

椭圆柱 Bridgman 炉生长 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 晶体时固/液界面形状的数值模拟*

王培林¹ 白 红² 杨晶琦¹

(1 哈尔滨工业大学航天电子与光电工程系 哈尔滨 150001)

(2 哈尔滨工业大学数学系 哈尔滨 150001)

摘要 用三维数值模拟方法研究了椭圆柱 Bridgman 炉生长 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 晶体时固/液界面附近的温度分布, 考察了安瓿位置、安瓿与炉膛直径相对大小以及炉膛温度分布等对固/液界面的影响情况。结果表明, 椭圆柱 Bridgman 炉内的特殊温度场分布有可能提高晶片上横向组分均匀性。

PACC: 6150C, 4410, 0260

1 引言

$\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ (碲镉汞) 作为红外探测器材料, 其最大优点是量子效率高, 并且通过调整组分可使器件选择不同的响应波段^[1]。但材料制备技术难度很大, 获得组分均匀的大块晶体相当困难, 这已成为限制碲镉汞红外探测器发展的关键。在由熔体生长晶体的诸方法中, 如 Bridgman 法、富碲溶剂法、移动加热器法等, 结晶时固/液界面形状直接影响晶体的组分均匀性。因此设计合适的温度场, 调整固/液界面形状使之有利于提高晶体径向组分均匀性和消除边缘杂散晶核是至关重要的。

对于垂直稳态 Bridgman 法 (熔体在上、固体在下) 而言, 由于一定厚度的石英安瓿、熔体以及晶体导热系数不匹配, 一般在整个晶体生长过程中固/液界面都是凹向上形。汞的比重较大, 会不断地向凹形界面谷点集中, 而富汞熔体的结晶温度下降, 这使固/液界面凹向上现象更加严重。因此所得到的晶锭横断面上的径向组分往往呈同心圆分布, 无法利用较大尺寸的晶片进行焦平面探测器的制作。为了提高 Bridgman 法生长的晶体的利用率, 有人^[2]采用偏心 Bridgman 方法, 该技术将安瓿轴线偏离炉膛中心轴线, 生长晶体时固/液界面呈倾斜状。然后对晶锭按倾斜方向切片 (即按生长时固/液界面方向切片), 所得椭圆形晶片中晶体横向组分分布均匀性有所提高。文献^[3]用数值模拟方法再次对这种方法进行了研究, 认

* 国家自然科学基金 (59502010) 资助项目

王培林 男, 1960 年生, 副教授 (在职博士生), 从事半导体晶体生长与数值模拟研究
1996-11-19 收到, 1997-09-15 定稿

为应用该技术生长晶体时, 固/液界面呈偏心凹向上形, 即凹形谷心偏离安瓿横截面的几何中心, 固/液界面的大部分为倾斜面。对晶锭倾斜切片, 能使得到的椭圆形晶片大部分面积上的组分均匀性有明显提高。但是, 由于炉膛形状和安瓿相对尺寸的限制, 尚不能使固/液界面实现理想的倾斜平面。

本文提出用椭圆柱 Bridgman 炉进行 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 晶体生长的设想, 并用数值模拟方法对固/液界面受这种特殊温度场的影响情况进行研究。探讨获得倾斜平面的固/液界面的可能性, 对寻求提供焦平面用大块 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 晶体制备新方法具有指导意义。

2 计算模型

图 1 所示为椭圆柱 Bridgman 炉生长 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 晶体系统的模型及计算域。整个系统与经典 Bridgman 晶体生长系统相似, 只是梯度炉横截面呈椭圆形。安瓿轴线与椭圆长轴相

