第39卷 第8期 太 阳 能 学 报 Vol. 39, No. 8
2018年8月 ACTA ENERGIAE SOLARIS SINICA Aug., 2018

文章编号:0254-0096(2018)08-2287-06

多晶硅还原炉中硅棒的直流电加热模型

方文宝[1]，周扬民[2]，聂陟枫[1]，李亚广[2]，侯彦青[1]

（1. 昆明理工大学，复杂有色金属资源清洁利用国家重点实验室，昆明 650093；2. 昆明理工大学冶金与能源工程学院，昆明 650093）

摘 要：考虑西门子还原炉内对流传热、辐射传热以及化学反应热，建立24对棒西门子还原炉内硅棒直流电焦耳加热模型。研究不同分布环上硅棒增长半径、反应器壁辐射率对硅棒内部径向温度分布的影响。结果表明：随着硅棒半径的增大，位于内环和中环的硅棒中心温度先增大又减小，而外环上的硅棒内部温度分布更不均匀；增大反应器壁辐射率，硅棒中心温度逐渐增大；辐射热损失越大，反应器壁的辐射率对硅棒内部温度的影响越强。

关键词：西门子还原炉；直流电；辐射率；温度分布

中图分类号：TK513.5 **文献标识码**：A

0 引 言

目前，中国多晶硅生产技术以改良西门子工艺为主，其主要核心生产设备是西门子反应器，又称为西门子还原炉[1]。通过电流加热的方式，还原炉获得所需能量。电流加热过程中，会使引起硅棒内部非均匀的温度梯度，即硅棒中心的温度远远高于表面温度，且硅棒的熔点为1687 K，所以为保证硅棒不会由于热应力的作用产生断裂，在硅棒电加热过程中应保证硅棒中心的温度低于1687 K[2,3]。因此，研究还原炉中硅棒电加热过程，已成为近几年国内外西门子多晶硅工程技术研究的重点。

近年来，国内外关于硅棒电加热过程的相关研究已有多篇报道，Li等[4]利用数值计算方法对直流电加热过程中硅棒体积生成热以及内部电流密度变化进行模拟计算，得到不同电压下硅棒内部径向温度分布及电流密度分布。Coso等[5,6]研究硅棒加热过程中硅棒内部非均匀温度分布，建立硅棒的交流电加热模型。侯彦青等[7]探究硅棒直流电加热时硅棒内部温度分布，得到硅棒中心温度与硅棒半径的关系。聂陟枫等[2]研究12对棒还原炉中硅棒辐射位置和器壁发射率对硅棒内部径向温度分布及电流密度分布的影响。

随着多晶硅价格的竞争，降低西门子还原炉能耗成为多晶硅生存的基本法则。而增大硅棒数量和降低反应器壁辐射率是降低能耗的主要方法。24对棒还原炉也逐渐成为国内多晶硅厂采用的主要工艺，其硅棒分布在3个同心环上。这对硅棒的电加热过程提出更大挑战，需要系统研究不同环上多晶硅增长过程中的硅棒内部的热电行为。然而国内外较少对此进行系统研究。因此，本文针对目前国内采用较多的24对棒还原炉，建立硅棒的直流电焦耳加热模型。系统研究不同分布环上硅棒增长半径、反应器壁辐射率对硅棒内部径向温度分布的影响规律。以期通过研究对西门子还原炉电加热过程的优化、节能以及扩大企业生产规模等方面提供理论基础和技术支撑。

1 模型建立

1.1 几何模型

针对24对棒还原炉结构，建立3D西门子还原炉模型，见图1a。由于西门子还原炉结构的对称性，同心圆上每根硅棒的热电行为类似，用硅棒1、硅棒9和硅棒25分别代表内、中和外环硅棒。图1b为硅棒的几何模型，其中硅棒的半径为R，长度为L。计算中的相关参数见表1。

收稿日期：2017-05-23
基金项目：国家自然科学基金(21566015)；云南省应用基础研究(2015FB126)；中国博士后科学基金(2017M613281XB)
通信作者：侯彦青(1982—)，男，博士、副教授，主要从事冶金过程多尺度仿真模拟方面的研究。hhouyanqing@163.com

