

一方向性凝固法による熱流動解析の試み：シリコン多結晶について

中野, 智
九州大学応用力学研究所技術室

<https://hdl.handle.net/2324/17824>

出版情報：九州大学応用力学研究所技術職員技術レポート. 7, pp.99-109, 2006-03. Research Institute for Applied Mechanics, Kyushu University

バージョン：

権利関係：

一方向性凝固法による熱流動解析の試み

-シリコン多結晶について-

応用力学研究所技術室 中野 智

1. はじめに

化石燃料の消費が地球環境に様々な問題を引き起こしている今、地球環境の保全に対して様々な利点をもつ太陽光発電は現在注目されている発電方法である。この太陽光発電は幅広い応用分野で活用されている。有名なところではソーラーカーや住宅用太陽光発電システムであるが、他にも電卓や時計などの民生機器、各種道路標識や街路灯などの道路管理機器、太陽光発電所などのエネルギー供給施設、衛星発電装置や気象観測装置の電源などの宇宙発電などがある。表1に示すように、この太陽光発電に使用される太陽電池は使用する材料の種類によって異なる。現在最も使用されているものは単結晶あるいは多結晶のシリコン基板を用いたタイプであり、他のタイプに比べて発電効率が優れているのが特徴である。この2つの結晶を材料として使用する太陽電池には次のような特徴がある。単結晶シリコン太陽電池は、発電効率は高いが高価なので量産が困難であるという欠点がある。一方、多結晶シリコン太陽電池は、単結晶シリコン太陽電池と比較した場合、発電効率は低下するが安価なため量産が容易だという特徴がある。製造法は、単結晶シリコン太陽電池の場合、チョクラルスキー法を代表とする引き上げ法を用いる。これに対して多結晶シリコン太陽電池の場合、鋳型に融液を流し込み凝固させて製造する一方向性凝固法と呼ばれる方法を用いる。この一方向性凝固法において結晶の成長過程を解析することは、より高効率な太陽電池を作成するために重要である。

今回の試みでは、多結晶シリコン太陽電池を作る場合の方法である一方向性凝固法を用いる。坩堝内融液を加熱するために使用するヒーターは、

- (ア) 上部ヒーターと下部ヒーターを使用した場合
- (イ) 天井部ヒーターと上部ヒーターを使用した場合
- (ウ) 天井部ヒーターと下部ヒーターを使用した場合

という3つの場合で行う。そしてそれぞれの場合においてヒーターに割り当てる電力の割合を変化させた時の坩堝内融液の温度分布と対流の状態を解析・考察することを目的としている。

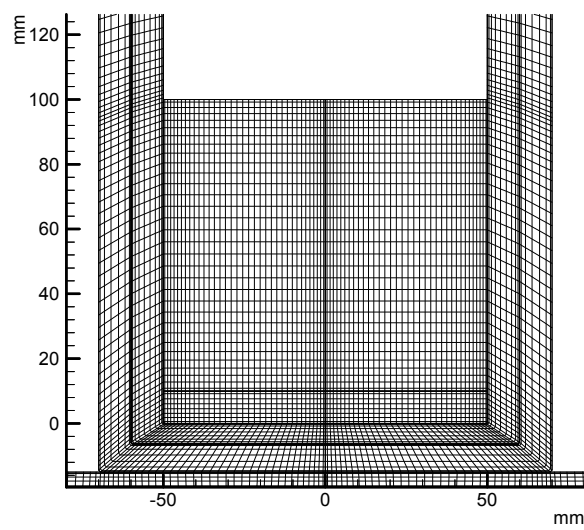
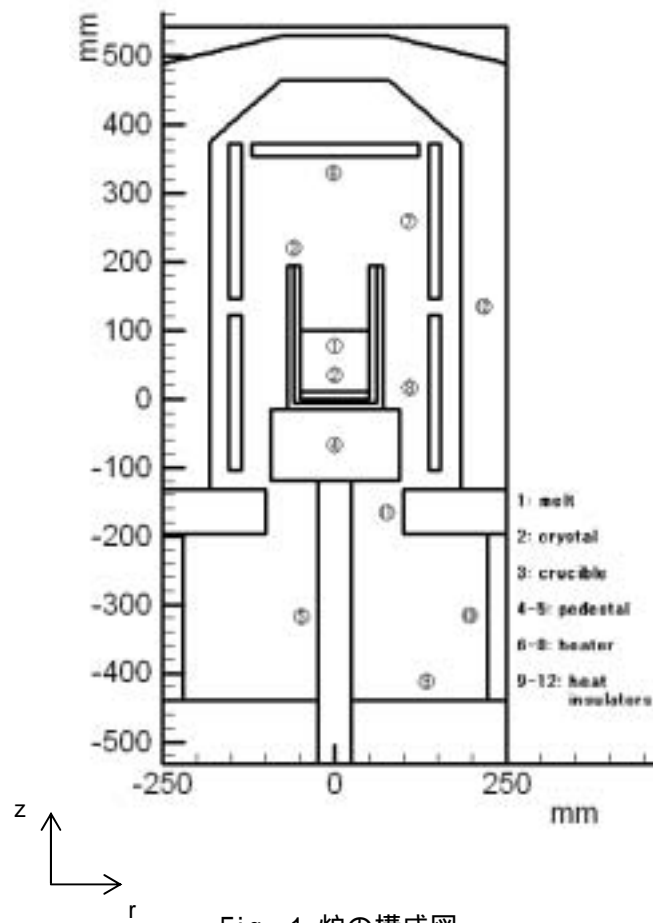
今回は(ア)、(イ)の2つの場合において、それぞれ上部ヒーターと下部ヒーター、天井部ヒーターと上部ヒーターに割り当てる電力の割合を0%と100%から始め、それぞれ10%ずつ変化させた場合の融液の温度分布の変化と対流の変化を解析する。

