

## マルチヒーターを使用した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://doi.org/10.15017/17825>

---

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. 8, pp.23-31, 2007-03. Research Institute for Applied Mechanics, Kyushu University

バージョン：

権利関係：

# マルチヒーターを使用した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

様々な燃料の消費が地球環境に多くの問題を引き起こしている現在、地球環境の保全に対して多くの利点をもたらす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分野で活用されており、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などがある。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っている。表1に示すように、太陽電池の種類としてはシリコン半導体を材料として使用するものと化合物半導体を材料として使用するものに分類され、さらにシリコン半導体は結晶系と非結晶系に分類される。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シリコン結晶系のタイプであり、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が高いという長所があるが、高価なので量産が困難であるという短所もある。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すると発電効率が低いという短所はあるが、安価なため量産が容易であるという長所もある。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。

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。しかし、この一方向性凝固法を使用するに際して、デバイス特性を劣化させる転位の発生が大きな問題となっている。この転位の発生に大きな影響を及ぼす融液・結晶の温度分布と固液界面形状を制御することは、太陽電池の品質の向上にとって重要なことである。この一方向性凝固法において、使用するヒーターの選択やヒーターに加える電力の割合を変化させ、それぞれの場合において融液・結晶の温度分布と固液界面形状がどのように変化するかを数値計算により解析、考察することを目的としている。今回、坩堝内融液を加熱するために使用するヒーターは、

