УДК 621.315.592+004.942

МАКРОМОДЕЛЬ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ УСТАНОВКИ ДЛЯ ВЫРАЩИВАНИЯ КРИСТАЛЛОВ СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ МЕТОДОМ БРИДЖМЕНА

Бабушкин Юрий Владимирович,

канд. техн. наук, доцент кафедры прикладной математики Института кибернетики ТПУ, Россия, 634050, г. Томск, пр. Ленина, д. 30. E-mail: am@tpu.ru

Филиппов Максим Михайлович,

канд. техн. наук, ведущ. эксперт центра мониторинга и рейтинговых исследований Управления программ развития ТПУ, Россия, 634050, г. Томск, пр. Ленина, д. 30. E-mail: nauka@tpu.ru

Нгуен Суан Хунг,

аспирант кафедры прикладной математики Института кибернетики ТПУ, Россия, 634050, г. Томск, пр. Ленина, д. 30. E-mail: am@tpu.ru

Грибенюков Александр Иванович,

канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотр. Института мониторинга климатических и экологических систем СО РАН, Россия, 634055, г. Томск, пр. Академический, д. 10/3. E-mail: loc@imces.ru

Необходимость повышения эффективности функционирования солнечных батарей обусловлена постоянно повышающимися требованиями к солнечной энергетике. Повысить эффективность работы батарей можно с помощью использования более качественных элементов. Работа посвящена решению проблемы по созданию комплекса математических моделей различного уровня сложности для решения научно-технических задач, направленных на повышение качества кремния, выращиваемого методом Бриджмена.

Цель исследования: разработка математической модели, позволяющей в реальном масштабе времени с приемлемой точностью прогнозировать течение процесса выращивания кристалла в варьируемых тепловых условиях.

Методы исследования. Разработанная модель реализована на базе метода элементарных балансов для принятой расчетной схемы в пакете Matlab. Модель позволяет проводить оценку температурного поля установки, исследовать взаимное влияние тепловых процессов в системе «ростовой контейнер – термическая установка», имитировать тепловые процессы на всех этапах процесса выращивания кристалла, исследовать различные алгоритмы управления тепловой мощностью нагревателей.

Результаты. Получены оценки положения изотерм кристаллизации и скорости роста кристалла в условиях вертикального метода Бриджмена с механическим перемещением ростового контейнера. Показано, что изменение температурного поля в контейнере при его перемещении существенно влияет на положение изотермы кристаллизации. При этом скорость роста может достигать области отрицательных значений, при которых происходит подплавление уже выращенного кристалла. Кроме того, фактическое время выращивания кристалла может заметно отличаться от запланированного. Полученные расчетным путем данные следует учитывать при проектировании новых установок и планировании экспериментальных работ по выращиванию кристаллов.

Ключевые слова:

Возобновляемая энергетика, мультикремний, фотоэлектрические преобразователи, моделирование роста кристалла, метод Бриджмена, метод элементарных балансов, температурное поле, многозонная термическая установка.

В настоящее время в общественном сознании крепнет убежденность в том, что энергетика будущего должна базироваться исключительно на солнечной энергии. Солнце – это огромный неиссякаемый безопасный источник энергии, в равной степени всем доступный. Ставка на солнечную энергетику должна рассматриваться не только как беспроигрышный, но и в долгосрочной перспективе как безальтернативный выбор для человечества [1].

Главными ограничениями на пути развития солнечной энергетики являются дефицит кремния на мировом рынке и высокая цена моно- и мультикремния, которые используются в качестве основных материалов при изготовлении фотоэлектрических преобразователей [2]. Для расширения использования солнечных энергосистем требуется организация массового производства и создание оптимальных технологий, которые обеспечили бы получение кремния солнечного качества и существенное снижение его стоимости. Один из возможных вариантов выхода из создавшейся ситуации основан на глубокой очистке металлургического кремния и выращивании из него слитков мультикремния методом Бриджмена [3, 4], который нашел широкое применение для выращивания кристаллов, используемых в приборостроении и конструкционном материаловедении.

Многочисленными экспериментальными [5–8] и теоретическими [9–20] исследованиями установлено, что совершенство кристаллов, выращиваемых методом Бриджмена, непосредственно зависит от термических условий, реализуемых в рабочем объеме ростовой установки. Поэтому необходимо, чтобы установка должным образом выполняла следующие функции [21]:

- создание в рабочем объеме требуемого распределения температуры;
- формирование с заданной точностью оптимального температурного поля в ростовом контейнере (РК) на всех этапах выращивания кристалла, а именно: при затравлении, разращивании до стационарного диаметра и росте в условиях стационарного диаметра.

Исследование процессов выращивания кристаллов с учетом специфики их протекания в каждом конкретном случае производится как экспериментальными, так и методами математического моделирования. В работах по исследованию процесса выращивания кристаллов с привлечением методов математического моделирования можно выделить два подхода:

- к первому относятся исследования, посвященные изучению процессов роста кристаллов исключительно в РК [8–18];
- ко второму относятся работы, в которых математические модели тепловых процессов включают как модель РК, так и модель термической установки, обеспечивающей в РК температурное поле, необходимое для выращивания кристалла [19, 20, 22, 23].

