

マルチヒーターを使用した一方向性凝固法によるシリコン多結晶の固液界面形状・熱流動解析

中野, 智
九州大学応用力学研究所

劉, 立軍
九州大学応用力学研究所

柿本, 浩一
九州大学応用力学研究所

<https://doi.org/10.15017/26821>

出版情報：九州大学応用力学研究所所報. 131, pp.31-38, 2006-09. 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 シリコン多結晶の固液界面形状・熱流動解析

中野 智* 劉 立軍* 柿本 浩一*

(2006年7月31日受理)

Analysis of temperature distribution and melt-solid interface shape in multi-crystalline silicon of a casting method with multi heater system

Satoshi NAKANO, Lijun LIU and Koichi KAKIMOTO

E-mail of corresponding author: *snaka@riam.kyushu-u.ac.jp*

Abstract

Ingot-casting method is an important method for producing high efficient solar cells with using multi-crystalline silicon. High efficient solar cells depend on the quality of the multi-crystalline silicon. It is important to analyze thermal field, convection of melt and melt-solid interface shape in the crucible to optimize ingot-casting method. 2D axisymmetric global simulation was carried out for silicon crystal growth. The global model of heat transfer in the furnace includes the convective heat transfer of melt, the conductive heat transfer in all components, and the radiative heat transfer among all components in the furnace. We used a system with three heaters; heater1 and 2, heater1 and 3, heater2 and 3. Total heater power was distributed the heaters. Distribution of power in the heaters was modified to study how such distribution modifies the temperature distribution. We studied the effect of which heaters we use and input heater power distribution on the melt-solid interface shape, the thermal field and convection of melt in the crucible.

Key words: *global model, computer simulation, Ingot-casting method, silicon*

1. 緒言

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いる。有名など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、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。Table. 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っている。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が低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、鑄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では、坩堝に入れた融液を加熱するためにヒーターを使用する。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た場合の坩堝内結晶及び融液の温度分布、対流、固液界面の形状を解析・考察することは、結晶内の応力に基づく転位の発生に大きな影響を与える為、高品質、高効率な太陽電池を作成するのに重要なことである。

本研究では、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、

Case1: 天井部ヒーターと上部ヒーターを使用した場合

Case2: 天井部ヒーターと下部ヒーターを使用した場合

Case3: 上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加える電力の割合を変化させた場合の坩堝内結晶及び融液の温度分布と対流、固液界面の形状を解析・考察する。

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

Table. 1 Various materials of a solar cell

2. 計算モデル

2.1 一方向性凝固法の2次元モデル

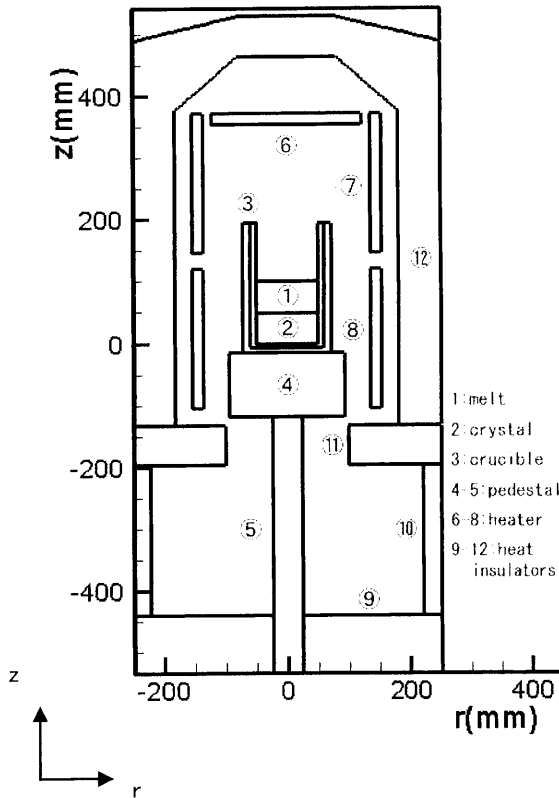


Fig. 1 Configuration and domain partition of a casting method furnace

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⑥、⑦、⑧の3箇所のヒーターで、⑥を天井部ヒーター(heater1)、⑦を上部ヒーター(heater2)、⑧を下部ヒーター(heater3)と呼ぶことにする。そして界面の位置は融液の z 軸方向 50mm の高さに設定する。