- (ア)：天井部ヒーターと上部ヒーターを使用した場合
  - (イ)：天井部ヒーターと下部ヒーターを使用した場合
- という2つの場合で行っている。

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

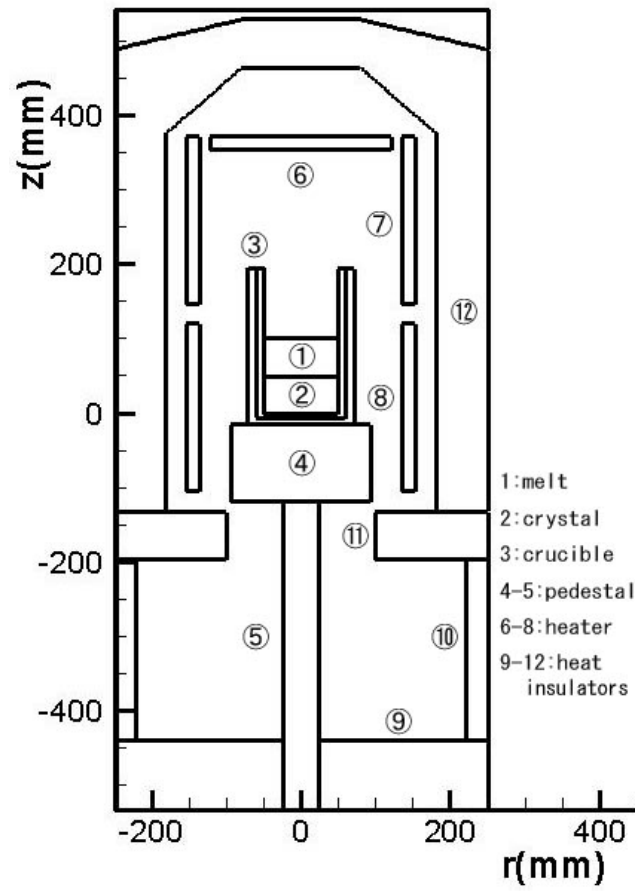


Fig. 1 炉内構成図

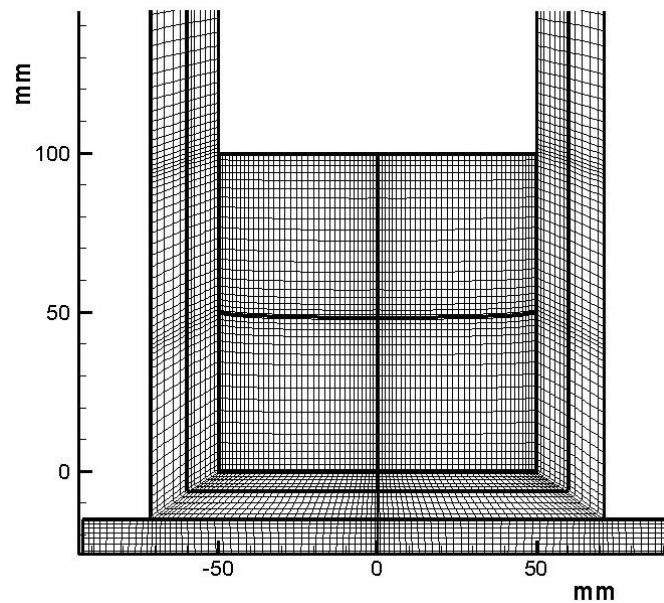


Fig. 2 坩堝内グリッド図

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。そして固液界面の位置は融液の z 軸垂直方向 50mm の高さに設定する。

## 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)
- $\rho$  : 密度 (kg/m<sup>3</sup>)
- $\mu$  : 粘性係数 (kg/m·s)
- $\vec{g}$  : 重力加速度 (m/s<sup>2</sup>)
- $\beta$  : 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·K)
- $\lambda$  : 熱伝導率 (W/m·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<sup>2</sup>)
- $\varepsilon(\vec{x})$  : 放射率
- $K(\vec{x}, \vec{x}')$  : 形態係数
- $\sigma$  : ボルツマン定数 (W/m<sup>2</sup>·K<sup>4</sup>)
- $T(\vec{x})$  : 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。 $\partial V$  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。

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

### 2.3 計算の実行手順

グローバルモデルは Fig. 1 のように 12 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、固液界面形状は決まっておらず、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) 格子を生成。
- (2) 各種パラメータ、格子、炉の形状を読みこむ。
- (3) 形態係数を計算する。
- (4) 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。
- (5) 融液内の流れ、温度場、圧力を計算する。
- (6) 結晶の温度場を計算する。
- (7) (5), (6)の計算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(5)に戻って再び反復計算を行う。収束していたら(8)へ。
- (8) ヒーターや断熱材など炉内の他のすべての構成体の温度場を計算する。
- (9) 隣接する炉内構成体ブロックの各境界面での輻射熱、伝熱を計算する。
- (10) 固液界面の形状を更新する。
- (11) グローバル計算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格子を再生成し、ヒーターパワーを調整して(5)に戻って再び反復計算を行う。収束していたら(12)へ。
- (12) データを出力。