シリコン系	結晶系	単結晶シリコン太陽電池
		多結晶シリコン太陽電池
	非晶質系	アモルファスシリコン太陽電池
化合物半導体系	結晶系	単結晶化合物半導体太陽電池
		多結晶化合物半導体太陽電池

表 1 太陽電池の種類

2. 計算モデル

2.1 一方向性凝固法の2次元モデル



一方向性凝固法に使用する小型の炉の構成図をFig. 1に示す。炉の形状は軸対称を仮定している。炉の構成はFig. 1に示すように12のブロックにわけられており、それぞれグリッドで区切られている。グリッドを切った坩堝内図をFig. 2に示す。計算をより正確に行うために境界付近は、グリッドをより細かく切ることが必要になってくる。

今回使用するヒーターは、 H_1 、 H_2 、 H_3 の3箇所のヒーターで、 H_1 を天井部ヒーター、 H_2 を上部ヒーター、 H_3 を下部ヒーターと呼ぶことにする。また、 S の結晶の界面はz軸に垂直な平面の形状で固定したままとする。

2.2 支配方程式

この炉内の熱伝達のグローバルモデルは、坩堝内にある融液対流による熱伝達や炉内を構成しているすべてのものの熱伝達、輻射による熱伝達を含めて考慮してある。また、炉内のガスの流れの効果は無視することとし、融液は非圧縮の状態下と仮定して考えている。

この条件下において、坩堝内の融液の熱の流れに対する連続の式、運動方程式、エネルギー方程式はそれぞれ式(1)、(2)、(3)に示す。

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0, \quad (1)$$

$$\rho \vec{V} \cdot \nabla \vec{V} = -\nabla \rho + \nabla \cdot [\mu (\nabla \vec{V} + \nabla \vec{V}^T)] - \rho \vec{g} \beta (T - T_0), \quad (2)$$

$$\rho c \vec{V} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (\lambda \nabla T), \quad (3)$$

- \vec{V} : 速度 (m/s)
- ρ : 密度 (kg/m^3)
- μ : 粘性係数 ($kg/m \cdot s$)
- \vec{g} : 重力加速度 (m/s^2)
- β : 膨張係数 ($1/K$)
- T : 融液温度 (K)
- T_0 : 基準温度 (融点) (K)
- c : 熱容量 ($J/kg \cdot K$)
- λ : 熱伝導率 ($W/m \cdot K$)

輻射による熱伝達は、Fig. 1 炉内の熱伝達の主なるものである。炉内の輻射に関する構造物での熱伝達のモデル化がグローバルシミュレーションで最も重要なものの1つである。炉内構造物の表面温度 $T(\vec{x})$ と熱流束 $q(\vec{x})$ の関係式を式(4)に示す。

$$\begin{aligned} \frac{q(\vec{x})}{\varepsilon(\vec{x})} &= \int_{\vec{x}' \in \partial V} K(\vec{x}, \vec{x}') \frac{1 - \varepsilon(\vec{x}')}{\varepsilon(\vec{x}')} q(\vec{x}') dS' \\ &= \sigma T^4(\vec{x}) - \int_{\vec{x}' \in \partial V} K(\vec{x}, \vec{x}') \sigma T^4(\vec{x}') dS', \end{aligned} \quad (4)$$

- $q(\vec{x})$: 熱流束 (W/m^2)
- $\varepsilon(\vec{x})$: 放射率
- $K(\vec{x}, \vec{x}')$: 形態係数
- σ : ボルツマン定数 ($W/m^2 \cdot K^4$)
- $T(\vec{x})$: 表面温度 (K)

式(5)に示す $K(\bar{x}, \bar{x}')$ は \bar{x} と \bar{x}' 間の形態係数である。 \bar{x} と \bar{x}' は炉内構造物の表面上の極小要素である。 dS と dS' は \bar{x} と \bar{x}' の極小の面積を表す。 ∂V は炉内輻射構造物の表面積を表している。 dS と dS' がお互い見えている場合、 $K(\bar{x}, \bar{x}')$ は下記方程式を満たす。 \bar{n} と \bar{n}' はそれぞれ dS と dS' からの単位法線ベクトルである。

$$K(\bar{x}, \bar{x}') = - \frac{[(\bar{x} - \bar{x}') \cdot \bar{n}][(\bar{x} - \bar{x}') \cdot \bar{n}']}{\pi[(\bar{x} - \bar{x}') \cdot (\bar{x} - \bar{x}')]^2}, \quad (5)$$

dS と dS' がお互い見えていない場合、式(6)のようになる。

$$K(\bar{x}, \bar{x}') = 0 \quad . \quad (6)$$

2.3 計算の実行手順

グローバルモデルは Fig. 1 のように 1 2 のブロックで構成されているが、それぞれのブロックでの温度場の反復計算と、それらを結合した全体での温度場の反復計算とから成り立っている。このグローバルシミュレーターを用いて計算を行う場合、いくつかのパラメータが必要である。炉の形状、炉内を構成しているものそれぞれの物性値、結晶の融点の温度である。ヒーターの電力は決まっておらず、グローバル計算の反復の結果で決まっていく。