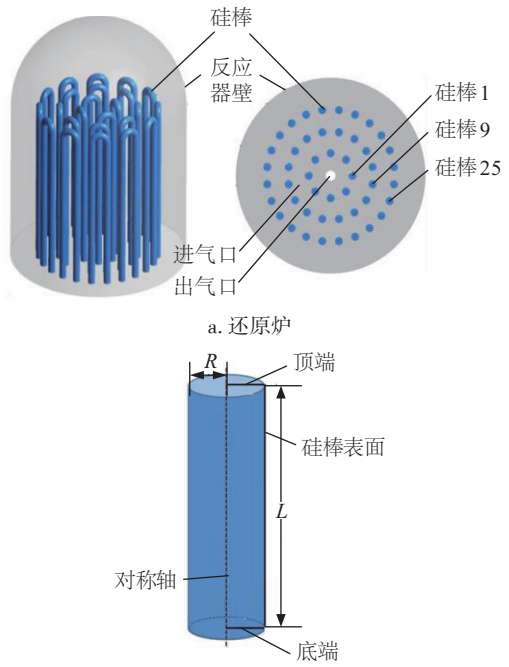


图1 模型几何机构

Fig. 1 Geometry of developed model

表1 模拟计算相关参数

Table 1 Parameter used in the simulation

参数	数值	参数	数值
硅棒半径R/cm	7	硅棒长度L/m	1
反应器半径R_w/cm	80	硅棒发射率ε_r	0.7
硅棒表面温度T_s/K	1373	器壁发射率ε	0.1~0.9
反应器壁温度T_w/K	373K		

1.2 直流焦耳加热模型

在稳态条件下，应用圆柱坐标，可得西门子还原炉中硅棒内部的热传递方程[8]：

$$\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left[k(T)r\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}r}\right]+q=0 \tag{1}$$

$$k(T)=1/\left(-2.2\times10^{-11}T^3+9\times10^{-8}T^2-10^{-5}T+0.014\right) \tag{2}$$

式中，r——硅棒内部径向位置，m；T——硅棒内部温度，K；k——硅热导率，K，与温度T关系如式(2)[9]；q——单位体积生成热，当硅棒用直流电加热时，q由电流产生的焦耳热提供，即：

$$q=\left|J(r)\right|^2/\sigma(T) \tag{3}$$

$$J(r)=\sigma(T)E \tag{4}$$

式中，$J(r)$——硅棒内部电流密度，A/m^2；E——硅棒内部电场强度，V/m；$\sigma(T)$——硅的电导率，S/m，是关于温度的函数，可表示为[10,11]：

$$\sigma(T)=1/\left[2\times10^{-5}\left(1+1.25\times10^{-3}(T-298.15)\right)\right] \tag{5}$$

对于直流电加热，电场强度可表示为：

$$E=\mathrm{d}V/\mathrm{d}z \tag{6}$$

因此，硅棒内部单位体积生成热可表示为：

$$q=(\mathrm{d}V/\mathrm{d}z)^2\sigma(T) \tag{7}$$

式中，$\mathrm{d}V/\mathrm{d}z$——硅棒轴向单位长度电压梯度。

将式(7)式代入式(1)中可得：

$$\frac{\mathrm{d}^2T}{\mathrm{d}r^2}+\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}r}+\frac{k'(T)}{k(T)}(\mathrm{d}T/\mathrm{d}r)^2+\frac{\sigma(T)(\mathrm{d}V/\mathrm{d}z)^2}{k(T)}=0 \tag{8}$$

式(8)边界条件为：

$$(\mathrm{d}T/\mathrm{d}r)|r=0=0 \tag{9}$$

$$-k(\mathrm{d}T/\mathrm{d}r)|r=R=q_c+q_{ra}+q_{re} \tag{10}$$

式中，q_c、q_{ra}和q_{re}——对流、辐射以及化学反应引起的硅棒表面热损失。

对流热损失为：

$$q_c=h(T_s-T_g) \tag{11}$$

式中，h——对流系数，其值20~30 W/(m^2·K)；T_s——硅棒表面温度，K；T_g——硅棒表面区域流体平均温度，为1047 K。

辐射热损失为：

$$q_{ra}=\xi\vartheta(T_s^4-T_w^4) \tag{12}$$

$$\xi=\varepsilon_r\varepsilon/\left[\varepsilon+\varepsilon_r(1-\varepsilon)R/R_w\right] \tag{13}$$