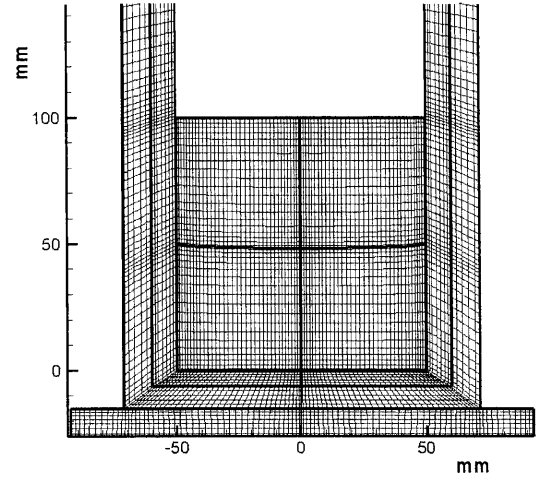


Fig. 2 Computation grid system in the crucible

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。

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0, \tag{1}$$

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

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

\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。

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

$q(\vec{x})$: 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 $K(\vec{x}, \vec{x}')$ は \vec{x} と \vec{x}' 間の形態係数である。 \vec{x} と \vec{x}' は炉内構造物の表面上の極小要素である。 dS と dS' は \vec{x} と \vec{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、 $K(\vec{x}, \vec{x}')$ は下記方程式を満たす。 \vec{n} と \vec{n}' はそれぞれ dS と dS' からの単位法線ベクトルである。

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

dS と dS' がお互い見えていない場合、式(6)のようになる。

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

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、炉内構成体それぞれの物性値、結晶の融点の温度である。ヒーターの電力、界面の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。

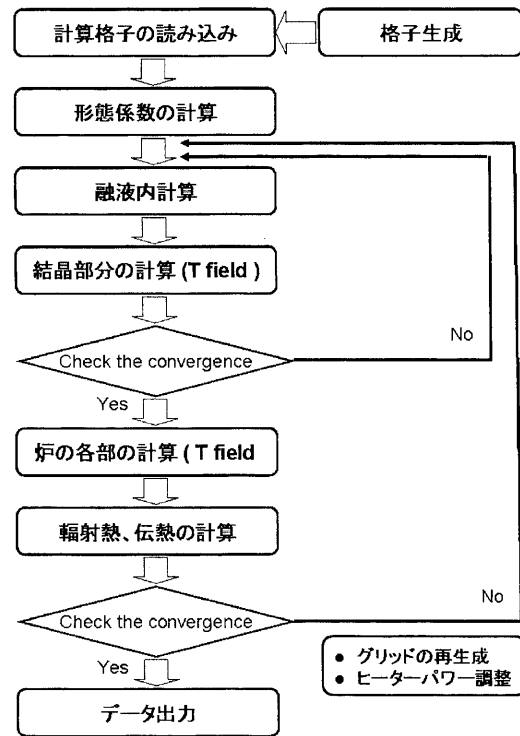


Fig. 3 Flow chart

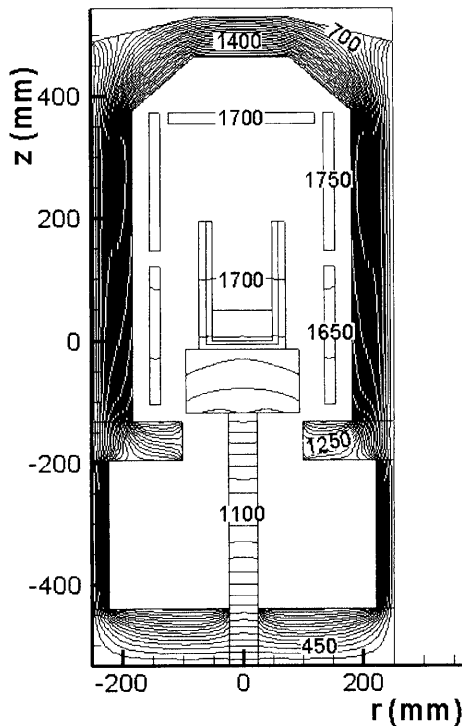


Fig. 4 Global temperature distribution in the furnace. Isotherms are plotted every 5K.