グローバル計算の反復の主な過程を以下に示す。そして Flow chart を Fig. 3 に、グローバル計算を行った結果の炉全体の温度分布図を Fig. 4 に示す。

- 1) 各種パラメータ、グリッド、炉の形状を読みこむ。
- 2) 初期値として融液と結晶の固液界面の位置、融液内と結晶内それぞれの速度、圧力、温度を読み込む。
- 3) 融液内の流れ、温度場、圧力を計算する。
- 4) 結晶の温度場を計算する。
- 5) ヒーターや断熱材など炉内の他のすべての構成物の温度場を計算する。
- 6) 隣接するブロックの境界とすべての輻射表面の温度場を更新する。
- 7) 輻射熱を計算する。
- 8) すべての輻射表面を更新する。
- 9) グローバル計算が収束しているかどうかチェックし、もし収束していなかったら 3) に戻って再び反復計算を行う。収束していたら 10) へ。
- 10) ヒーターパワーが収束しているかチェックする。もし収束していなかったら修正して 3) に戻って再び反復計算を行う。収束していたら 11) へ。
- 11) データを出力。

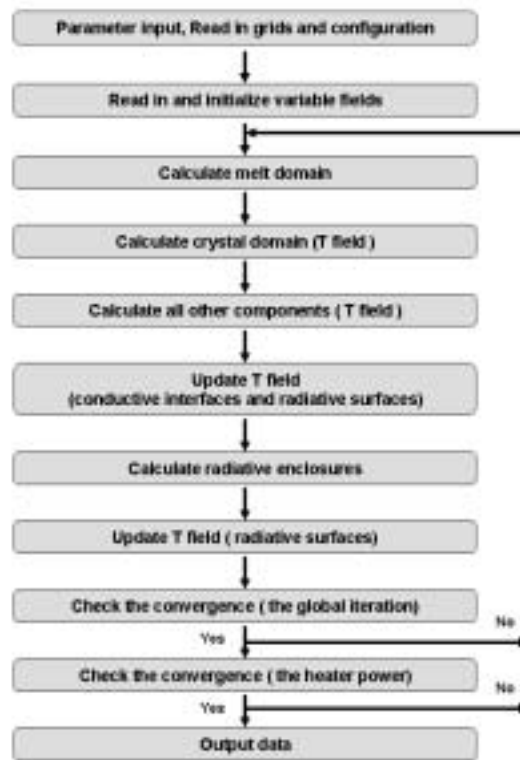


Fig. 3 Flow chart

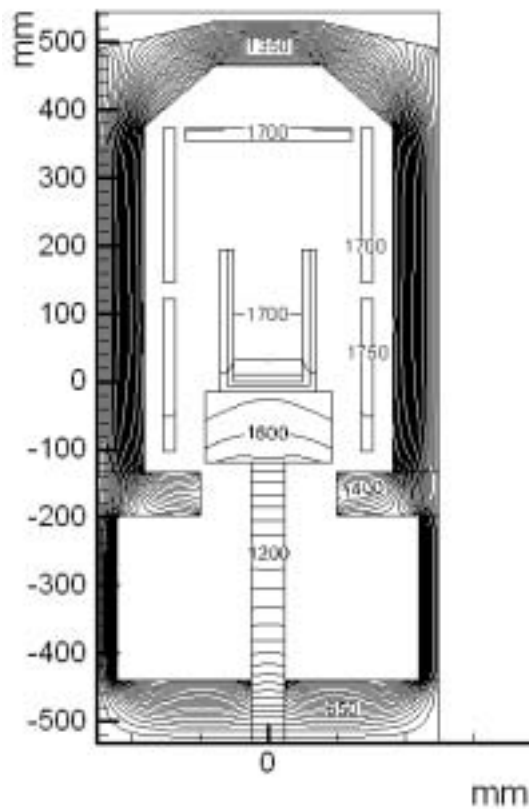


Fig. 4 グローバル計算を行った炉全体の温度分布図

3. 結果

3.1 融液の温度分布とヒーター電力

途中経過ではあるが結果および考察を以下に示す。融液表面の温度と(ア)の場合の上部ヒーターに加えた電力の割合を示した図を Fig. 5 に示す。この図は、熱伝導のみを考慮した、すなわち対流を無視した場合の結果と対流も考慮した場合の結果を示している。両方とも上部ヒーターに加えた電力の割合が増加するのに従って、融液表面の温度が増加していることがわかる。次に融液表面の温度と(イ)の場合の天井部ヒーターに加えた電力の割合を示した図を Fig. 6 に示す。こちらは天井部ヒーターに加えた電力の割合が30%のところまでは融液表面の温度に変化がない。これは天井部ヒーターから融液までは距離があるため、天井部ヒーターの影響が出にくいためだと考えられる。

Fig. 7 は、(ア)の場合の上部ヒーターと下部ヒーターの電力をそれぞれ増加減少させたときの融液の温度分布図である。上部ヒーターに必要な電力の割合が増加するほど、下部ヒーターに必要な電力の割合は減少する。そして融液表面の温度が高くなり、融液の温度分布を表している等温線が、融液表面の面に対して平坦な形状になり、温度勾配も大きくなっていることがわかる。