式中，ξ——硅棒表面与反应器壁之间辐射系数；$\xi(\varepsilon_r,\ \varepsilon)$——硅的发射率$\varepsilon_r$和反应器壁发射率$\varepsilon$的函数；$T_w$——反应器壁温度，K；$\vartheta$——斯蒂芬-波尔兹曼常数，其值为5.67×10^{-8} W·m^{-2}·K^{-4}；R——硅棒半径，m；R_w——反应器壁半径，m。

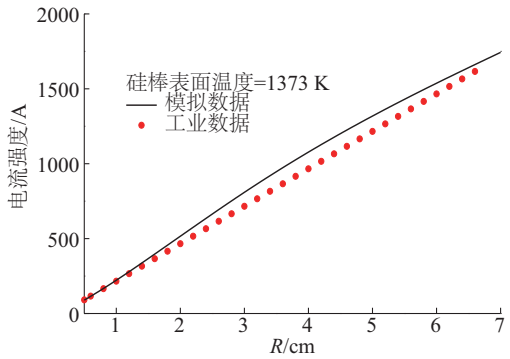
化学反应热为[3]：

$$q_{re}=2600\ \mathrm{W/m^2} \tag{14}$$

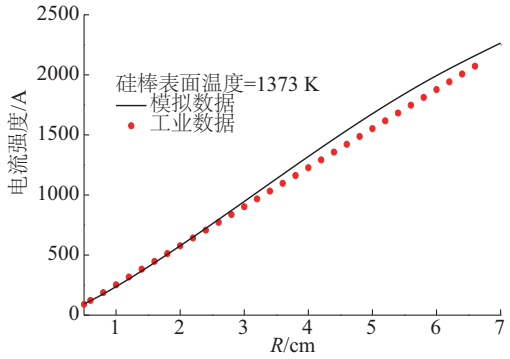
1.3 模拟的可靠性验证

为了验证模型结果的可靠性，将所建的电流强度模型计算结果与工业数据作对比，如图2所示。通常用相对误差计算计算值与实验值的一致性。

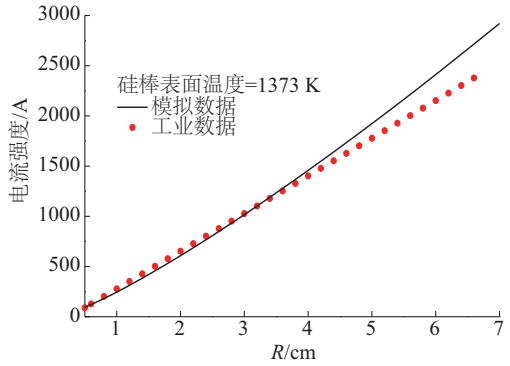
$$S^*=\pm\frac{100}{n}\sum_{i=1}^{n}\left|\frac{a_{i\text{-cal}}-a_{i\text{-measured}}}{a_{i\text{-measured}}}\right| \tag{15}$$



a. 内环



b. 中环



c. 外环

图2　电流强度模拟计算值与工业数据对比

Fig. 2　Comparison of current strength simulation values with industrial data

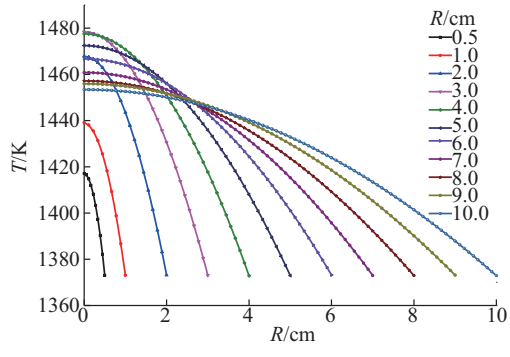
可见，本文的数值模拟结果与工业数据一致，内、中、外环上硅棒的电流强度最大误差分别为13.70%、9.35%、14.91%。计算得到内、中、外环上硅棒的电流强度误差分别为7.55%、5.55%、7.43%，说明模型可靠。