В первом случае при моделировании фазового перехода рабочего вещества в РК используется математическое описание двухфазной задачи Стефана. При этом предполагается, что внешнее для РК температурное поле создается термической установкой и задается в качестве граничного условия. Использование такого подхода позволяет изучить особенности протекания процессов кристаллизации в РК с учетом конвективных потоков в расплаве рабочего вещества, перераспределения тепловых потоков на границе раздела фаз, формы фронта кристаллизации и его подвижности на качество выращиваемого кристалла. В работах [19, 20, 23] больше внимания уделяется вопросам взаимодействия РК и термической установки, т. е. условиям выращивания кристаллов в конкретных реализациях установок. Ввиду сложности решаемой задачи она разделяется на две: сначала рассчитывается температурное поле установки для определенного положения РК; затем делается его перемещение в новое положение и процесс расчета повторяется. В результате получается набор температурных полей для различных положений РК. По полученным данным делаются предварительные оценки изменения температурного поля и характеристик роста кристалла при перемещении РК.

Отличительной особенностью данной работы от перечисленных выше, является моделирование температурного поля в термически связанной системе «установка – перемещающийся в ней РК», что позволяет исследовать динамику процесса роста кристалла в режиме реального времени с учетом взаимного влияния тепловых процессов в установке и РК и получить расчетные характеристики роста кристалла, более близкие к характеристикам реального процесса. В качестве основных характеристик роста кристалла примем множество оценок $M = \{z_t, z_b, z_{cr}, m_{cr}, l_{cr}, t\}$, где z_t, z_b, z_{cr} – верхнее и нижнее положения рабочего вещества в РК и положение фронта кристаллизации; m_{cr}, l_{cr} – масса и длина выращенного кристалла; t – время.

Поведение множества оценок M во время выращивания кристалла рассмотрим для многозонной термической установки (МТУ) [24]. Установка (рис. 1, a) состоит из 23-х осесимметричных нагревательных модулей различного конструктивного исполнения, соосно установленных друг на друга и разделенных теплоизолирующими прокладками. Для формирования требуемого температурного поля в рабочем объеме, где располагается РК, используются 30 резистивных автономных рассредоточенных нагревательных элементов.

В соответствии с осевой симметрией установки, при составлении расчетной схемы ее вертикальный разрез разделен на 290 ячеек (N=58 по высоте и 5 по радиусу) (рис. 1, δ). Каждая ячейка обменивается тепловой энергией с соседними. На внешних поверхностях установки (границы Γ_2 - Γ_4) происходит конвективный теплообмен с окружающей средой. Обмен тепловой энергией между установкой и атрибутами рабочего пространства (границы Γ_5 , Γ_6) осуществляется с помощью теплопроводности и излучения.

Уравнение, описывающее тепловые процессы в каждой ячейке MTV и PK, имеет вид

$$(c\rho V)_{i,j} \frac{dT_{i,j}}{dt} = \sum_{s=1}^{5} Q_s, i = 1...N, j = 1...5,$$

где c – удельная теплоемкость, Дж/(кг·К); ρ – плотность, кг/м³; V – объем ячейки, м³; T – температура, К; t – время, с; Q_{1-4} – составляющие теплового потока, поступающего в рассматриваемую ячейку из соседних ячеек, Вт; Q_5 – тепловая мощность, выделяемая нагревателем, расположенным в соответствующей ячейке МТУ, Вт.

Рассмотрим формулы расчета тепловых потоков для внутренних ячеек i=2...N-1, j=2...4 расчетной схемы МТУ (рис. 2).

Тепловой поток через границу g₁:

$$Q_1 = 2S\lambda_{i,j} \frac{T_{i,j} - T_{g_1}}{\Delta r}.$$

Учитывая, что

$$T_{g_1} = \frac{T_{i,j-1}\lambda_{i,j-1}\Delta r_j + T_{i,j}\lambda_{i,j}\Delta r_{j-1}}{\lambda_{i,j-1}\Delta r_j + \lambda_{i,j}\Delta r_{j-1}}$$

получим

$$Q_1 = \frac{2S\lambda_{i,j}\lambda_{i,j-1}(T_{i,j} - T_{i,j-1})}{\lambda_{i,j-1}\Delta r_j + \lambda_{i,j}\Delta r_{j-1}},$$

где S – площадь боковой поверхности ячейки на границе g_1 , м².



- Рис. 1. Фрагмент МТУ с рабочим объемом, заполненным атрибутами, связанными с выращиванием кристаллов (а) и расчетная схема (б, штриховкой выделены ячейки, содержащие нагревательные элементы). Обозначения: 1) теплоизолирующий материал; 2) подставка установки; 3) нагревательные модули; 4) нагреватель; 5) РК (ампула с тиглем, содержащим рабочее вещество); 6) рабочее вещество; 7) подставка РК; Г₁₋₆ границы; L высота установки; г₁, г₂ радиусы рабочего объема и МТУ соответственно; δr расстояние между РК и поверхностью рабочего объема
- **Fig. 1.** Segment of multizone thermal installation with volumetric displacement filled with attributes related to crystal growing (a) and design model (b, the cells which contain heating elements are hatched). Symbols: 1) heat insulating material; 2) installation platform; 3) heating modules; 4) heater; 5) growth container (ampule with crucible containing working agent); 6) working agent; 7) growth container platform; Γ_{1-6} are the boundaries; L is the installation length; r_1 , r_2 are the radii of volumetric displacement and multizone thermal installation correspondingly; δr is the distance between the growth container and the volumetric displacement surface