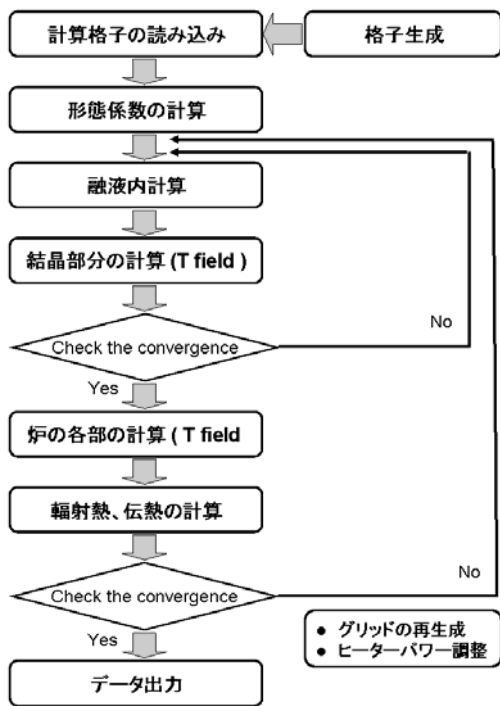


Fig. 3 Flow chart

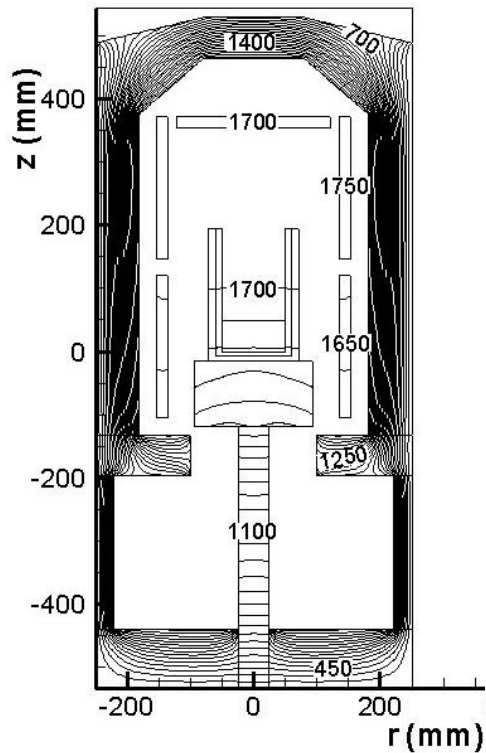


Fig. 4 グローバル計算を行った炉全体の温度分布図

### 3. 結果

#### 3.1 結晶中温度勾配とヒーター電力

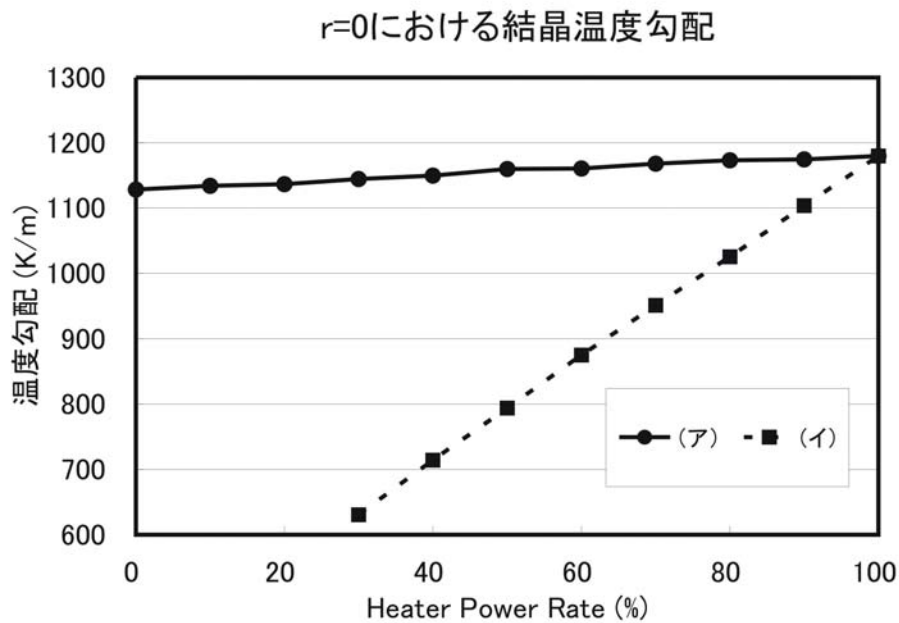


Fig. 5 r=0 における z 軸垂直方向の結晶中温度勾配のグラフ

坩堝の中心位置  $r=0$  から  $z$  軸垂直方向における結晶部分の温度勾配とヒーターに加える電力の割合を示した図を Fig. 5 に示す。横軸のヒーターに加える電力の割合は天井部ヒーターに加える電力の割合を示している。(ア)の場合、天井部ヒーターに加える電力の割合を増加させても結晶の温度勾配にあまり変化が見られない。これに対して(イ)の場合、天井部ヒーターに加える電力の割合を増加させるにつれて結晶の温度勾配も大きくなっていることがわかる。

### 3.2 固液界面形状の変化とヒーター電力

坩堝の中心位置  $r=0$  から  $z$  軸垂直方向の固液界面までの高さ、坩堝の側面位置  $r=50$  から  $z$  軸垂直方向の固液界面までの高さの差をとり、固液界面形状の変化を示す図を Fig. 6 に示す。横軸のヒーターに加える電力の割合は、Fig. 5 と同じく天井部ヒーターに加える電力の割合を示している。 $z$  軸の正方向を界面までの高さの差の正方向とする。つまり、界面までの高さの差が正の場合は界面の形状が上に凸、負の場合は下に凸の形状のときである。(ア)の場合、天井部ヒーターに加える電力の割合を増加させても、固液界面の下に凸の形状はほとんど変化が見られない。これに対して(イ)の場合は、天井部ヒーターに加える電力の割合を増加させるにつれて、固液界面形状はほぼ平坦な形状から下に凸の形状へと変化していくのがわかる。