Fig. 8 は、(イ)の場合の天井部ヒーターと上部ヒーターの電力をそれぞれ増加減少させたときの融液の温度分布図である。天井部ヒーターに必要な電力の割合が増加するほど、上部ヒーターに必要な電力の割合は減少する。(イ)の場合、天井部ヒーターに加えた電力の割合が30%のところまでは融液表面の温度も温度勾配もほとんど変化がなく、30%を超えると融液表面の温度は上昇をはじめ、温度勾配もゆるやかに大きくなっていることがわかる。

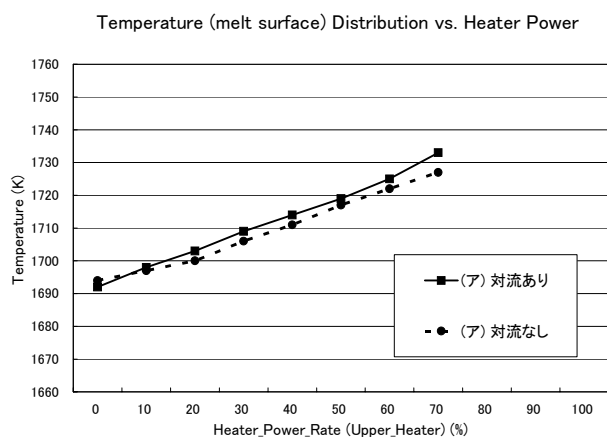


Fig. 5 融液表面の温度と(ア)の場合の上部ヒーターに加えた電力の割合の関係

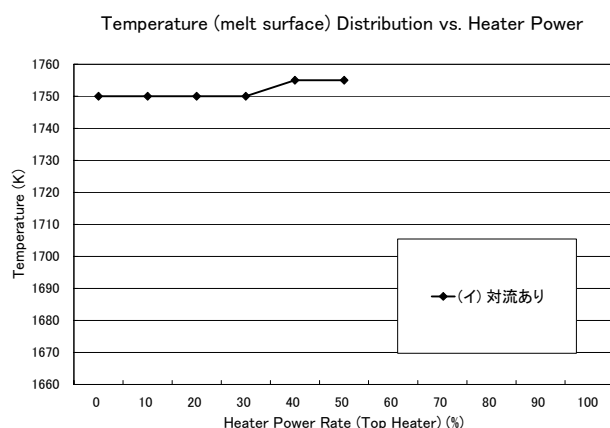
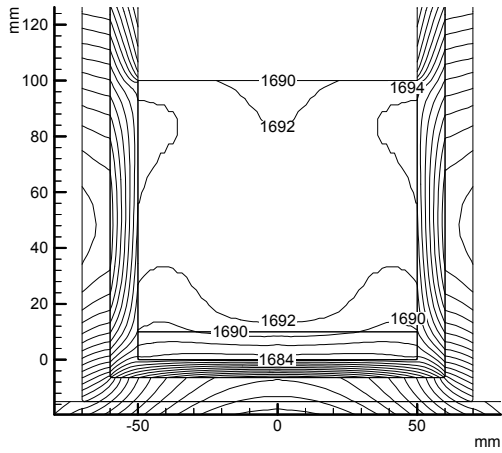


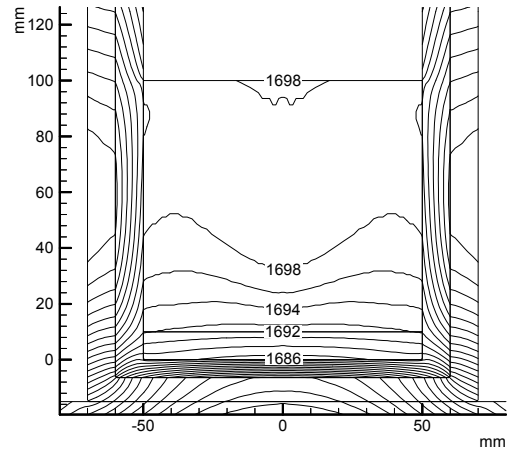
Fig. 6 融液表面の温度と(イ)の場合の天井部ヒーターに加えた電力の割合の関係

3.2 融液の対流の変化とヒーター電力

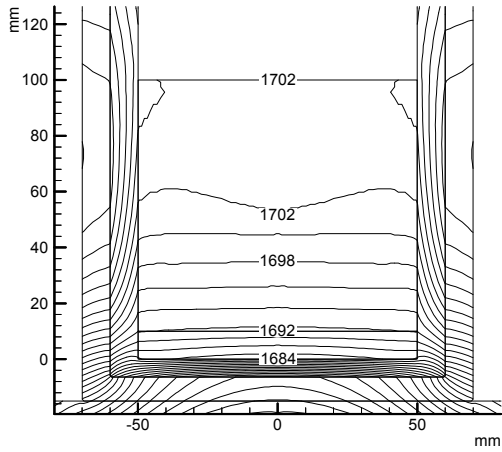
3.1 同様、途中経過ではあるが結果および考察を以下に示す。Fig. 9 は、Fig. 7 と同様に上部ヒーターと下部ヒーターの電力をそれぞれ増加減少させたときの融液の対流の状態を示した図である。上部ヒーターに必要な電力の割合が増加し、下部ヒーターに必要な電力の割合が減少すると、対流が小さくなっていくことがわかる。対流は、融液中の温度分布や濃度分布によって密度が不均一となり、この密度差によって起こると思われる。Fig. 7(a)を見ると、x 軸に平行な融液表面近辺と融液底面近辺においてそれぞれの温度勾配が大きく、y 軸に平行な融液中央近辺の温度勾配が小さいために Fig. 9(a') のように対流が強くなっていることがわかる。Fig. 10 は、Fig. 8 と同様に天井部ヒ-