Аналогично рассчитывается Q_2 . Тепловой поток через границу g_3 ,

$$Q_3 = S\lambda_{i,j} 2 \frac{T_{i,j} - T_{g_3}}{h_i}$$

Учитывая, что

$$T_{g_3} = \frac{T_{i-1,j}\lambda_{i-1,j}h_i + T_{i,j}\lambda_{i,j}h_{i-1}}{\lambda_{i-1,j}h_i + \lambda_{i,j}h_{i-1}}$$

получим

$$Q_{3} = \frac{2S\lambda_{i,j}\lambda_{i-1,j}(T_{i,j} - T_{i-1,j})}{\lambda_{i-1,j}h_{i} + \lambda_{i,j}h_{i-1}}$$

где S – площадь боковой поверхности ячейки на границе g_3 , м².

Аналогично, рассчитывается Q_4 .

Для расчета температур в ячейках, соприкасающихся с внешними поверхностями, используются граничные условия, определяемые конструктивным исполнением нагревательных модулей, свойствами используемых материалов, а также условиями взаимодействия модулей с окружающей средой и между собой, а именно:

• в силу радиальной симметрии (граница Г₁)

$$\left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=0} = 0;$$

 на поверхностях соприкасающихся элементов соблюдаются условия сопряжения в виде равенства тепловых потоков и температур

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial z}\Big|_{-} = \lambda \frac{\partial T}{\partial z}\Big|_{+}, \ \lambda \frac{\partial T}{\partial r}\Big|_{-} = \lambda \frac{\partial T}{\partial r}\Big|_{+}, \ T\Big|_{-} = T\Big|_{+};$$

 на нижней, верхней и боковой поверхностях МТУ (границы Г₂, Г₃, Г₄) выполняются условия равенства теплового потока от МТУ в окружающую среду и равенство температур на границах



- Рис. 2. Составляющие теплового потока, поступающего в ячейку (i,j) (a) и расчетная схема РК (б). Обозначения: g₁₋₄ и h_i − границы и высота i-го слоя по вертикальной координате, соответственно; Δr_i − линейный размер (i,j)-й ячейки в радиальном направлении
- **Fig. 2.** Components of thermal flow ingoing into a cell (i,j) (a) and design model of the growth container (b). Symbols: g_{i-4} and h_i are the boundaries and the length of i-layer along the vertical coordinate respectively; Δr_j is the linear dimension of (i,j)-cell in radial direction

$$\begin{split} \lambda \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=+0} &= \alpha_b (T \big|_{z=-0} - T_0), \ T \big|_{z=-0} = T \big|_{z=+0}, \\ &- \lambda \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=-0} = \alpha_t (T \big|_{z=-0} - T_0), \ T \big|_{z=-0} = T \big|_{z=-0}, \\ &- \lambda \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=r_2-0} = \alpha_w (T \big|_{r=r_2+0} - T_0), \ T \big|_{r=r_2-0} = T \big|_{r=r_2+0}, \end{split}$$

где α_b , α_t , α_w – коэффициенты теплоотдачи нижней, верхней и боковой поверхностей, Вт/(м²·К); T_0 – температура окружающей среды;

на внутренней поверхности рабочего объема МТУ (граница Γ₅) и боковой поверхности РК (граница Γ₆)

$$\begin{aligned} -\lambda \frac{\partial T}{\partial r} \bigg|_{r=r_1-0} &= \\ &= \alpha_{wv}(T|_{r=r_1-0} - T|_{r=r_1-\delta r+0}) + \varepsilon \sigma(T^4|_{r=r_1-0} - T^4|_{r=r_1-\delta r+0}), \\ &T|_{r=r_1-0} = T|_{r=r_1+0}, \end{aligned}$$

где ε – приведенная степень черноты; σ – постоянная Стефана-Больцмана, Вт/(м²·К⁴); α_{wv} – коэффициент теплоотдачи поверхности рабочего объема, Вт/(м²·К).

Положение фронта кристаллизации $z_{cr}(t)$ определяется изотермой расплава $T(z_{cr}(t),t)=T_m$, где T_m – температура кристаллизации.

На нижней границе РК выполняются условия:

$$\begin{split} \lambda_{a} \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=z_{b}(t)=0} = \begin{cases} \lambda_{s} \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=z_{b}(t)=0}, \ T_{z=z_{b}(t)} < T_{m}; \\ \lambda_{l} \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=z_{b}(t)=0}, \ T_{z=z_{b}(t)} > T_{m}; \end{cases} \\ T \Big|_{z=z_{b}(t)=0} = T \Big|_{z=z_{b}(t)=0}, \end{split}$$

где λ_a , λ_s , λ_l – коэффициенты теплопроводности РК, кристалла и расплава соответственно.

Аналогично записываются граничные условия для поверхности расплав-пар рабочего вещества.

Для учета теплоты кристаллизации на границе фазового перехода, согласно [20, 25–28], используется эффективная теплоемкость рабочего вещества

$$c_{effr} = c(T) + \frac{1}{\rho} L_{cr} \delta(T - T_m),$$

где $\delta(T-T_m)$ – дельта функция; L_{cr} – теплота кристаллизации.