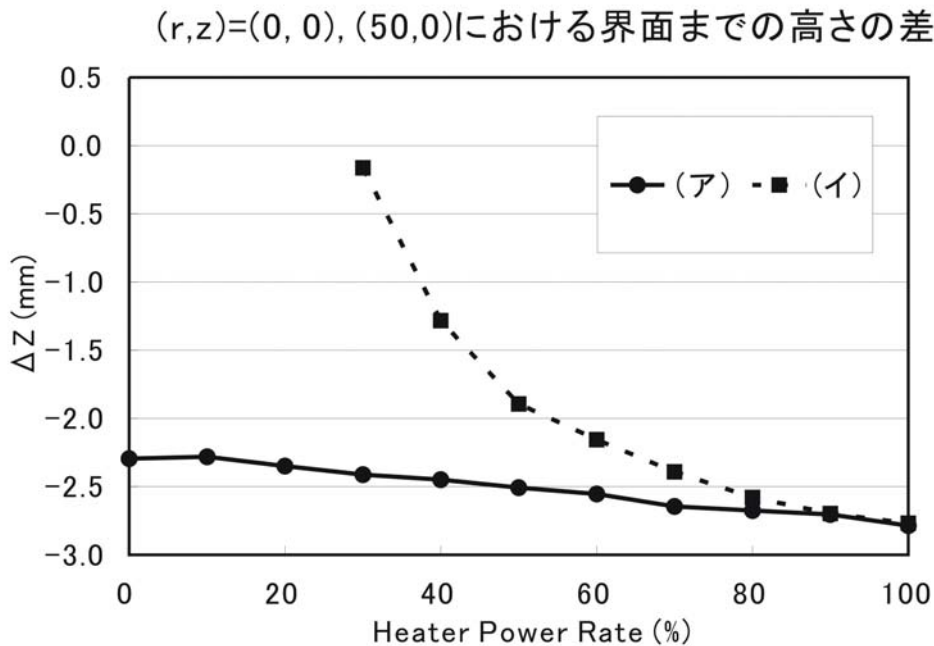
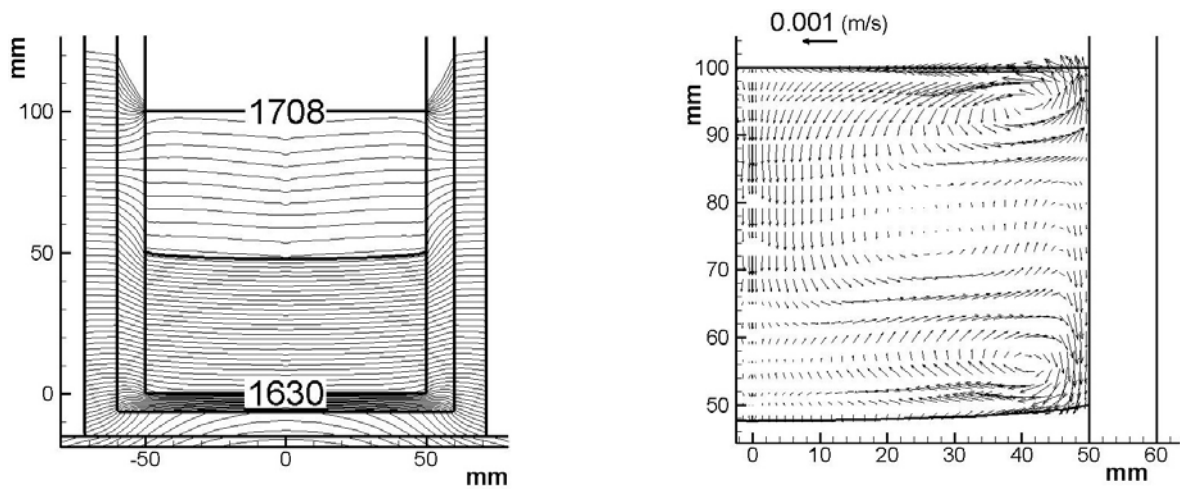