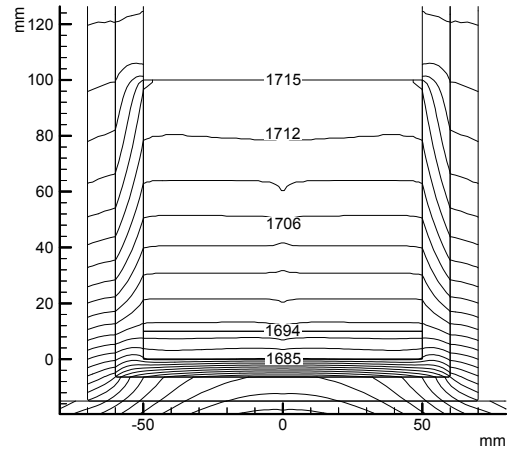
(a) 上部ヒーター:下部ヒーター=0(%) : 100(%)



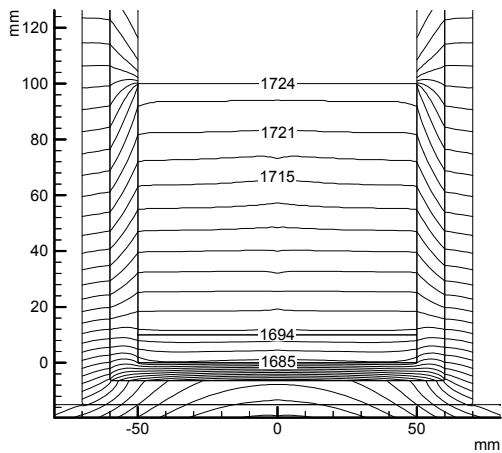
(b) 上部ヒーター:下部ヒーター=10(%) : 90(%)



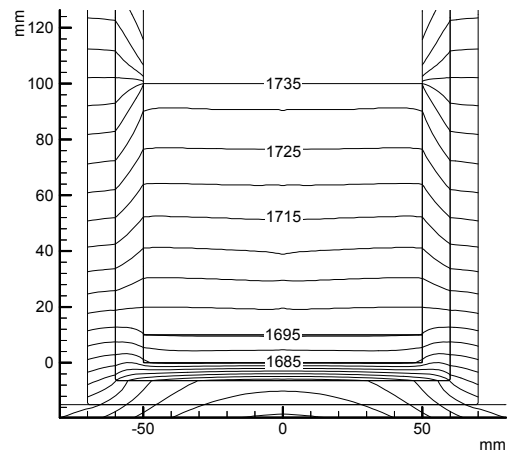
(c) 上部ヒーター:下部ヒーター=20(%) : 80(%)



(d) 上部ヒーター:下部ヒーター=40(%) : 60(%)

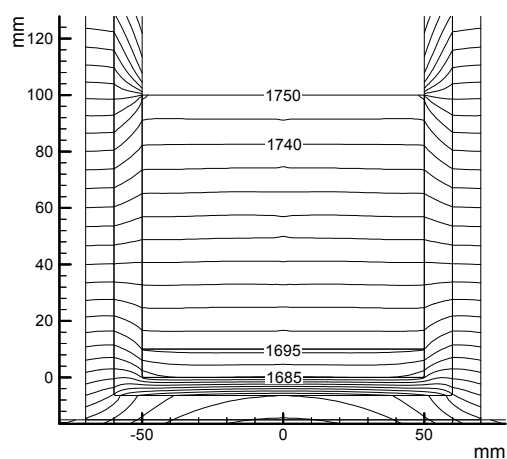


(e) 上部ヒーター:下部ヒーター=60(%) : 40(%)

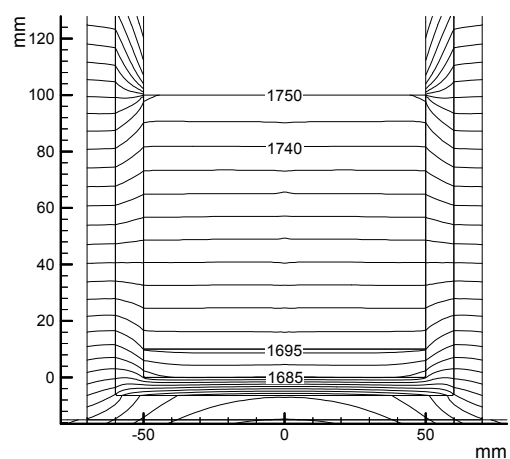


(f) 上部ヒーター:下部ヒーター=70(%) : 30(%)