Длина выращиваемого кристалла по радиальным сечениям *j*=1 и *j*=2 равна

$$l_{cr}(t) = z_{cr}(t) - z_{b}(t), \ z_{b}(t) \le z_{cr}(t) \le z_{t}(t)$$

Таким образом, текущая мгновенная скорость роста кристалла по сечениям j=1 и j=2 с учетом направления движения РК определяется алгебраической суммой двух слагаемых – постоянной заданной скорости $V_{\scriptscriptstyle o} = -\frac{dz_{\scriptscriptstyle b}(t)}{dt}$ механического пере-

мещения РК относительно установки в область более низких температур и переменной величины, зависящей от скорости изменения положения изотермы кристаллизации за счет изменения температурного поля по высоте РК при его перемещении

$$V = \begin{cases} 0, z_{cr}(t) \le z_{b}(t); \\ \frac{dl_{cr}(t)}{dt} = V_{o} + \frac{dz_{cr}(t)}{dt}, z_{b}(t) \le z_{cr}(t) \le z_{t}(t); \\ 0, z_{t}(t) \le z_{cr}(t). \end{cases}$$

(0

Следовательно, изменение длины растущего кристалла происходит как за счет перемещения РК, так и из-за смещения положения изотермы кристаллизации относительно установки, которое может быть вызвано изменением температурного поля по высоте контейнера.

Масса выращенного кристалла $m_{cr} = \rho_{cr} S \int V dt$, где t_{cr0}, t_{crk} – время начала и окончания процесса об-

разования кристалла; S – площадь поперечного сечения РК.

Для решения системы дифференциальных уравнений, описывающих тепловые процессы при выращивании кристаллов в МТУ, используется явная схема конечно-разностной аппроксимации производных. Это вызвано тем, что время установления переходных процессов температуры в МТУ составляет десятки минут [23]. Следовательно, при шагах по времени порядка 1 с должна наблюдаться высокая точность расчета температур, а вычислительные возможности современных ПЭВМ позволяют получить решение задачи за приемлемое время.

Расчетные формулы для вычисления температур в выделенных элементах записываются в виде

$$T_{i,j}^{k+1} = T_{i,j}^{k} + dt \cdot F_{i,j}^{k},$$

$$F_{i,j}^{k} = \frac{1}{(c\rho V)_{i,j}} \cdot \sum_{s=1}^{5} Q_{s}^{k},$$

$$T_{i,j}^{0} = T_{i,j}^{*}, \ i = 1...N; \ j = 1...5; \ k = 0, 1, ...,$$

где dt – шаг, с; k – номер шага по времени; $T_{i,i}^*$ – температурное поле, полученное в результате расчета стационарного состояния МТУ при верхнем положении РК, предшествующем началу процесса выращивания кристалла.

Для оценки достоверности результатов расчета температурного поля МТУ с помощью разработанной модели проведено сравнение стационарных осевых распределений температуры, полученных на приведенной модели и модели МТУ, реализованной в пакете программ Comsol Multiphysics [23]. Расчеты проводились при формировании в рабочем объеме установки стационарного распределения температуры для 50 % мощности нагревателей и начального положения РК *z*_{*b*}=0,7 м.

Сравнительная характеристика полученных результатов позволяет сделать вывод: несмотря на то, что расчетная схема предлагаемой модели МТУ содержит число выделенных элементов на два порядка меньше, чем модель, реализованная в Comsol Multiphysics, температурные поля при соответствующей настройке коэффициентов предлагаемой модели имеют хорошее совпадение. Это дает основание для проведения вычислительных экспериментов на разработанной модели по решению различных задач, возникающих при выращивании кристаллов. Одной из таких задач является выявление различий характеристик роста кристалла при наличии и отсутствии систем регулирования температурного поля проектируемых установок.

На рис. 3 приведены осевые распределения температуры в рабочем объеме МТУ при одинаковых выделениях тепловой мощности и различных положениях РК.



Осевое распределение температуры в рабочем объе-Рис. З. ме МТУ при различных положениях РК. Обозначения: 1) z_b=0,53; 2) z_b=0,43; 3) z_b=0,29 м

Axial temperature distribution in volumetric displace-Fig. 3. ment of multizone thermal installation at different positions of the growth container: 1) $z_b=0,53$; 2) $z_b=0,43$; 3) $z_{\rm h}=0,29~m$

РК в начальный момент времени *t=k=*0 расположен на подставке при $z_{k}(0)=0.53$ м. Такому состоянию соответствует первое осевое распределение температуры (рис. 3). Так как положение изотермы кристаллизации ($T_m = 1020$ K) $z_{cr}(0) = 0,515$ м, то рабочее вещество находится в расплавленном состоянии. Имитация роста кристалла производится путем продольного осевого перемещения РК вниз. Шаг по времени dt принят равным 0,5 с. Поведение оценок характеристик роста кристалла при неизменном осевом распределении температуры в рабочем объеме, соответствующем $T_{i,j}^*$, и неизменном положении фронта кристаллизации относительно установки приведено на рис. 4.



Рис. 4. Оценки роста кристалла при T^k_{ij}=T^{*}_{ij} (i=1...58; j=1...5; k=0,1,...)

