

Numerical Study on Coupling Mechanism of Chemical Reaction and Flow in Polysilicon Reduction Furnace

Zhengyun Wang Wancun Li Keping Gao Dong Wang

Xinjiang Jingnuo New Energy Industry Development Co., Ltd., Huyanghe, Xinjiang, 834034, China

Abstract

The modified Siemens process remains the dominant technology in polycrystalline silicon production. As the core reactor, the reduction furnace exhibits strong coupling effects between the thermal decomposition of silane or trichlorosilane and chemical vapor deposition reactions, fluid dynamics, and heat/mass transfer processes. These interactions directly determine the deposition rate, product purity, and energy consumption. Given the complex multiphysics interactions within the furnace, experimental measurements cannot fully reveal the underlying mechanisms, making numerical simulation an essential tool for studying this coupling. This paper systematically analyzes the coupling characteristics between chemical reactions and fluid flow in polycrystalline silicon reduction furnaces. It reviews fundamental theories and key models for numerical simulation, explores core coupling mechanisms involving flow velocity distribution, temperature fields, and reaction rates, summarizes optimization strategies for simulation methods, validates simulation effectiveness through practical case studies, and ultimately outlines future research directions to provide theoretical support for furnace structure optimization and process parameter control.

Keywords

Polysilicon reduction furnace; Chemical reaction; Flow coupling; Numerical simulation; Mass and heat transfer; Deposition characteristics

多晶硅还原炉内化学反应与流动耦合机制的数值研究

王正云 李万存 高科平 王东

新疆晶诺新能源产业发展有限公司, 中国·新疆 胡杨河 834034

摘要

改良西门子法是多晶硅工业生产的主流技术, 还原炉作为核心反应装置, 其内部硅烷或三氯氢硅的热分解与化学气相沉积反应, 与流体流动、传热传质过程存在强烈耦合效应, 直接决定多晶硅沉积速率、产品纯度及能耗水平。由于还原炉内耦合过程涉及多物理场相互作用, 实验测量难以全面揭示其内在规律, 数值模拟成为研究该耦合机制的有效手段。本文系统分析多晶硅还原炉内化学反应与流动的耦合特性, 梳理数值模拟的基础理论与关键模型, 深入探讨流速分布、温度场与反应速率的核心耦合机制, 总结模拟方法的优化策略, 结合实践案例验证模拟的有效性, 最后展望未来发展方向, 为还原炉结构优化与工艺参数调控提供理论支撑。

关键词

多晶硅还原炉; 化学反应; 流动耦合; 数值模拟; 传质传热; 沉积特性

1 引言

多晶硅还原炉的内部空间中, 原料气体于高温硅芯的表面界面处, 发生热分解与化学气相沉积的双重反应过程, 其反应产物为多晶硅。反应过程与炉内流体的流动行为、传热传质的动态过程之间, 存在着紧密的耦合关联。流速的空间分布形态、温度梯度的变化特征等流动特性参数, 对反应物的传输效率以及反应环境的稳定性构成显著影响。化学反应所释放或吸收的热量, 又会对炉内的流场结构与温度场分布产生反向作用。这种复杂的多场耦合效应, 导致炉内多晶

硅沉积过程中出现不均匀性等技术问题。该问题直接制约着产品质量的提升空间与能耗优化的实现路径。实验研究方法, 受限于高温高压的极端环境条件与现有测量技术的精度瓶颈, 难以全面捕捉炉内全域的耦合细节信息。数值模拟技术, 凭借其具备的全域可视化能力与参数可控性的核心优势, 成为揭示耦合机制本质、优化炉内工况参数的关键技术路径。相关研究工作, 对推动多晶硅产业向高质量发展方向演进, 具有不可忽视的重要现实意义。

2 多晶硅还原炉内化学反应与流动的耦合特性

2.1 耦合过程的核心特征

多晶硅还原炉耦合过程的核心特征在于“流动-传质-反应-传热”的链式关联。原料气体的流动状态, 此一炉内

【作者简介】王正云(1987—), 男, 中国甘肃武威人, 硕士, 高级工程师, 从事多晶硅生产方面研究。

动力学基底参数, 决定反应物向硅芯表面的传输速率。流速过低将引致反应物供应匮乏。流速过高则易触发气流对硅芯表面的冲刷作用, 动摇沉积稳定性。作为反应物与产物输运纽带的传质过程, 其效率被流动场分布直接调控, 此调控效应进一步波及反应速率的空间分布格局。化学反应的热效应可重构炉内温度场。形成局部温度梯度。温度变化会反作用于流动特性。引发由气流密度差异驱动的自然对流。温度梯度亦会直接调制反应速率常数。强化耦合效应。硅芯生长过程中几何形态的变迁, 会改造流道结构。改造后的流道结构会扰动流速分布与反应界面的传质条件。构成动态耦合循环。