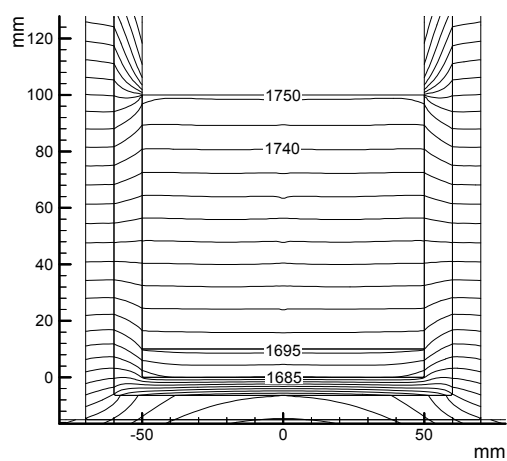
Fig. 7 上部・下部各ヒーター電力の割合と坩堝内融液の温度分布図



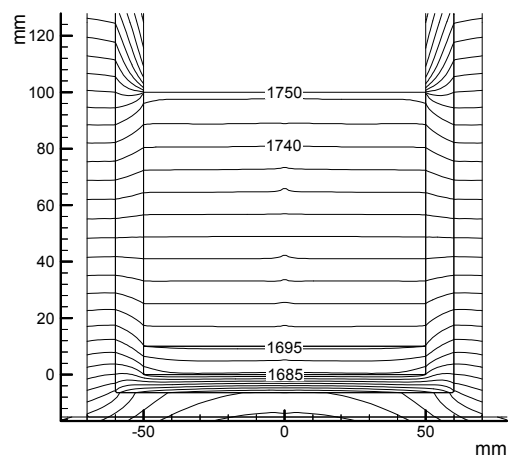
(g) 天井部ヒーター: 上部ヒーター=0(%) : 100(%)



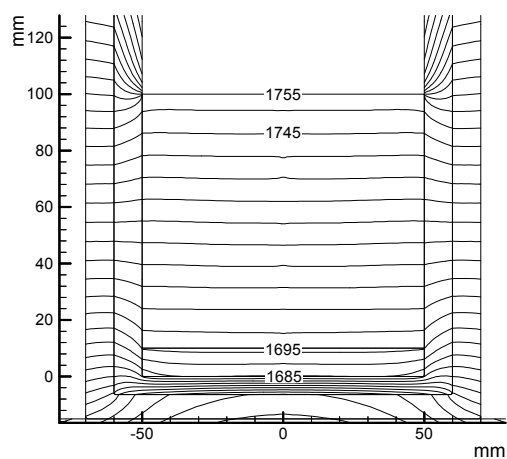
(h) 天井部ヒーター: 上部ヒーター=10(%) : 90(%)



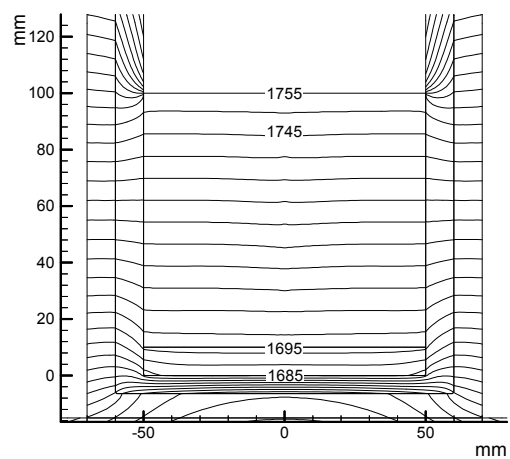
(i) 天井部ヒーター: 上部ヒーター=20(%) : 80(%)



(j) 天井部ヒーター: 上部ヒーター=30(%) : 70(%)

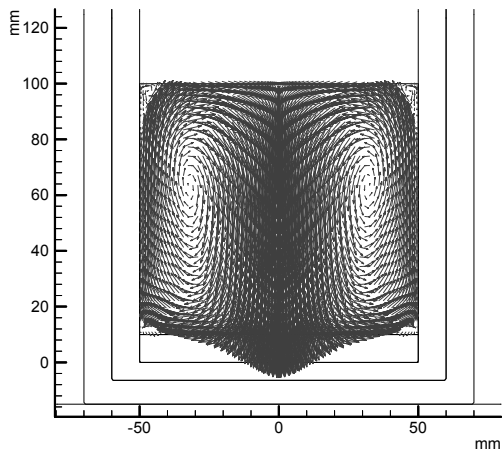


(k) 天井部ヒーター: 上部ヒーター=40(%) : 60(%)

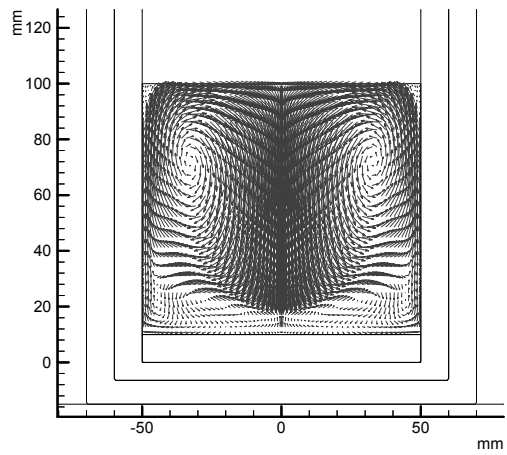


(l) 天井部ヒーター: 上部ヒーター=50(%) : 50(%)