Fig. 4. Estimates of crystal growth at $T_{i,j}^{k}=T_{i,j}^{*}$ (i=1...58; j=1...5; k=0,1,...)

Скорость перемещения РК принята равной $3 \cdot 10^{-6}$ м/с. На интервале времени между точками *А* и *В* происходит рост кристалла. Длина ожидаемого кристалла составляет 0,185 м, масса 2,32 кг, время выращивания ~17,18 ч, а скорость роста кристалла совпадает со скоростью перемещения РК.

Однако в реальности в процессе выращивания кристалла происходит деформация температурного поля как РК, так и МТУ. Рассмотрим влияние перемещения РК из верхнего положения в нижнее на характеристики роста кристалла и изменение температур при отключенных регуляторах температуры (рис. 5), тепловые мощности нагревателей МТУ определены с помощью алгоритма оценки тепловых мощностей [28]. В качестве начального температурного поля принято $T_{i,i}^{0}=T_{i,i}^{*}$.

Из результатов расчета, представленных на рис. 5, видно, что в отличие от идеализированного варианта скорость роста кристалла отличается от скорости перемещения РК. Происходит отставание начала роста кристалла в связи со смещением изотермы кристаллизации в низкотемпературную область рабочего объема (<0,51 м). Затем наблюдается рост кристалла со скоростью, превышающей скорость снижения контейнера. Это вызвано смещением положения температуры кристаллизации в градиентную область рабочего объема. Продолжительность роста кристалла снижается по сравнению со временем выращивания кристалла в идеализированном режиме работы. В конце процесса выращивания кристалла наблюдаются неравномерные участки роста, вызванные неоднородностью структуры термической установки. Осевое распределение температуры в процессе выращивания кристалла заметно изменяется (рис. 3, распределения 2 и 3).



Рис. 5. Оценки роста кристалла при отключенных регуляторах температуры

Fig. 5. Estimates of crystal growth at switched off temperature regulators



Рис. 6. Оценки роста кристалла при стабилизации температурного поля установки с помощью ПИД-регуляторов

Fig. 6. Estimates of crystal growth at stabilization of the installation temperature field by PID-controllers

Результаты моделирования роста кристалла при стабилизации температурного поля установки с помощью системы управления на базе ПИД-регуляторов [21] (уставки регуляторов температуры нагревателей=const) приведены на рис. 6, 7.

Выполненные расчеты показывают, что, несмотря на поддержание заданного температурного поля в установке системой управления на основе ПИД-регуляторов, распределение температуры в РК в процессе выращивания кристалла претерпе-



Рис. 7. Осевое распределение температуры в рабочем объеме МТУ при стабилизации температурного поля для различных положений РК. Обозначения: 1) z_b=0,53; 2) z_b=0,43; 3) z_b=0,29 м

Fig. 7. Axial temperature distribution in volumetric displacement of multizone thermal installation at temperature field stabilization for different positions of the growth container: 1) z_b =0,53; 2) z_b =0,43; 3) z_b =0,29 m

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Алферов Ж.И., Андреев В.М., Румянцев В.Д. Тенденции и перспективы развития солнечной фотоэнергетики // Физика и техника полупроводников. – 2004. – Т. 38. – № 8. – С. 937–948.
- Наумов А.В. Рынок солнечной энергетики: кризис и прогноз // Известия вузов. Материалы электронной техники. – 2009. – № 2. – С. 4–12.
- Численное моделирование теплофизических процессов при выращивании кристаллов мультикремния методом Бриджмена-Стокбаргера / В.С. Бердников, М.В. Филиппова, Б.А. Красин, А.И. Непомнящих // Теплофизика и Аэромеханика. – 2006. – Т. 13. – № 2. – С. 275–293.
- Попов В.Н. Тепломассоперенос в установке получения поликремния методом Бриджмена // Математическое моделирование. – 2010. – Т. 22. – № 6. – С. 38–48.
- Марков А.В. Выращивание монокристаллов арсенида галлия с высоким структурным совершенством методом вертикально направленной кристаллизации // Известия вузов. Материалы электронной техники. – 2006. – № 6. – С. 16–19.
- Shay J.L., Wernick J.H. Ternary Chalcopyrite Semiconductors: Growth, Electronic Properties, and Applications. – N.Y.: Pergamon press, 1979. – 244 p.
- Kral R. Study on influence of growth conditions on position and shape of crystal/melt interface of alkali lead halide crystals at Bridgman growth // Journal of Crystal Growth. - 1982. -V. 360. - P. 162-166.

вает изменения, что приводит к отклонению характеристик роста кристалла (рис. 6) от идеализированных (рис. 4). Например, продолжительность процесса выращивания кристалла в идеализированном варианте, на ~23 % больше продолжительности при стабилизированном температурном поле и на 40 % больше, чем в процессе выращивания без стабилизации температур. Кроме того, в последних случаях характер роста кристалла во времени явно отличается от линейного, что может быть причиной неоднородности свойств выращенных кристаллов в МТУ рассматриваемого типа [29].