2　结果与分析

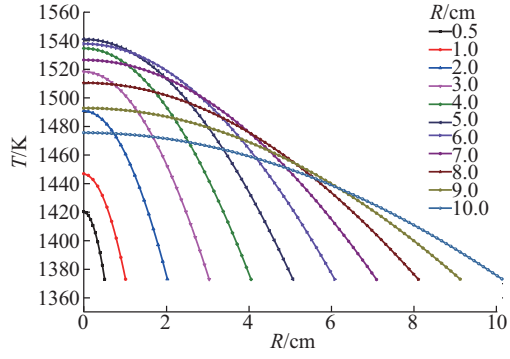
2.1　硅棒半径的影响

由图2可知，实际生产中硅棒最终生产半径约为7 cm，为了更系统化研究直流电加热过程，本文模拟研究的硅棒半径范围为0.5~10.0 cm。图3为西门子还原炉内、中和外环上硅棒径向温度分布图。硅棒表面温度维持在1373 K。硅棒内部温度有一个明显的温度梯度，硅棒中心温度远高于表面温度。对于位于内环上的硅棒，当硅棒半径增长小于3 cm时，随着硅棒半径的增大，硅棒中心温度增大；然而当硅棒半径大于3 cm时，随着硅棒半径的增大，其中心温度逐渐降低，见图3a。这是因为硅棒内部温度梯度是由硅棒表面向环境的热量损失决定的（包括对流和辐射传热），而相比对流传热，辐射传热为主要热损失，见图4。辐射热损失在硅棒半径为3 cm时达到最大值，再增大硅棒半径，辐射热损失降低（外环硅棒的阻挡，导致视角因子降低），而对流传热随着硅棒半径的增大微弱增加。因此对于内环硅棒，硅棒中心温度在3 cm时最大，见图3a。同样的原因，对于中环硅棒，其中心温度在半径为5 cm时达到最大，继续增大硅棒半径，温度梯度逐渐变得均匀，见图3b。

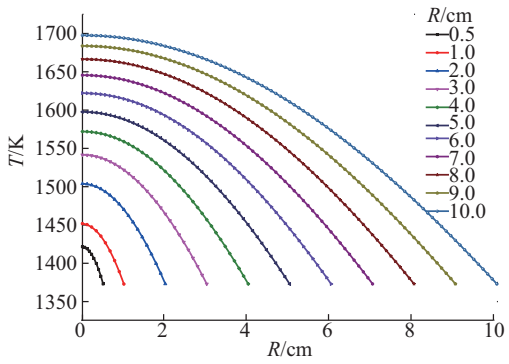
对于外环硅棒，由于无其他硅棒阻挡，其直接面向反应器壁面。因此，随着硅棒半径的增大，其辐射能耗逐渐增大，且其对流热损失也缓慢增大，见图4。所以随着硅棒半径的增大，加热的硅棒对



a. 内环



b. 中环



c. 外环

图3 不同半径下,内、中、外环硅棒径向温度分图
(反应器壁发射率为0.5)

Fig. 3 Radial temperature distribution in the silicon rod arranged in the inner, middle and outer ring with different radius(the wall emissivity is 0.5)

外界的热通量一直增大,从而导致其中心温度逐渐增大,即温度梯度逐渐增大,见图 3c。

对比图 3a、3b 和图 3c 可知,外环硅棒中心温度明显高于内环和中环硅棒,而中环硅棒中心温度明显高于内环硅棒,这是因为外环硅棒辐射能耗明显高于中环和内环硅棒,中环硅棒辐射能耗明显高于内环硅棒,且中环和外环硅棒对流热损失几乎一致,均大于内环硅棒对流热损失,见图 4。当硅棒半径较小时,不同环上硅棒的辐射热损失和对流热损失相差不大,从而导致不同环上的硅棒中心温度相差不大,如当硅棒半径为 1 cm 时,内、中和外环中心温度分别为 1439、1447 和 1452 K,见图 3。随着硅棒半径的增大,不同环上硅棒的辐射热损失和对流