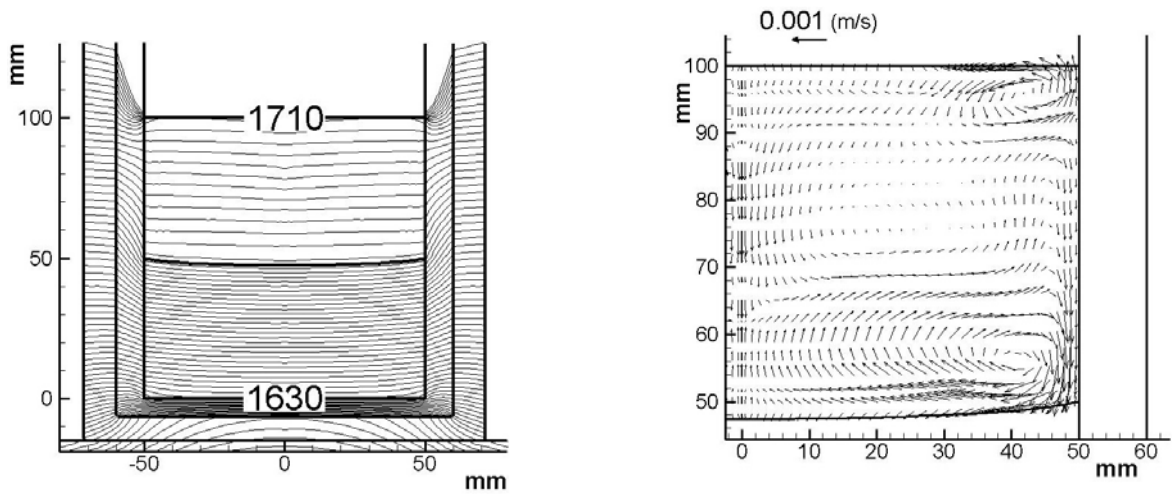
Fig. 6 (r,z)=(0,0), (50,0)における  $z$  軸垂直方向の固液界面までの高さの差のグラフ

### 3.2 融液の温度分布、対流の変化とヒーター電力

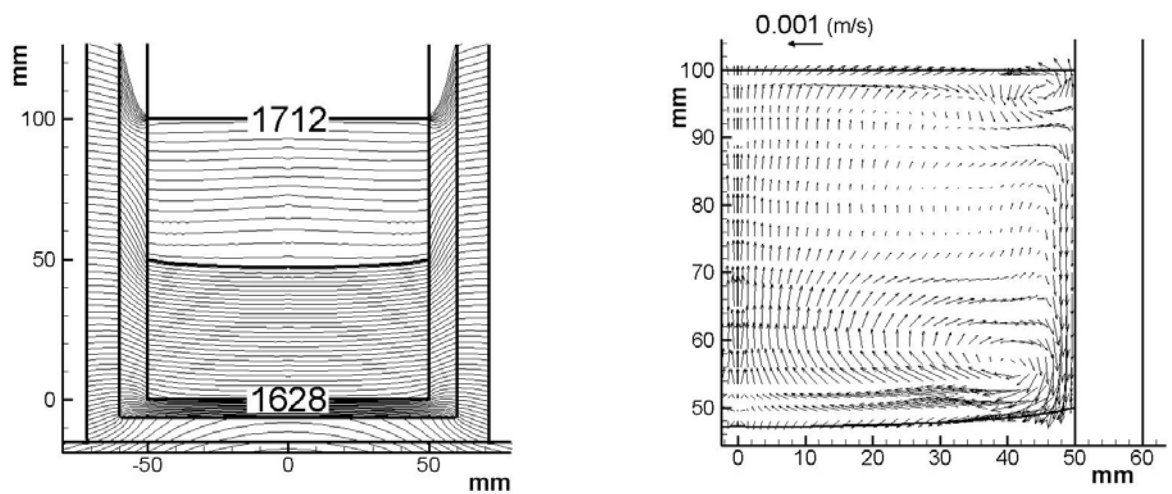
Fig. 7、Fig. 8 は、それぞれ坩堝内融液を加熱するために使用するヒーターを(ア)、(イ)という2つの場合で行ったときの融液の温度分布図と流速分布図である。(ア)の場合、(イ)の場合共に、天井部ヒーターに加える電力の割合が増加するほど融液表面の温度が上昇し、融液の温度分布を表している等温線が融液表面の面に対して平坦な形状になり、温度勾配も増大していることがわかる。また(イ)の場合は、下部ヒーターに加える電力の割合が増加するほど、坩堝の中心位置  $r=0$  から  $z$  軸垂直方向において鉛直下方向への自然対流が増大していることがわかる。ただし、(イ)の場合、下部ヒーターに加える電力の割合が70%付近になると自然対流の強さが増し、融液の温度がシリコン融点である1685Kに近づくので融液表面から凝固していく可能性がある。よってここで計算を終了させている。