Выводы

- 1. Модель, разработанная на основе балансовых отношений для принятой расчетной схемы, пригодна при оперативном решении задач, возникающих как на этапе проектирования новых конструкций термических установок, так и на этапе выращивания кристаллов.
- Результаты вычислительных экспериментов показывают, что фактическое время выращивания кристалла может существенно отличаться от запланированного.
- 3. Из-за смены положения изотермы кристаллизации, вызванной изменением температурного поля в ростовом контейнере, возможно подплавление уже выращенного кристалла, т. е. скорость роста кристалла не является постоянной величиной, что необходимо учитывать как при экспериментальном выращивании кристаллов, так и проектировании новых установок.
- Jones C.L., Capper P., Gosney J.J. Thermal modelling of Bridgman crystal growth // Journal of Crystal Growth. – 1982. – V. 56. – № 3. – P. 581–590.
- Factors affecting isotherm shape during Brigman crystal growth / C.L. Jones, P. Capper, J.J. Gosney, I. Kenworthy // Journal of Crystal Growth. - 1984. - V. 69. - № 2-3. -P. 281-290.
- Chin L., Carlson F.M. Finite element analysis of the control of interface shape in Bridgman crystal growth // Journal of Crystal Growth. - 1983. - V. 62. - № 3. - P. 561-567.
- Кузнецов О.А., Повещенко Ю.А., Чернышенко О.В. Расчет температурных полей при кристаллизации слитков вертикальным методом Бриджмена // Математическое моделирование. Получение монокристаллов и полупроводниковых структур. – М.: Наука, 1986. – С. 186–192.
- Civan F., Sliepcevich C.M. Limitation in the apparent heat capacity formulation for heat transfer with phase change // Proc. Okla. Acad. Sci. - 1987. - V. 67. - P. 83-88.
- A transparent multizone furnace for crystal growth and flow visualization / C.W. Lan, D.T. Yang, C.C. Ting, F.C. Chen // Journal of Crystal Growth. – 1994. – V. 141. – № 3–4. – P. 373–378.
- Martinez-Tomas C., Muñoz V., Triboule R. Heat transfer simulation in a vertical Bridgman CdTe growth configuration // Journal of Crystal Growth. – 1999. – V. 197. – № 3. – P. 435–442.
- On-line control of solid-liquid interface by state feedback / C. Batur, A. Srinivasan, W.M.B. Duval, N.B. Singth, D. Golovaty // Journal of Crystal Growth. - 1999. - V. 205. - № 3. -P. 395-409.

- Rudman M. A volume-tracking method for incompressible multifluid flows with large density variations // Int. J. Numer. Meth. Fluids. - 1998. - V. 28. - P. 357-378.
- Математическое моделирование и экспериментальные исследования влияния температурных градиентов на процессы кристаллизации для земных и космических условий / В.И. Стрелов, Б.Г. Захаров, В.С. Сидоров и др. // Кристаллография. 2005. Т. 50. № 3. С. 536–544.
- Interface shape control using localized heating during Bridgman growth / M.P. Volz, K. Mazuruk, M.D. Aggarwal, A. Cröll // Journal of Crystal Growth. - 2009. - V. 311. - № 8. -P. 2321-2326.
- Numerical simulation of crystal growth in vertical Bridgman furnace / M.J. Crochet, F. Dupret, Y. Ryckmans et al. // Journal of Crystal Growth. – 1989. – V. 97. – № 1. – P. 173–185.
- Swaminathan C.R., Voller V.R. A general enthalpy method for modelling solidification processes // Metallurgical Transactions B. - 1992. - V. 23B. - P. 651-664.
- Филиппов М.М., Грибенюков А.И., Бабушкин Ю.В. Система управления технологическим процессом выращивания кристаллов методом Бриджмена // Датчики и системы. – 2012. – № 6. – С. 2–5.
- Martinez-Tomas C., Muñoz V. CdTe crystal growth process by the Bridgman method: numerical simulation // Journal of Crystal Growth. - 2001. - V. 222. - № 3. - P. 435-451.

- 23. Применение математической модели для сопровождения процесса выращивания кристаллов в многозонных термических установках / М.М Филиппов., А.И. Грибенюков, В.Е. Гинсар, Ю.В. Бабушкин // Изв. вузов. Материалы электронной техники. – 2013. – № 2. – С. 26–31.
- Трубчатая печь: пат. 1830132 СССР. МПК⁵ F27B 5/06. Заявл. 22.01.91; опубл. 23.07.1993. – Бюл. № 27. – 8 с.
- 25. Авдонин Н.А. Математическое описание процессов кристаллизации. – Рига: Зинатне, 1980. – 180 с.
- Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Вычислительная теплопередача. – М.: Едиториал УРСС, 2003. – 784 с.
- 27. Кабанов П.Г. Математическое моделирование процесса кристаллизации жидкого металла в условиях внешнего воздействия // Сибирский журнал индустриальной математики. – 2007. – Т. Х. – № 4 (32). – С. 55–60.
- 28. Алгоритм оценки мощностей нагревательных элементов в многозонной установке для выращивания кристаллов по Бриджмену / М.М. Филиппов, Ю.В. Бабушкин, А.И. Грибенюков, В.Е. Гинсар // Известия Томского политехнического университета. – 2009. – Т. 315. – № 2. – С. 110–112.
- Investigation of ZnGeP₂ crystals by X-Ray topography methods / A.O. Okunev, G.A. Verozubova, V.A. Staschenko, M.M. Philippov // 11th Biennial Conference on High Resolution X-Ray Diffraction and Imaging. – St. Petersburg, 2012. – P. 187.