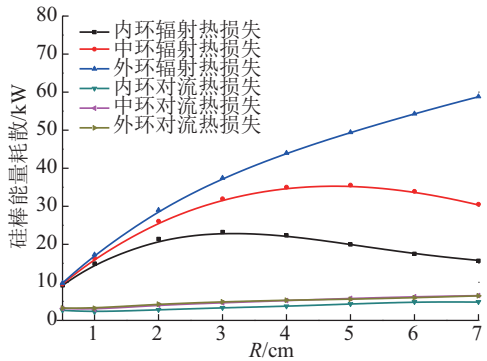


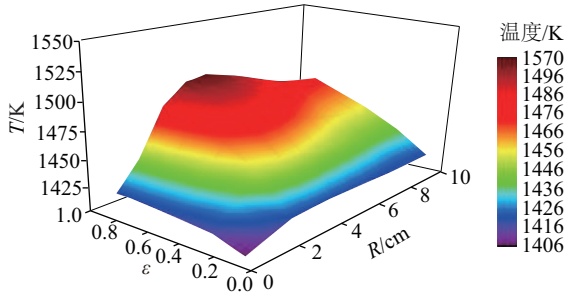
图4 内、中、外环硅棒能量耗散与硅棒半径的关系
(反应器壁发射率为0.5)

Fig. 4 Energy consumption versus rod radius for the silicon rods located in inner, middle and outer ring (the wall emissivity is 0.5)

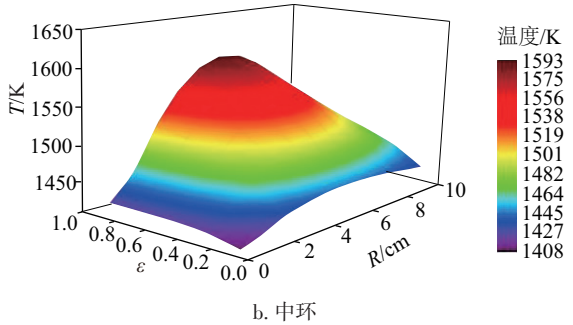
热损失的差值逐渐增大(图 4),导致不同环上的硅棒中心温度差值逐渐增大,如当硅棒半径为 4 和 5 cm 时,内外环硅棒中心温度分别为:1478、1535、1541 K 和 1473、1572、1598 K,如图 3 所示。

3.2 反应器壁发射率的影响

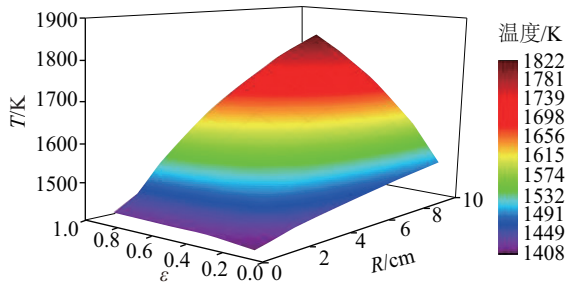
由图 5 可知,当半径一定时,随着反应器壁发射率的增大,各环硅棒中心温度逐渐上升。对于内环硅棒,当硅棒半径较小时(0.5~1.0 cm),辐射率对硅棒中心温度的影响不大,随着半径的增大,辐射率对硅棒中心温度的影响逐渐增大,并在半径为 3 cm 时影响最大,继续增大硅棒半径,辐射率对硅棒中心温度的影响又逐渐降低,见图 5a。如当辐射率分别为 0.3、0.5 和 0.7,硅棒半径为 1 cm 时,其中心温度分别为:1431、1439 和 1443 K,其温差在 5 K 以内;而当硅棒半径增大到 3 cm 时,其中心温度分别为:1457、1478、1494 K,温差大于 15 K。当硅棒半径继续增大到 7 cm 时,其中温度分别为 1444、1461 和 1475 K,温差小于 15 K。由图 4 可知,对于内环硅棒,辐射率在硅棒半径为 3 cm 时最大,通过前面分析得到在此半径下辐射率对中心温度的影响也最大。由此可知,辐射热损失越大,反应器壁的辐射率对硅棒内部温度的影响越强。同样的原因,对于中环硅棒,在硅棒半径为 5 cm 时,辐射率对硅棒中心温度的影响最强(图 5b),对于外环硅棒,硅棒半径最大时,辐射率对硅棒中心温度的影响最强(图 5c)。



a. 内环



b. 中环



c. 外环

图5　内、中、外环硅棒中心温度与反应器壁发射率的关系

Fig. 5　Radial center temperature with different wall emissivities for rods located in inner, middle and outer ring