(a) 天井部ヒーター：上部ヒーター=0(%)：100(%)



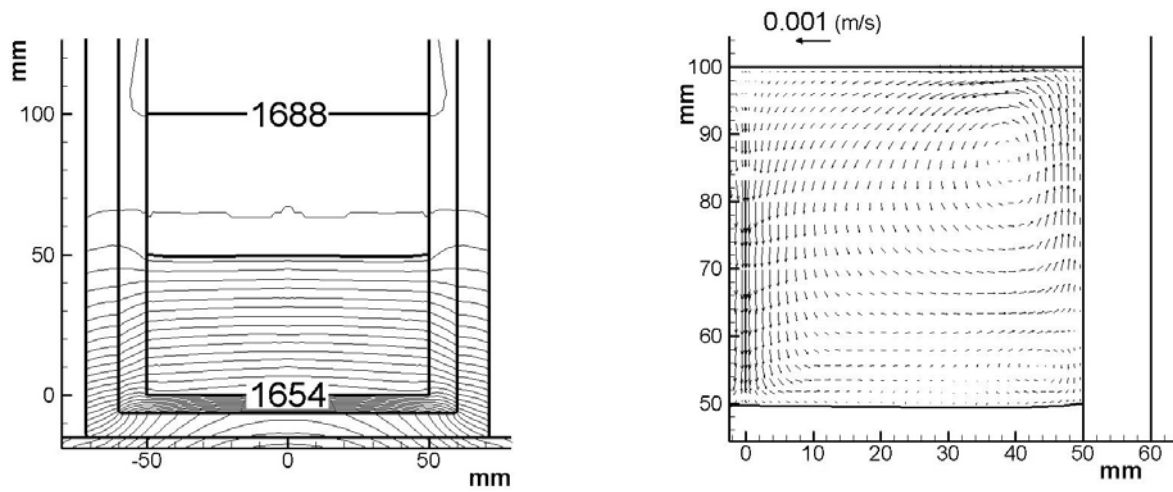
(b) 天井部ヒーター：上部ヒーター=50(%)：50(%)



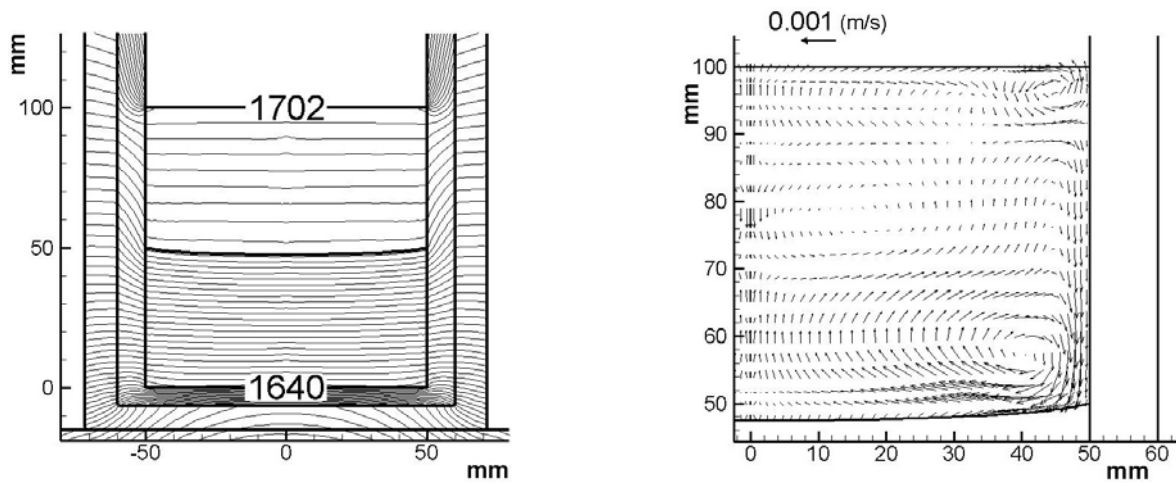
(c) 天井部ヒーター：上部ヒーター=100(%)：0(%)