Поступила 21.04.2014.

UDC 621.315.592+004.942

MACROMODEL OF THERMAL PROCESSES IN THE INSTALLATION FOR SOLAR CELL CRYSTAL GROWTH BY BRIDGMAN METHOD

Yuri V. Babushkin,

Cand. Sc., National Research Tomsk Polytechnic University, 30, Lenin Avenue, Tomsk, 634050, Russia. E-mail: am@tpu.ru

Maksim M. Philippov,

Cand. Sc., National Research Tomsk Polytechnic University, 30, Lenin Avenue, Tomsk, 634050, Russia. E-mail: nauka@tpu.ru

Xuan Hung Nguyen,

post-graduate student, National Research Tomsk Polytechnic University, 30, Lenin Avenue, Tomsk, 634050, Russia. E-mail: am@tpu.ru

Aleksandr I. Gribenyukov,

Cand. Sc., Institute of monitoring of climatic and ecological systems SB RAS, 10/3, Academic Avenue, Tomsk, 634055, Russia. E-mail: loc@imces.ru

The necessity for solar cell efficiency increase is caused by continuously increased requirements to solar energy. It is possible to improve the cell efficiency using more qualitative elements. The study is devoted to the solution of the problem of developing the mathematical models to solve scientific-technical tasks aimed at improving the quality of silicon grown by Bridgman technique. **The main aim of the study** is to develop the mathematical model that allows forecasting crystal growth in variable thermal conditions

in real-time mode with acceptable accuracy.

The methods used in the study. The developed model is implemented on the base of the method of elementary balances adopted for the calculation scheme in Matlab. The model allows evaluating the temperature field installation, exploring the mutual influence of thermal processes in the system "growth container - thermal installation", simulating thermal processes in the installation at all stages of crystal growth, as well exploring various algorithms of controlling thermal power of heaters.

The results. The authors obtained the estimations of both crystallization isotherm position and crystal growth rate for the vertical Bridgeman technique with mechanical movement of growth container. On the basis of these estimations the conclusion was made that a change of the temperature field in the growth container at its mechanical movement results in sufficient influence on crystallization isotherm position. The growth rate in this case can reach the area of negative values that will lead to partial melting of the grown crystal. Besides, the actual time of crystal growth may differ significantly from the planned one on base of assumption about constant growth rate. The data obtained by calculations should be taken in attention at design of new facilities and when planning the experimental works on crystal growth.

Key words:

Renewable energy, multi-crystalline silicon, photoelectric converters, modeling of crystal growth, Bridgman technique, method of elementary balances, thermal field, multizone thermal installation.

REFERENCES

- Alferov Zh.I., Andreev V.M., Rumyantsev V.D. Tendentsii i perspektivy razvitia solnechnoy fotoenegetiki [Solar Photovoltaics: Trends and Prospects]. *Semiconductors*, 2004, vol. 38, no. 8, pp. 899–908.
- Naumov A.V. Rynok solnechnoy energetiki: krizis i prognoz [The solar energy market: crisis and forecast]. *Materialy elektronnoy* tekhniki, 2009, no. 2, pp. 4–12.
- Berdnikov V.S., Philippova M.V., Krasin B.A., Nepomnyashchikh A.I. Chislennoe modelirovanie teplofizicheskikh protsessov pri vyratshchivanii kristallov multikremniya metodom Bridjmena-Stokbargera [Numerical simulation of thermal processes when growing multicrystalline silicon crystal by the Bridgman-Stockbarger method]. *Thermophysics and Aeromechanics*, 2006, vol. 13, no. 2, pp. 275-293.
- Popov V.N. Teplomassoperenos v ustanovke polucheniya polikremniya metodom Bridjmana [Heat and mass transfer in the plant for polysilicon by the Bridgman method]. *Matematicheskoe modelirovanie*, 2010, vol. 22, no. 6, pp. 38–48.
- Markov A.V. Vyrashchivanie monokristallov arsenida galliya s vysokim strukturnym sovershenstvom metodom vertikalno napravlennoy kristallizatsii [Growing single crystals of gallium ar-

senide with high structural perfection of the method vertically oriented crystallization]. *Materialy elektronnoy tekhniki*, 2006, no. 6, pp. 16–19.

- Shay J.L., Wernick J.H. Ternary Chalcopyrite Semiconductors: Growth, Electronic Properties, and Applications. N.Y., Pergamon press, 1979. 244 p.
- Kral R. Study on influence of growth conditions on position and shape of crystal/melt interface of alkali lead halide crystals at Bridgman growth. *Journal of Crystal Growth*, 1982, vol. 360, pp. 162-166.
- Jones C.L., Capper P., Gosney J.J. Thermal modelling of Bridgman crystal growth. *Journal of Crystal Growth*, 1982, vol. 56, no. 3, pp. 581-590.
- Jones C.L., Capper P., Gosney J.J., Kenworthy I. Factors affecting isotherm shape during Brigman crystal growth. *Journal of Crystal Growth*, 1984, vol. 69, no. 2–3, pp. 281–290.
- Chin L., Carlson F.M. Finite element analysis of the control of interface shape in Bridgman crystal growth. *Journal of Crystal Growth*, 1983, vol. 62, no. 3, pp. 561–567.
- Kuznetsov O.A., Poveshchenko Yu.A., Chernyshenko O.V. Raschet temperaturnykh poley pri kristallizatsii slitkov vertikalnym metodom Bridzhmena. Matematicheskoe modelirovanie. Po-

luchenie monokristallov i poluprovodnikovykh struktur [The calculation of temperature fields at solidification of ingots by vertical Bridgman method. Mathematical modeling. Obtaining single crystals and semiconductor structures]. Moscow, Nauka Publ., 1986. pp. 186–192.