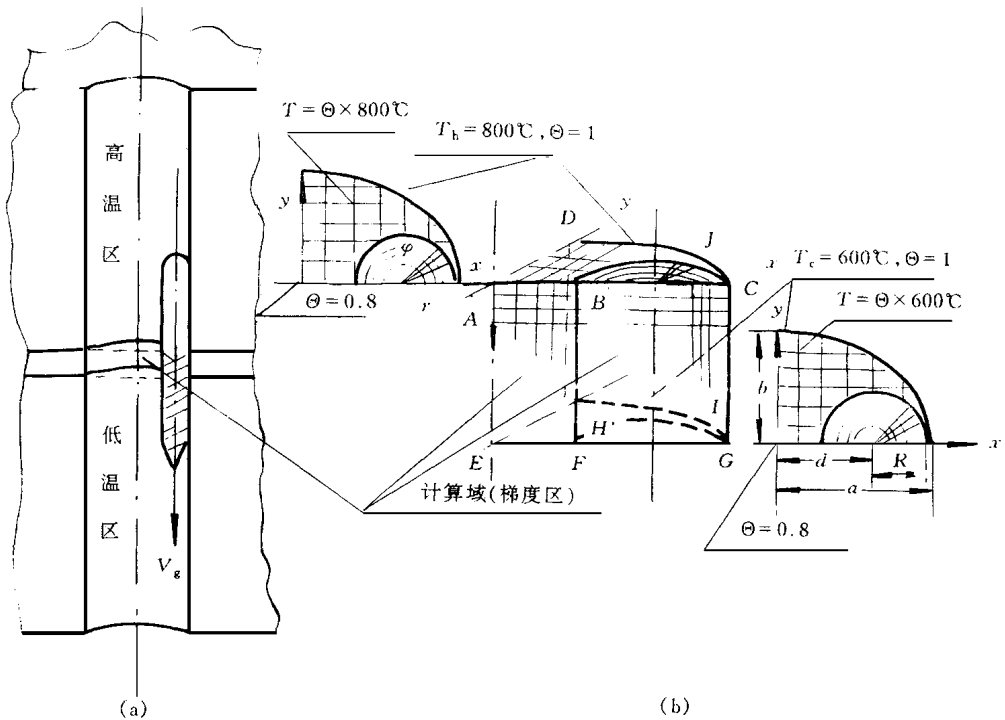


图 1 (a) 椭圆柱 Bridgman 炉生长 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 晶体系统模型

(b) 计算域及网格剖分方法

交并垂直于横截面, 与椭圆柱 Bridgman 炉中心轴线的距离设成变量 d 作为数值模拟研究的对象之一。另外, 椭圆长轴 a 、短轴 b 、安瓿半径 r 以及炉膛温度分布都是在计算中考察的参量及因素。装好材料的安瓿以拉晶速度 v_g 从高温区向低温区移动, 在梯度区熔体凝固结晶, 当整个晶体全部进入低温区后, 晶体生长结束。由于重点要研究固/液界面情况, 故只将整个梯度区作为计算域。

2.1 椭圆柱 Bridgman 炉温度场设计

根据以往针对经典 Bridgman 炉的数值模拟研究工作^[4,5], 高温区温度 $T_h = 800$, 低温

区温度 $T_c = 600$, 梯度区内由于无热源, 其结晶温度附近的等温面近似为平行平面. 在这种分布形式的温度场中, 炉膛横截面上安瓿中心相对炉膛中心几何位置改变与否对固/液界面不会产生明显的影响, 炉膛形状的变化也不会对固/液界面造成影响. 以前在用数值模拟的方法研究偏心 Bridgman 系统用于碲镉汞晶体生长时^[3], 对炉膛温度场设计作了特殊考虑: 根据 Dakhouf^[6] 研究结果, 适当降低低温区温度, 使梯度区内的温度分布处于中心低边缘高的状态, 即等温面呈凸向上曲面. 同时梯度区上边界及以上区域炉膛壁温为 $T_h = 800$, 梯度区下边界炉膛壁温为 $T_c = 600$.