Fig. 7 (ア)の場合の各ヒーターに加える電力の割合と融液・結晶部分の温度分布図・流速分布図

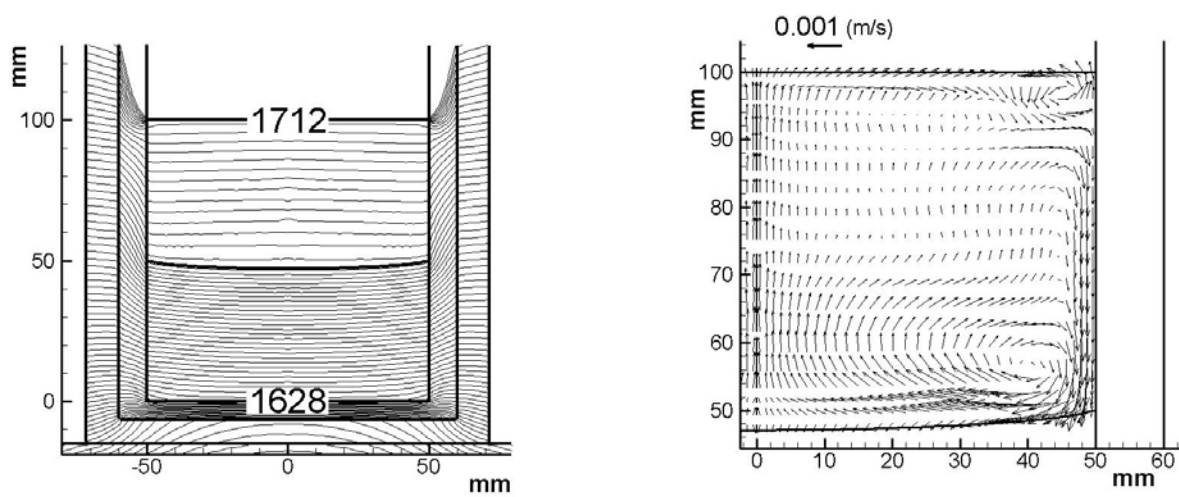




(a) 天井部ヒーター：下部ヒーター = 30 ( %) : 70 ( % )



(b) 天井部ヒーター：下部ヒーター = 70 ( %) : 30 ( % )



(c) 天井部ヒーター：下部ヒーター = 100 ( %) : 0 ( % )

Fig. 8 (イ)の場合の各ヒーターに加える電力の割合と融液・結晶部分の温度分布図・流速分布図

#### 4. 結果

2次元軸対称のグローバル計算を行い、坩堝内融液を加熱するために使用するヒーターを（ア）、（イ）という2つの場合で行った。そして、それぞれの場合においてヒーターに加える電力の割合を変化させた場合の坩堝内融液、結晶の温度分布、対流、固液界面形状を解析・考察した。（ア）の場合、天井部ヒーターに加える電力の割合を増加させていくと、結晶中温度勾配、固液界面の下に凸の形状共に若干増大する傾向にあるがほとんど変化が見られなかった。よって結晶の育成において天井部ヒーターは使用せず、上部ヒーターのみ使用の方が良いということがわかった。これに対して（イ）の場合、下部ヒーターに加える電力の割合の変化が固液界面形状や結晶部分の温度勾配に大きく影響していることがわかった。次に下部ヒーターに加える電力の割合が70%付近で界面までの高さの差がほぼ0、つまり固液界面が平坦な形状に近づくことがわかった。

#### 謝 辞

日頃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 292 (2006) 515-518.
- 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.
- 3) 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.