2.2 耦合过程的关键影响因素

影响还原炉内耦合过程的关键因素, 其分类框架严格划分为工艺参数与结构参数两大范畴: 进气流量, 作为工艺参数的核心变量之一, 通过对炉内主流速度场与反应物浓度梯度分布的直接规制, 实现对传质效能与反应进展深度的双重扰动; 反应温度, 不仅构成化学反应得以启动的先决性边界条件, 其空间分布的均一性程度更对反应速率的区域异质性施加调控, 从而进一步形塑多晶硅沉积的空间均一性特征; 不同配比的硅烷/三氯氢硅与氢气混合体系, 其进气组分比例通过对反应物浓度水平与反应路径的定向定义, 借助反应驱动力的动态调整, 完成对耦合过程强度与方向的系统性重塑。还原炉的几何尺度与硅芯的空间排布范式, 作为结构参数的关键构成, 通过对流道形态的根本性界定, 实现对气流运动轨迹与速度场分布的深度干预; 气体分布器的构型设计, 则通过对进气初始流速分布的精准调控, 介入反应物在炉内的扩散与混合进程, 最终完成对耦合过程初始状态的结构重置。

3 多晶硅还原炉内核心耦合机制

3.1 流动与传质 – 反应的耦合机制

流动、传质与反应过程的耦合作用机制, 其核心构成要素体现为流速分布对反应物的输运及反应进程的调节功能, 以及化学反应对流体动力学特性的反向影响。炉内的流速场配置, 决定了反应物向硅芯表面迁移的扩散速率, 在硅芯外围催生了边界层结构, 该边界层的厚度伴随流速的提升而呈现缩减趋势, 这一现象可强化反应物的传质效能, 进而提升表面反应的速率; 但流速过高时, 边界层内反应物的浓度会出现急剧下降, 同时可能诱发气流的湍动程度加剧, 导致反应物混合状态的不均匀性, 最终对反应的稳定性产生负面影响。^[1]另一方面, 化学反应过程会消耗反应物并生成新的产物, 这一变化会导致反应界面周边的气体组分与密度发生改变, 形成局部的气流压力差, 进而触发二次流动现象, 这种二次流动会进一步调整炉内的流速分布与传质环境, 最终形成“流动 - 传质 - 反应”的闭环耦合系统。

3.2 温度场与流动 – 反应的耦合机制

还原炉内最显著的耦合模态体现为温度场与流动 - 反

应过程的双向互馈耦合。化学反应的热效应构成温度场构建的核心热源输入; 硅芯外表面发生的化学沉积反应所释放的热量, 会引发该局部区域的温度抬升, 进而塑造以硅芯为几何中心的空间温度梯度分布。温度梯度的存在, 将导致炉内气体介质的密度产生空间异质性; 由密度差驱动的浮力效应, 会诱发气体的自然对流运动; 自然对流与外部施加的强制对流形成动力学叠加, 共同重构炉内的流速场分布特征。温度场对反应速率的直接调控作用不可忽视; 温度的升高会显著增强反应速率常数的数值, 从而加速沉积反应的动力学进程, 但局部温度的过度升高会引发副反应的激化, 进而对最终产品的纯度指标产生负面影响。流速场的分布特征通过对对流换热效率的非线性调制, 会反向作用于温度场的空间分布格局; 高速气流对对流换热强度的强化效应, 会降低特定局部区域的温度水平, 进而对反应速率产生抑制性影响。上述所有过程共同构成“温度 - 流动 - 反应”的动态耦合平衡系统。^[2]

3.3 硅芯生长与流动 – 反应的动态耦合机制

还原炉内耦合机制的关键构成单元, 贯穿多晶硅生产全流程的, 是硅芯生长进程与流动 - 反应体系的动态耦合关联。硅芯直径随沉积反应的持续而渐次扩张, 这一扩张引发流道截面积的收缩, 收缩继而推升流体流速。流速的提升, 会对传质过程形成强化效应, 此强化效应将进一步助推沉积速率的上扬。但硅芯生长的空间不均匀性, 会导致流道的形态特征产生空间维度的差异性。这种差异性, 会让流速的空间分布格局趋向复杂化。复杂化的流速分布, 又会加剧沉积过程的不均匀性程度。硅芯生长进程中几何尺度的变迁, 会对其自身的导热属性以及辐射换热的表面积产生改变作用。这种改变, 会对炉内温度场的分布状态形成扰动。温度场分布的扰动, 会对反应速率的空间分布模式施加调控影响。调控影响的结果, 是对硅芯的生长速率与生长均匀性产生作用。这种动态耦合关联, 会驱动炉内的工况状态随时间维度持续发生变动。变动的存在, 增大了多晶硅沉积过程的调控难度系数。