- Civan F., Sliepcevich C.M. Limitation in the apparent heat capacity formulation for heat transfer with phase change. *Proc. Okla. Acad. Sci.*, 1987, vol. 67, pp. 83–88.
- Lan C.W., Yang D.T., Ting C.C., Chen F.C. A transparent multizone furnace for crystal growth and flow visualization. *Journal* of Crystal Growth, 1994, vol. 141, no. 3–4, pp. 373–378.
- Martinez-Tomas C., Muñoz V., Triboule R. Heat transfer simulation in a vertical Bridgman CdTe growth configuration. *Journal* of Crystal Growth, 1999, vol. 197, no. 3, pp. 435–442.
- Batur C., Srinivasan A., Duval W.M.B., Singth N.B., Golovaty D. On-line control of solid-liquid interface by state feedback. *Journal of Crystal Growth*, 1999, vol. 205, no. 3, pp. 395–409.
- Rudman M. A volume-tracking method for incompressible multifluid flows with large density variations. Int. J. Numer. Meth. Fluids, 1998, vol. 28, pp. 357–378.
- 17. Strelov V.I., Zaharov B.G., Sidorov V.S. Matematicheskoe modelirovanie i eksperimentalnye issledovaniya vliyaniya temperaturnykh gradientov na protsessy kristallizatsii dlya zemnykh i kosmicheskikh usloviy [Mathematical modeling and experimental study of the influence of temperature gradients on the crystallization processes for terrestrial and space conditions]. Crystallography Reports, 2005, vol. 50, no. 3, pp. 536–544.
- Volz M.P., Mazuruk K., Aggarwal M.D., Cröll A. Interface shape control using localized heating during Bridgman growth. *Journal* of Crystal Growth, 2009, vol. 311, no. 8, pp. 2321–2326.
- Crochet M. J., Dupret F., Ryckmans Y. and all. Numerical simulation of crystal growth in vertical Bridgman furnace. *Journal of Crystal Growth*, 1989, vol. 97, no. 1, pp. 173–185.
- Swaminathan C.R., Voller V.R. A general enthalpy method for modelling solidification processes. *Metallurgical Transactions B*, 1992, vol. 23B, pp. 651–664.
- Philippov M.M., Gribenyukov A.I., Babushkin Yu.V. Sistema upravleniya tekhnologicheskim protsessom vyrashchivaniya kristallov metodom Bridzhmena [Control system for technological

process of crystal growth by Bridgman technique]. *Datchiki i sistemy*, 2012, no. 6, pp. 2–5.

- Martinez-Tomas C., Muñoz V. CdTe crystal growth process by the Bridgman method: numerical simulation. *Journal of Crystal Growth*, 2001, vol. 222, no. 3, pp. 435–451.
- 23. Philippov M.M., Gribenyukov A.I., Ginsar V.E., Babushkin Yu.V. Primenenie matematicheskoy modeli dlya soprovozdeniya protsessa vyrashchivaniya kristallov v mnogozonnykh termicheskikh ustanovkakh [Application of mathematical model for crystal growing in multizone thermal installations]. *Materialy elektronnoy tekhniki*, 2013, no. 2, pp. 26–31.
- Ginsar V.E., Desyatov V.A. Trubchataya pech [Tube furnace]. Patent USSR, no. 1830132, 1991.
- Avdonin N.A. Matematicheskoe opisanie protsessov kristallizatsii [The mathematical description of crystallization processes]. Riga, Zinatne Publ., 1980. 180 p.
- Samarskiy A.A., Vabishchevich P.N. Vychislitelnaya teploperedacha [Computational heat transfer]. Moscow, Editorial URSS, 2003. 784 p.
- 27. Kabanov P.G. Matematicheskoe modelirovanie protsessa kristallizatsii zhidkogo metalla v usloviyakh vneshnego vozdeystviya [Mathematical modeling of the liquid metal crystallization under external influence]. Journal of Applied and Industrial Mathematics, 2007, vol. 10, no. 4 (32), pp. 55–60.
- Philippov M.M., Babushkin Yu.V., Gribenyukov A.I., Ginsar V.E. Algoritm otsenki moshchnostey nagrevatelnykh elementov v mnogozonnoy ustanovke dlya vyrashchivaniya kristallov po Bridzhmenu [Algorithm of estimating heating element power in multiregion device for crystal growth by Bridgman]. Bulletin of the Tomsk Polytechnic University, 2009, vol. 315, no. 2, pp. 110–112.
- Okunev A.O., Verozubova G.A., Staschenko V.A., Philippov M.M. Investigation of ZnGeP₂ crystals by X-Ray topography methods. 11th Biennial Conference on High Resolution X-Ray Diffraction and Imaging. St. Petersburg, 2012. pp. 187.

Received: 21 April 2014.