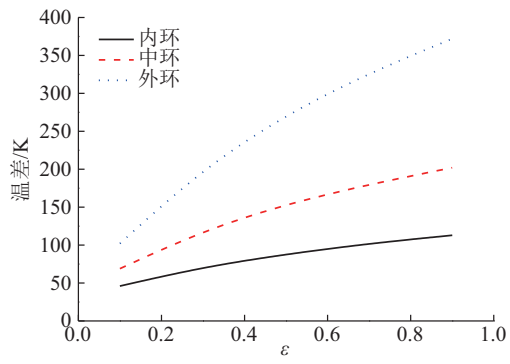


图6　内、中、外环硅棒内部温差与反应器壁发射率的关系(硅棒半径为7 cm)

Fig. 6　Temperature difference between rod center and surface as a function of wall emissivity (Radius of rod is 7 cm)

对比图 5a、图 5b 和图 5c 可知,对于外环硅棒,反应器壁辐射率对硅棒中心温度的影响最大,中环硅棒次之,内环硅棒最小。如当硅棒半径为 2 cm 时,反应器壁辐射率从 0.3 增至 0.7,外环硅棒中心温度从 1481 K 增至 1518 K,增加了 37 K;中环硅棒中心温度从 1470 K 增至 1504 K,增加了 34 K;内环硅棒中心温度从 1451 K 增至 1478 K,增加了 27 K。当硅棒中心温度超过硅的熔点(1687 K)时,硅棒会因热应力而发生断裂[2,3]。当前常用的西门子反应器壁为不锈钢,其辐射率为 0.5[12]。随着反应的进行,硅粉会沉积到反应器壁表面导致其辐射率增大[13]。由图 5c 可知,当反应器的器壁发射率约为 0.7 时,硅棒中心半径增大到 7 cm(当前多晶硅厂采用的最终沉积半径)时,其中心温度为 1700 K,超过了硅棒的熔点,易发生倒棒。因此,在生产过程中应对反应器壁及时进行清扫或磨光处理,以降低其辐射率,从而降低硅棒中心温度。

为进一步研究 24 对棒反应器中,反应器壁发射率对各环硅棒内部径向温度分布的影响,分析得到硅棒半径为 7 cm 时,内、中、外环硅棒内部温差与反应器发射率的关系,见图 6。由图 6 可知,随着反应器壁发射率的增大,各环硅棒内的径向温差增大。相比内环和中环硅棒,外环硅棒所受辐射率的影响更显著:当反应器壁发射率为 0.1 时,内环、中环和外环硅棒内部温差分别为 46、69 和 102 K;当发射率增大到 0.9 时,内环、中环和外环硅棒内部温差分别为 113、202 和 367 K。这是因为当反应器器壁的发射率越大,器壁所吸收的热量就越多,能反射回硅棒表面的热量减少,从而导致硅棒表面辐射热损失增大。根据式(10)可知,热总和需要保持不变,所以需提供的热量增多,从而使硅棒的径向温度梯度增大,最终导致硅棒内部温差增大。

4　结　论

本文基于 24 对棒西门子还原炉,建立三维西门子还原炉内硅棒直流电加热模型。通过研究反应器中内、中、外环上硅棒半径和反应器壁发射率对硅棒内部温度分布的影响,得到以下结论:

1)硅棒内部温度有一个明显的温度梯度,硅棒中心温度远高于表面温度。内环硅棒,辐射热损失在硅棒半径为 3 cm 时达到最大值;中环硅棒,其中心温度在半径为 5 cm 时达到最大;外环硅棒,其中心温度逐渐增大。

2)当半径一定时,随着反应器壁发射率的增大,各环硅棒中心温度逐渐上升。内环硅棒,半径为 3 cm 时辐射率对硅棒中心温度的影响最大;中环硅棒,半径为 5 cm 时影响最大;外环硅棒,硅棒半径最大时影响最大。

