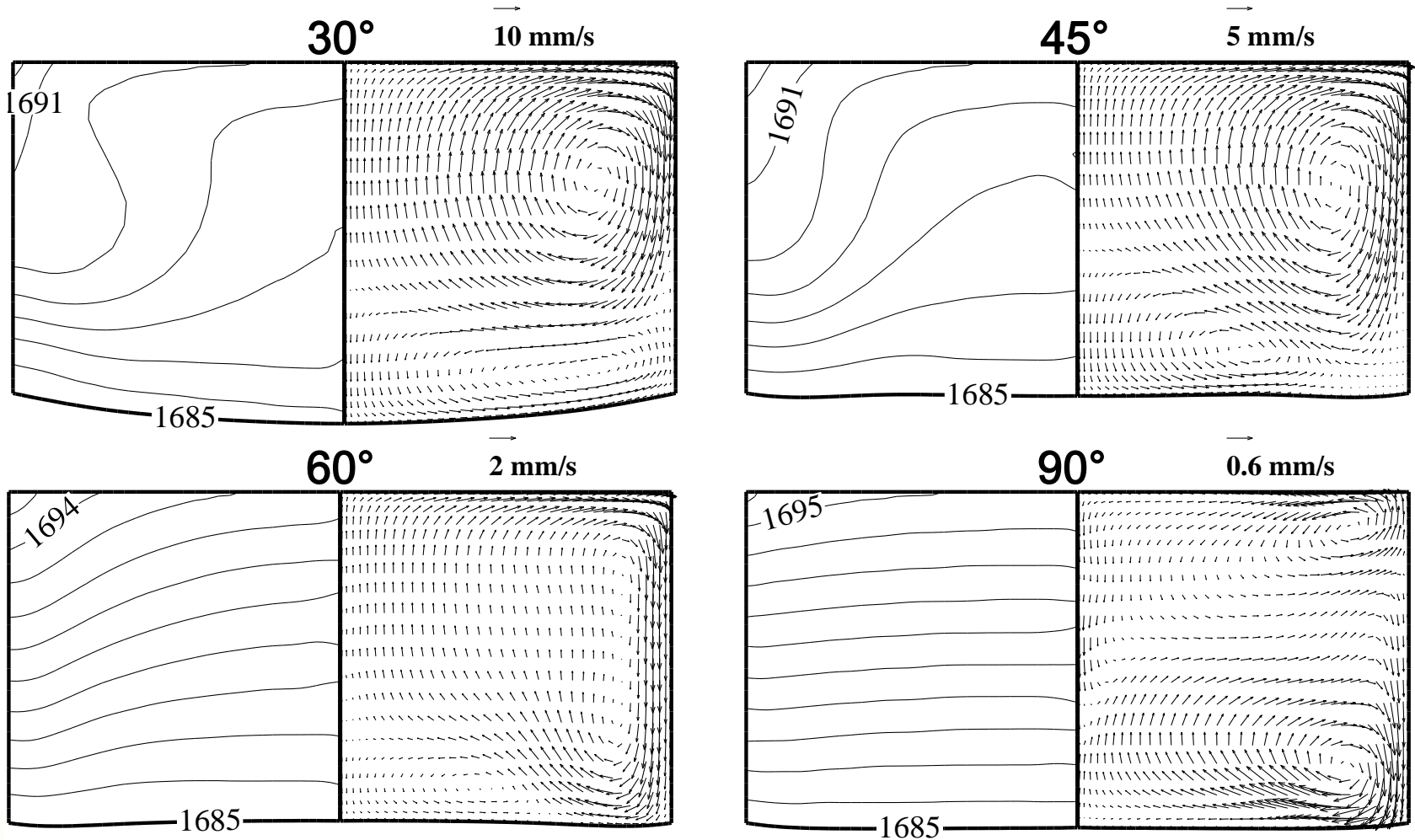
5 外加电流相移的影响

□ 洛伦兹力



(左侧：大小；右侧：矢量)

温度分布与速度分布



(左侧：温度，间隔为1 K；右侧：速度)

小结

- 行波磁场**强化熔体混合**；**行波磁场方向**对流动形态、凝固界面形状及其附近的杂质输运**影响显著**。但在不同的凝固阶段影响效果不尽相同，需随着凝固过程**调整电流参数**。
- 随着电流强度和频率增大，熔体流动加强；随着电流相移增大，流动减弱。

谢谢!

刘立军

西安交通大学 能源与动力工程学院

<http://cgsolar.xjtu.edu.cn>, Email: ljliu@mail.xjtu.edu.cn