3. 結果

3.1 結晶部分の温度勾配とヒーター電力

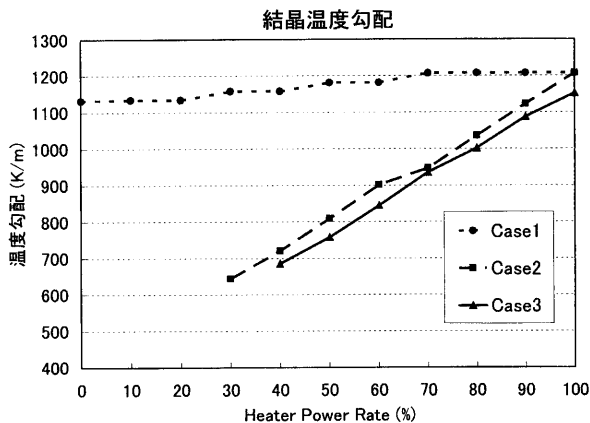


Fig. 5 Temperature gradient of the crystal increasing the rate of power in the heater.

坩堝の中心位置 $r=0$ から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 Case1、Case2 の場合は天井部ヒーターに加える電力の割合を、Case3 の場合は上部ヒーターに加える電力の割合を示している。Case1 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 Case2 の場合、天井部ヒーターに加える電力の割合を、Case3 の場合、上部ヒーターに加える電力の割合をそれぞれ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。傾向として Case1 と Case2、Case3 で大きく分かれていることがわかる。

3.2 固液界面の形状の変化とヒーター電力

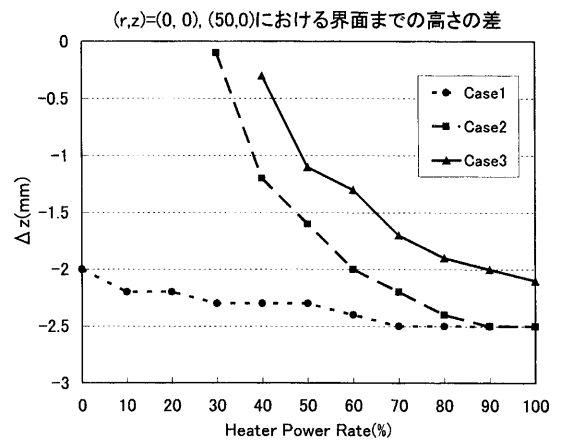


Fig. 6 The difference of the interface height between $r=0$ and $r=50$ increasing the rate of power in the heater.

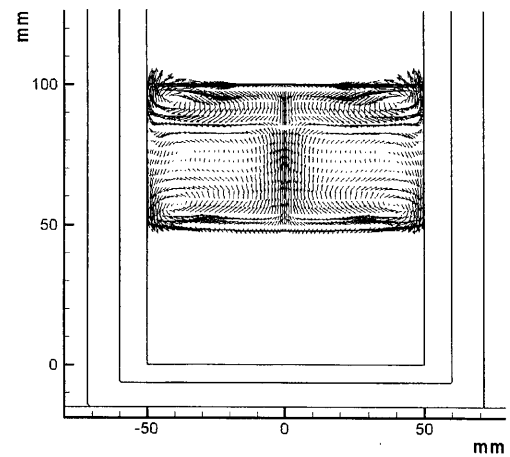
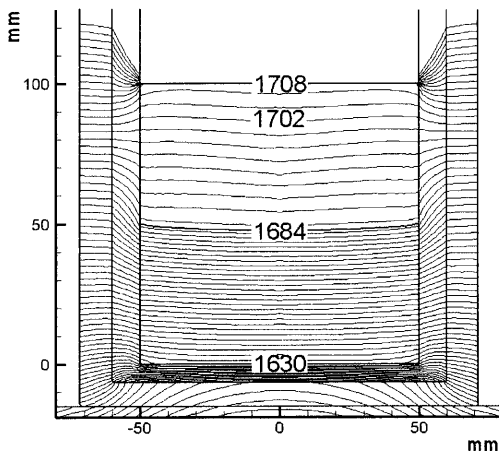
坩堝の中心位置 $r=0$ から垂直方向の界面までの高さや坩堝の側面位置 $r=50$ から垂直方向の界面までの高さの差をとり、界面の動きを見た図を Fig. 6 に示す。横軸のヒーターに加える電力の割合は Fig. 5 と同様である。z 軸の正方向を界面までの高さの差の正方向とする。つまり、界面までの高さの差が正の場合は界面の形状が上に凸、負の場合は下に凸の形状のときである。こちらも傾向として Case1 と Case2、Case3 で大きく分かれている。Case1 の場合、天井部ヒーターに加える電力の割合を増加させても下に凸の形状でほとんど変化が見られない。これに対して Case2 の場合天井部ヒーターに加える電力の割合を、Case3 の場合上部ヒーターに加える電力の割合を、それぞれ増加させるにつれて界面の形状が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。