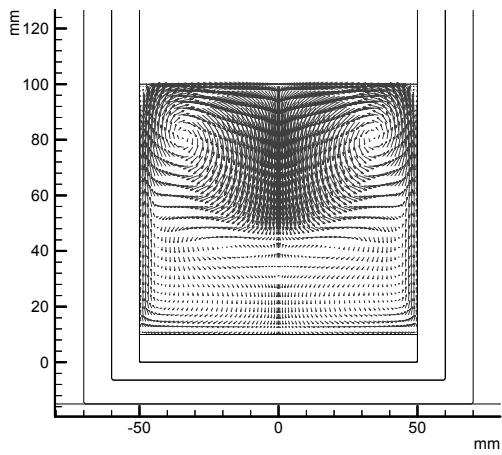
Fig. 8 天井部・上部各ヒーター電力の割合と坩堝内融液の温度分布図



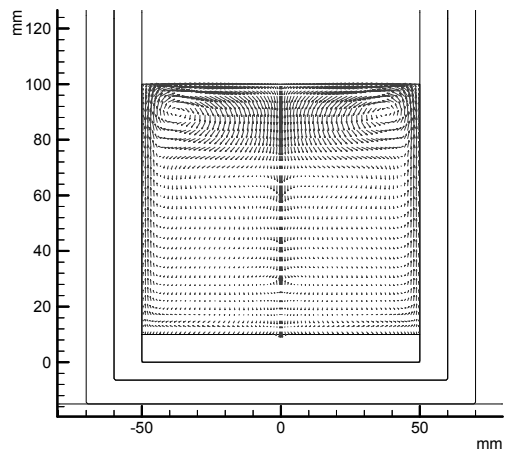
(a') 上部ヒーター:下部ヒーター=0(%):100(%)



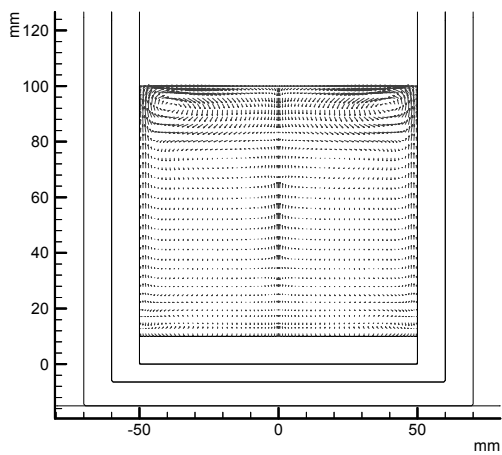
(b') 上部ヒーター:下部ヒーター=10(%):90(%)



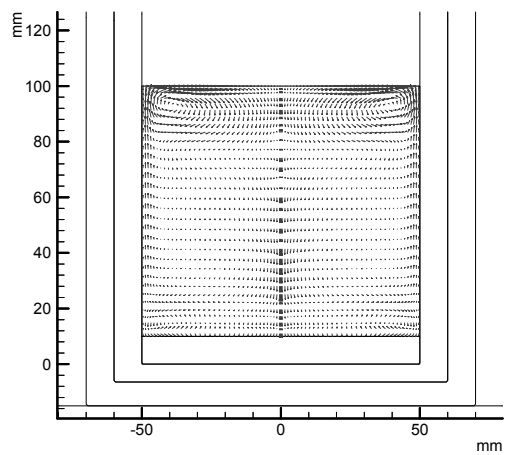
(c') 上部ヒーター:下部ヒーター=20(%):80(%)



(d') 上部ヒーター:下部ヒーター=40(%):60(%)

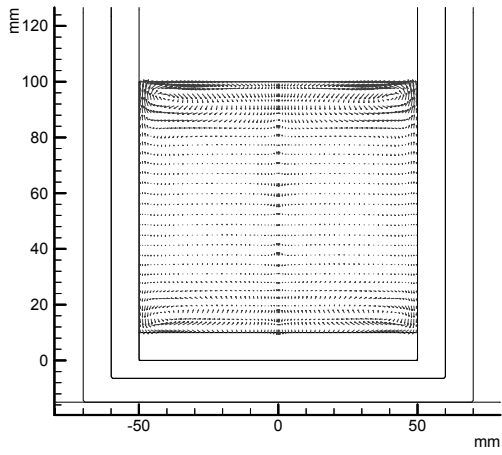


(e') 上部ヒーター:下部ヒーター=60(%):40(%)

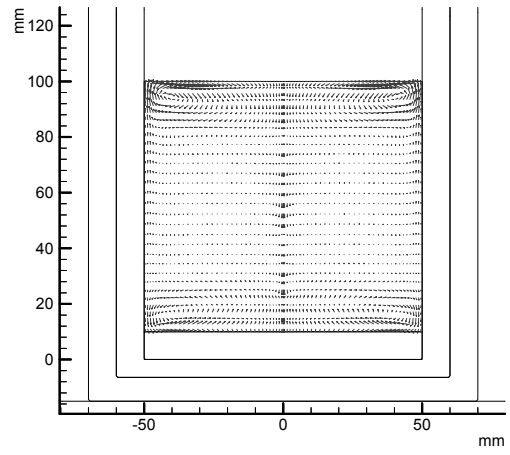


(f') 上部ヒーター:下部ヒーター=70(%):30(%)