4 耦合机制数值模拟的优化策略

4.1 模型优化与修正

耦合机制模拟精度的提升, 其核心策略在于模型的优化与修正——这一修正与优化, 必须聚焦于反应动力学模型及辐射模型这两个关键维度。针对硅烷或三氯氢硅构成的不同原料体系, 反应动力学参数的修正, 需以实验数据为基准, 此基准的运用, 要求同时纳入温度与组分浓度对反应速率的影响因子, 以规避通用模型所引发的系统性误差。辐射模型的优化, 需锚定还原炉内高温环境的固有特征, 对辐射特性参数进行精细化调整, 调整过程中, 必须考量硅芯表面发射率随温度及表面状态的动态演变; 同时, 炉壁与硅芯之间的辐射换热路径, 必须获得精确的数学描述, 这一描述的精确性, 将直接决定温度场模拟精度的最终提升幅度。流动、传

质、反应与传热模型之间的关联强度，需要通过引入相间耦合系数修正项予以增强，这一增强操作的目标，是确保耦合过程描述的绝对准确性。

4.2 网格划分与数值算法优化

网格划分与数值算法的优化操作，在同步提升模拟过程的收敛性、模拟结果的精度这两个维度的同时，可实现计算成本的有效降低。还原炉内流场空间分布特征与反应空间分布特征，构成了网格划分的核心依据，在这一依据下，针对硅芯周边区域、气体分布器等关键区域，非结构化网格的应用可实现网格加密，此加密操作的直接目的，是确保边界层内部的流速梯度与浓度变化能够被准确捕捉。炉内非关键区域的网格，需进行适度简化处理，以达成计算精度与计算效率之间的动态平衡。数值算法的选择策略，包含三个关键维度：第一维度，耦合求解器的采用，其功能是对流动方程、传热方程以及组分传输方程进行同步求解，这一求解方式的优势，在于提升耦合过程模拟的时效性；第二维度，对流项的离散格式选择，高阶离散格式的应用，可有效减少数值扩散现象，进而实现流场与浓度场模拟精度的提升；第三维度，松弛因子与收敛判据的调整操作，此操作的核心作用，是优化计算收敛速度，同时确保模拟结果的稳定性。^[3]

4.3 多尺度耦合模拟方法

还原炉内跨越宏观流场至微观表面反应的多尺度特性，其耦合机制的全面揭示，可通过多尺度耦合模拟方法达成。宏观尺度上，对炉内整体流动、传热传质及宏观反应分布的模拟，能够获取全域工况参数。微观尺度上，聚焦硅芯表面反应动力学过程，模拟表面吸附、分解与沉积的微观机制，可得到表面反应速率与覆盖度等关键参数。通过构建宏观

尺度间的关联模型，将微观反应参数反馈至宏观模拟，实现宏微观耦合模拟。此举既保障模拟的全域性，又提升表面反应过程描述的精准性。为深入理解耦合机制提供更全面的理论支撑。

5 结语

多晶硅还原炉内部化学反应与流体运动之间的耦合机制，作为一个涵盖动量传递、质量输运、化学反应动力学及热能传递的复杂多物理场交互系统，其核心本质在于三重双向耦合的同时存在：流体运动与质量输运 - 化学反应过程的耦合、温度分布与流体运动 - 化学反应的耦合、硅芯生长过程与流体运动 - 化学反应的耦合。揭示这一耦合机制的有效途径，是通过数值模拟技术的应用。通过对数学模型的参数优化、计算网格的自适应调整与求解算法的改进、以及跨尺度耦合模拟方法的实施等策略组合，模拟结果的精度能够得到显著增强。实践层面的应用数据表明，基于数值模拟结果的设备结构优化与工艺操作参数的精准调控，可实现多晶硅沉积均匀性的有效改善。同时提升沉积速率。并降低生产过程中的能源消耗。

参考文献

- [1] 赵程文轩,徐燕燕,侯雨,等. “双碳”目标下多晶硅生产节能优化研究 [J]. 陕西煤炭, 2026, 45 (01): 157-162. DOI:10.20120/j.cnki.issn.1671-749x.2026.0129.
- [2] 王俊华,王阳,赵云浩,等. 电子级芯片用多晶还原工序质量管控要点 [J]. 中国集成电路, 2025, 34 (05): 80-84.
- [3] 石何武,张升学,杨永亮. 多晶硅还原生产系统节能提质探讨 [J]. 绿色矿冶, 2025, 41 (01): 55-59+70. DOI:10.19610/j.cnki.cn10-1873/tf.2025.01.009.