3.3 融液の温度分布、対流の変化とヒーター電力

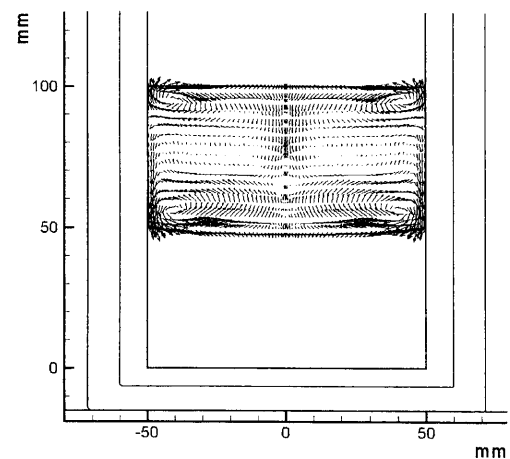
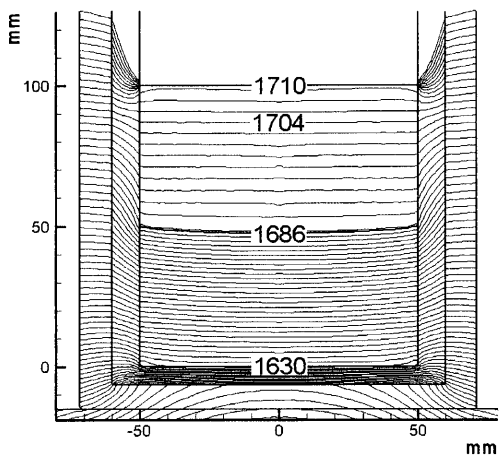
Fig. 7、Fig. 8、Fig. 9、は、それぞれ坩堝内融液を加熱するために使用するヒーターを Case1、Case2、Case3 という3つの場合で行ったときの融液の温度分布図と対流図である。Case1、Case2 の場合は天井部ヒーターに必要な電力の割合が増加するほど、Case3 の場合は上部ヒーターに必要な電力の割合が増加するほど融液表面の温度が高くなり、融液の温度分布を表している等温線が、融液表面の面に対して平坦な形状になり、温度勾配も大きくなっていることがわかる。また Case2、Case3 の場合は下部ヒーターに必要な電