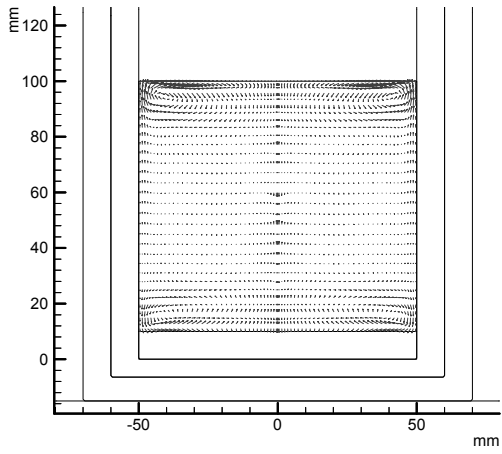
Fig. 9 上部・下部各ヒーター電力の割合と坩堝内融液の対流の状態



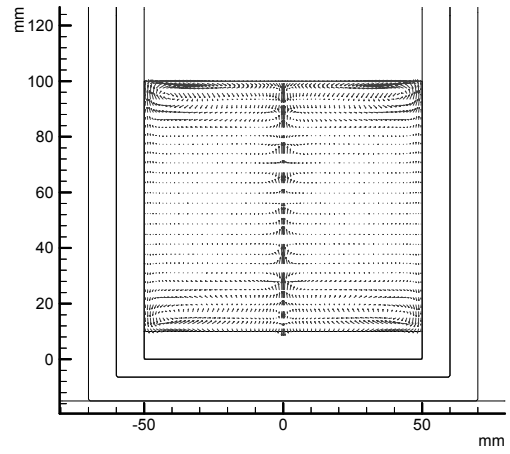
(g') 天井部ヒーター: 上部ヒーター=0(%) : 100(%)



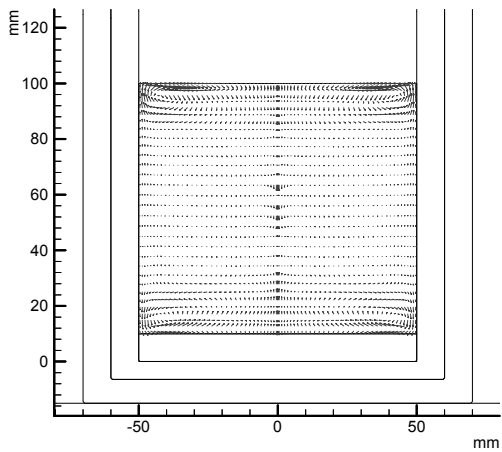
(h') 天井部ヒーター: 上部ヒーター=10(%) : 90(%)



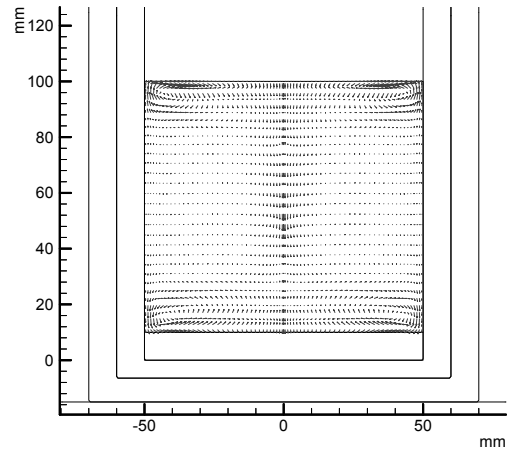
(i') 天井部ヒーター: 上部ヒーター=20(%) : 80(%)



(j') 天井部ヒーター: 上部ヒーター=30(%) : 70(%)



(k') 天井部ヒーター: 上部ヒーター=40(%) : 60(%)



(l') 天井部ヒーター: 上部ヒーター=50(%) : 50(%)

Fig. 10 天井部・上部各ヒーター電力の割合と坩堝内融液の対流の状態

ターと上部ヒーターの電力をそれぞれ増加減少させたときの融液の対流の状態を示した図である。Fig. 10 の各図を比較したが対流にほとんど違いがない。これは Fig. 8 の各図を見ると融液表面温度や温度勾配に差がほとんど見られないため、対流も同じように差が見られないと思われる。また対流が弱いのは、y 軸に平行な融液中央近辺と融液側面近辺において、それぞれの温度勾配が大きく、x 軸に平行な融液表面近辺と融液底面近辺においてそれぞれの温度勾配が小さいためだと思われる。

4. 結 論

2次元軸対称のグローバル計算を行い、ヒーターに割り当てる電力の割合を、(ア)上部ヒーターと下部ヒーターで変化させた場合、(イ)天井部ヒーターと上部ヒーターで変化させた場合のそれぞれの融液の温度分布と温度勾配、融液の対流の状態、融液表面の温度を解析した。その結果、途中経過ではあるが(ア)、(イ)それぞれの場合において、割り当てた電力の割合に対する融液内の温度分布や対流の状態がわかってきた。結晶は固液界面で成長するので、得られた結果は固液界面近辺の温度勾配や濃度勾配などを制御し、結晶の成長を制御するのに重要である。今後は結果がまだ途中である(ア)、(イ)の場合と、まだ解析を行っていない(ウ)天井部ヒーターと下部ヒーターの場合において、それぞれヒーターに割り当てる電力の割合を変化させ、融液の温度分布と温度勾配、融液の対流の状態、融液表面の温度を解析し、それぞれの場合で比較検討する予定である。

謝 辞

日ごろから終始御指導いただいているナノメカニクス分野 柿本浩一教授、ならびに劉立軍氏にこの場をお借りして厚く御礼申し上げます。

参考文献

- 1) L. Liu, S. Nakano, K. Kakimoto, Dynamic Simulation of Temperature and Iron Distributions in a Casting Process for Crystalline Silicon Solar Cells with a Global Model, J. Crystal Growth, accepted for publication, 2005
- 2) L. Liu, K. Kakimoto, Numerical Analysis of a TMCZ Silicon Growth Furnace by Using a 3D Global Model, Reports of Research Institute for Applied Mechanics Kyushu University 127 (2004) 39-47.