3)辐射热损失越大,反应器壁的辐射率对硅棒内部温度的影响越强。对于外环硅棒,反应器壁辐射率对硅棒中心温度的影响最大,中环硅棒次之,内环硅棒最小。

4)在生产过程中应对反应器壁及时进行清扫或磨光处理,以降低其辐射率,从而降低硅棒中心温度,使避免产生倒棒危险。

[参考文献]

[1] Nie Zhifeng, Xie Gang, Hou Yanqing, et al. Fluid dynamic simulations on polysilicon production [J]. Applied Mechanics & Materials, 2013, 444-445: 991—995.

[2] Nie Zhifeng, Xie Gang, Hou Yanqing, et al. Heat transport model of silicon rods in siemens reactor [J]. Journal of Synthetic Crystals, 2015, 44(2): 497—502.

[3] Coso G D. Chémical decomposition of silanes for the production of solar grade silicon [D]. Madrid: Universidad Politécnica de Madrid Metallurgical, 2010.

[4] Li M, Mitrasinovic A, Utigard T, et al. Silicon rod heat generation and current distribution [J]. Journal of Crystal Growth, 2009, 312(1): 141—145.

[5] Coso G D, Tobias I, Canizo C, et al. Temperature homogeneity of polysilicon rods in a siemens reactor [J]. Journal of Crystal Growth, 2007, 299(1): 165—170.

[6] Coso G D, Canizo C D, Tobias I, et al. Increase on siemens reactor throughput by tailoring temperature profile of polysilicon rods [A]. Spanish Conference on Electron Devices [C], Madrid, Spain, 2007.

[7] Nie Zhifeng, Xie Gang, Hou Yanqing, et al. Direct current heating model for the siemens reactor [A]. 3rd International Conference on Chemical Engineering [C], Zhuhai, China, 2014.

[8] Chapman A J. Heat transfer (Fourth Edition) [M]. New York: Macmillan, 1984.

[9] Yaws C L, Lutwack R, Dickens L L. Semiconductor industry silicon: Physical and thermodynamic properties [J]. Solid State Technology, 1981, 24(1): 87—92.

[10] John Y W. The electrical properties of polycrystalline silicon films [J]. Journal of Applied Physics, 1975, 46 (12): 5247—5254.

[11] Grove S. Physics and Technology of Semiconductor Devices [M]. New York: Wiley, 1967.

[12] Nie Zhifeng, Xie Gang, Hou Yanqing, et al. Numerical simulation of radiation exchange in Siemens CVD reactor [J]. Journal of Synthetic Crystals, 2014, 43(7): 1774—1780.

[13] Huang Zheqing, Liu Chunjiang, Yuan Xigang. Numerical simulation of flow and heat transfer in a novel polysilicon reduction furnace [J]. CIESC Journal, 2013, 64(2): 484—489.

DIRECT-CURRENT ELECTRIC HEATING MODEL OF SILICON ROD IN POLYSILICON REDUCTION FURNACE

Fang Wenbao[1], Zhou Yangmin[2], Nie Zhifeng[1], Li Yaguang[2], Hou Yanqing[1*]

(1. *State Key Laboratory of Complex Nonferrous Metal Resources Clean Utilization, Kunming University of Science and Technology, Kunming* 650093, *China*;

2. *Faculty of Metallurgical and Energy Engineering, Kunming University of Science and Technology, Kunming* 650093, *China*)

Abstract: Considering the effect of heat dissipation (convection, radiation and chemical reaction), the Joule heating model by direct current (DC) in a 48-rod Siemens reactor have been established. The influence of the rod location, rod radius and wall emissivity on thermal distribution have been investigated. The results show that with the increase of the radius of silicon rod, the center temperature of silicon rod located in the inner ring and the middle ring increases firstly and then decreases, and the radial thermal distribution of silicon rod in the outer ring is more uneven. As the emissivity of the reactor wall increases, the center temperature of silicon rod increases gradually. With the increase of radiant heat loss, the influence of the reactor wall emissivity on the internal temperature of the silicon rod is stronger.

Keywords: Siemens reactor; direct current; emissivity; thermal distribution