Temperature distributions

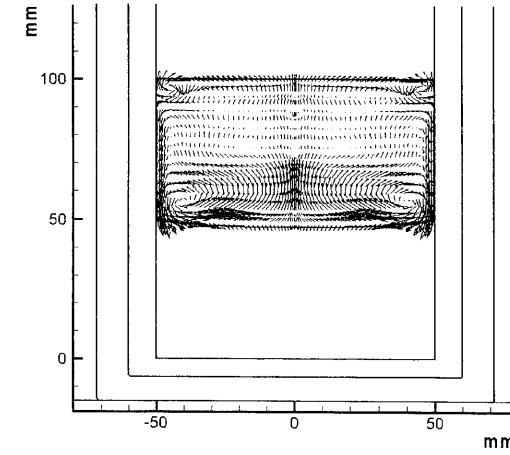
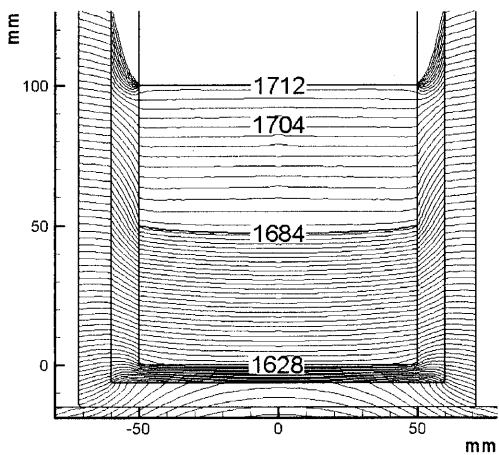
Convective flow patterns



(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(%)

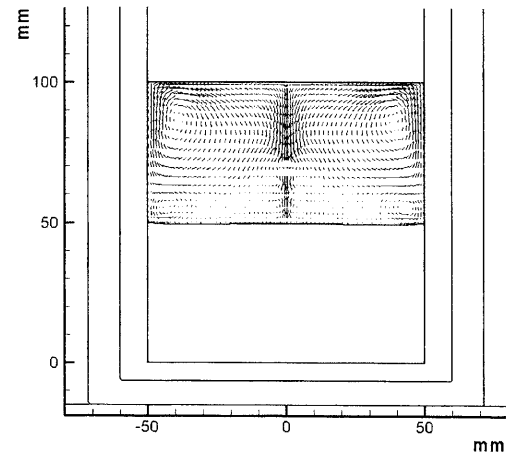
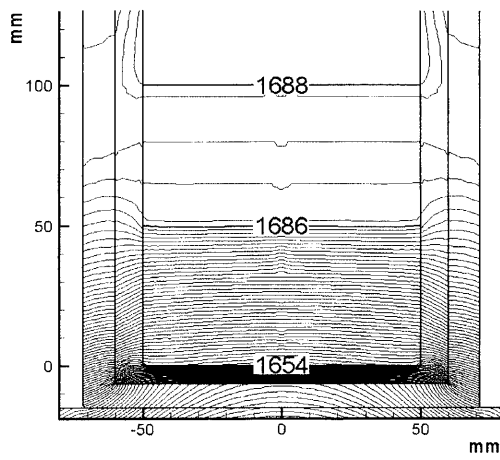


(c) 天井部ヒーター: 上部ヒーター=100(%) : 0(%)

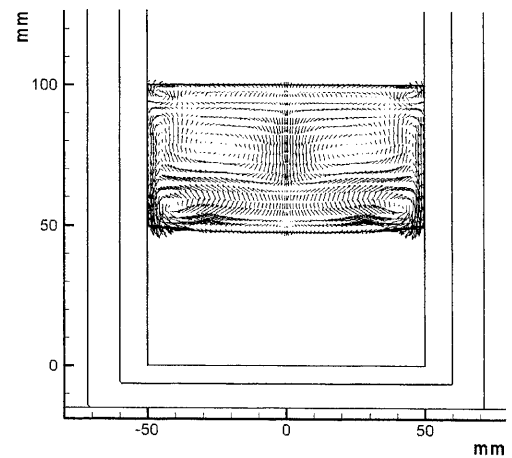
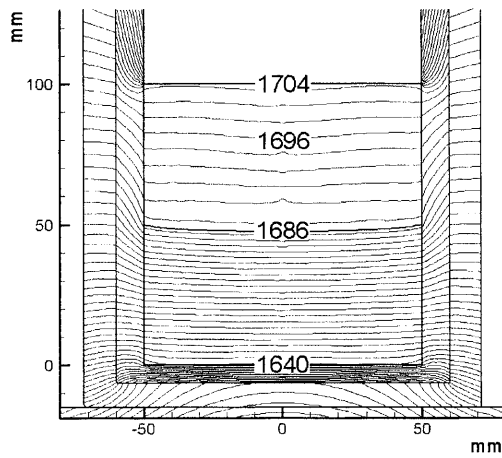
Fig. 7 Comparison of temperature distributions and convective flow patterns of the melt in the crucible distributing the rate of power in the heater1 and heater2 (Case1).

Temperature distributions

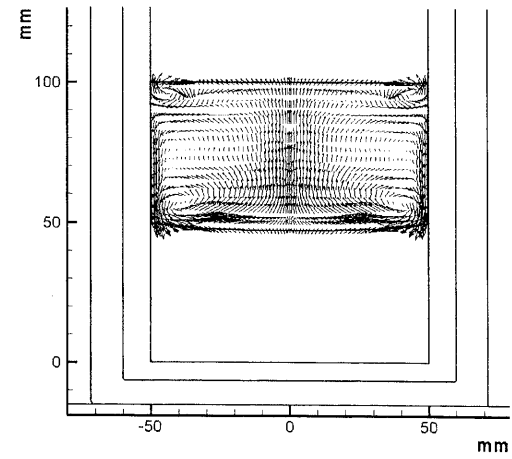
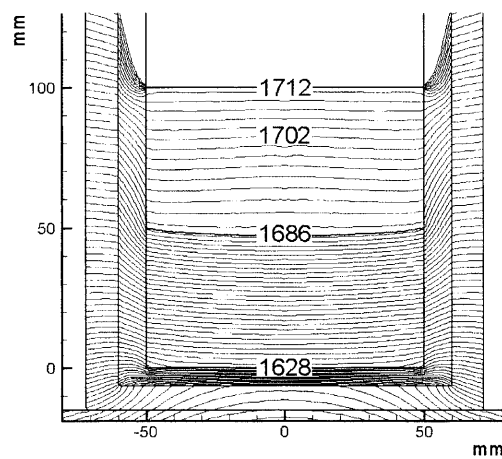
Convective flow patterns



(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(%)

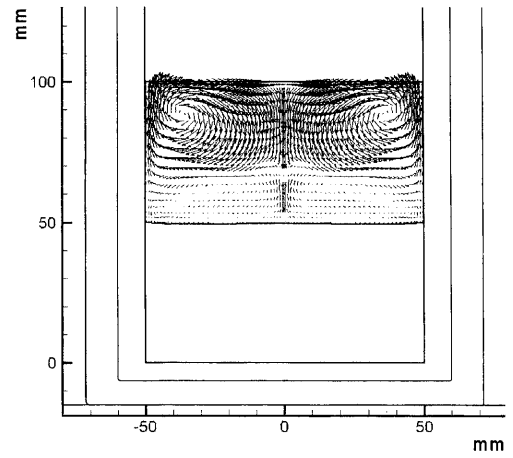
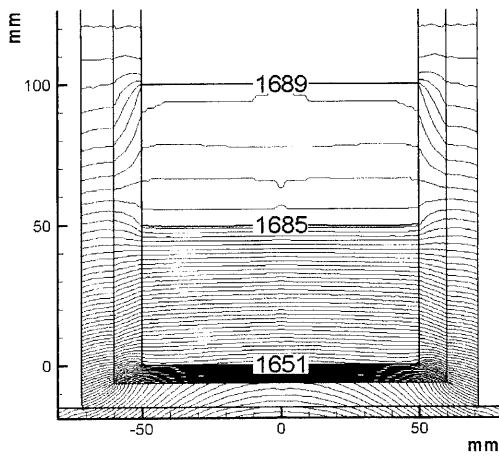


(c) 天井部ヒーター:下部ヒーター=100(%) : 0(%)

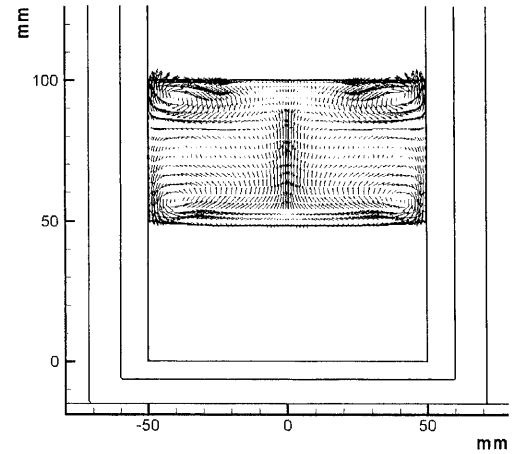
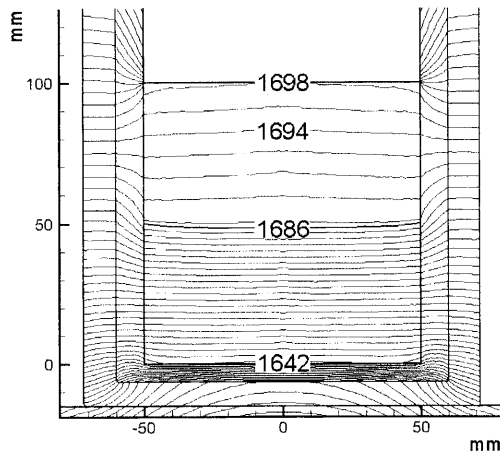
Fig. 8 Comparison of temperature distributions and convective flow patterns of the melt in the crucible distributing the rate of power in the heater1 and heater3 (Case2).

Temperature distributions

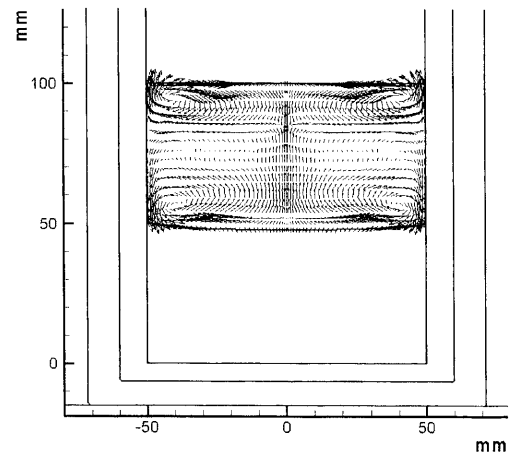
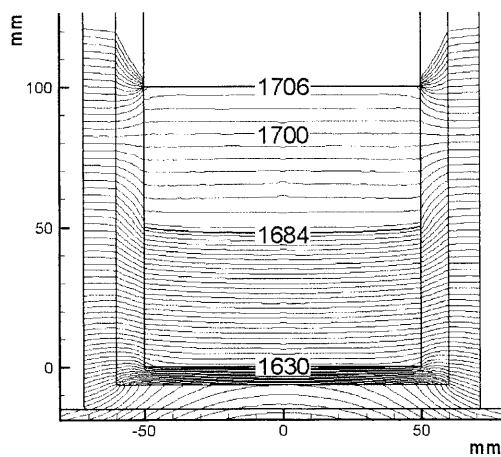
Convective flow patterns



(a) 上部ヒーター:下部ヒーター=40(%) :60(%)



(b) 上部ヒーター:下部ヒーター=70(%) :30(%)



(c) 上部ヒーター:下部ヒーター=100(%) :0(%)

Fig. 9 Comparison of temperature distributions and convective flow patterns of the melt in the crucible distributing the rate of power in the heater2 and heater3 (Case3).

力の割合が増加するほど坩堝の中心位置 $r=0$ から垂直方向において鉛直下方向への大きな自然対流ができていくことがわかる。ただし下部ヒーターに加える電力の割合が Case2 の場合 70% 付近、Case3 の場合 60% 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。

4. 結 言

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 Case1、Case2、Case3 という3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結晶及び融液の温度分布、対流、固液界面の形状を解析・考察した。その結果、傾向として Case1 と Case2、Case3 で大きく分かれることがわかった。Case1 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、温度勾配も界面の下に凸の形状も若干大きくな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は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 Case2、Case3 の場合、界面までの高さの差のグラフ、結晶部分の温度勾配のグラフとも同じような形状になっており、両方とも下部ヒーターに加える電力の割合の変化が界面の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、Case2 の場合 70% 付近で、Case3 の場合 60% 付近で界面までの高さの差がほぼ0、つまり平坦な形状に近づくことがわかった。

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.