用与此相类似的方法设计椭圆柱 Bridgman 炉温度场, 如图 1 所示. 梯度区上边界及高温区温度为 $T_h = 800$ 、梯度区下边界为 $T_c = 600$. 考虑到实际 Bridgman 炉在制造技术上很难实现真正的梯度区绝热条件, 因此在计算中假设在梯度区范围内炉膛边界上的温度由 800 线性下降到 600 . 计算中将梯度区等距划分为 100 个横截面. 每个横截面上用直角坐标系建立温度方程并确定温度分布. 在热传导方程中设置一项由低温区产生的源项. 具体无量纲方程形式为:

$$\frac{\partial^2 \Theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Theta}{\partial y^2} + s(n) = 0 \quad (1)$$

边界条件为:

$$\text{炉膛边界: } T = 800 - \frac{800 - 600}{100} n \quad \left(\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1 \right) \quad (2)$$

$$\text{椭圆长轴上: } \partial \Theta / \partial x = 0 \quad (Y = 0) \quad (3)$$

$$\text{椭圆短轴上: } \partial \Theta / \partial y = 0 \quad (X = 0) \quad (4)$$

上式中 n 为从梯度区上边界算起所划分的横截面层数; $s(n)$ 为横截面层数 n 的函数, 实际为冷源; $\Theta = (T - T_c) / (T_h - T_c)$ 为无量纲温度; X, Y 为无量纲坐标分量; a, b 分别为椭圆的长轴、短轴.

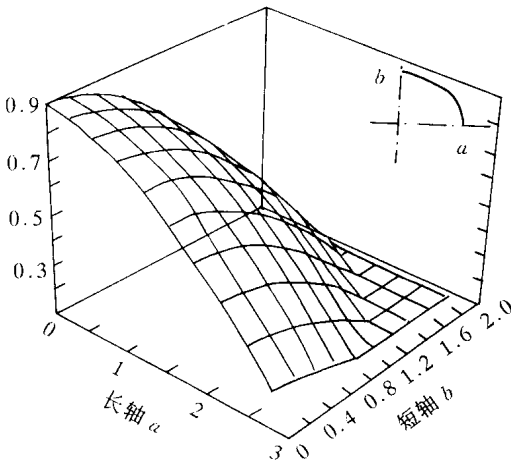


图 2 椭圆柱 Bridgman 炉梯度区内 $\Theta = 0.5$ 等温面

在整个梯度区内各等温面形状与图 2 所示 $\Theta = 0.5$ 的等温面相类似.

2.2 安瓿中介质的无量纲热传输方程

实际的 Bridgman- $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 晶体生长系统, 安瓿壁厚一般为 3mm 左右, 石英材料的导热系数比较大, 因此安瓿壁的存在对其中介质 ($\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 材料) 温度场分布是有影响的. 要对其影响作用进行研究, 还要划分出安瓿壁计算域, 介质与安瓿的边界条件处理也很复杂, 在文献[5, 7]中曾经对此进行过研究. 这里暂不考虑安瓿壁的影响, 同时不考虑结晶时固/液界面上的潜热释放, 并且将整个计算域看作同一种介质, 即不考虑固相和液相导热系数及密度的差异. 由于所要模拟研究的实际梯度区高度只有 1cm 左右, 故不考虑固/液界面附近的对流情况, 介质只存在沿 z 轴方向的拉晶运动, 忽略热辐射效应.

在柱坐标系下建立图 1 所示安瓿中介质的定常状态下热传输方程^[8]:

$$\frac{k}{\rho c_p} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] - V_g \frac{\partial T}{\partial z} = 0 \quad (5)$$

式中 k 是导热系数; ρ 是密度; c_p 是比热; V_g 是拉晶速度 用 $\frac{k}{\rho c_p r}$ 对速度进行无量纲化, 用 π 对坐标分量 φ 进行无量纲化, 用安瓿半径 r 对坐标分量 r, z 进行无量纲化, 并定义无量纲温度 $\theta = (T - T_c) / (T_h - T_c)$, 则得到无量纲热传输方程为

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial r^2} + \frac{1}{R} \frac{\partial \theta}{\partial r} + \frac{1}{(\pi R)^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \Phi^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial Z^2} - Pe \frac{\partial \theta}{\partial Z} = 0 \quad (6)$$

式中 $Pe = V_g \rho c_p / k$ 为皮克勒特数 (据文献[3]取 $Pe = 0.5$), $R = r/r', \Phi = \varphi/\pi, Z = z/r'$ 均为无量纲变量

2.3 边界条件

由于整个晶体生长系统关于所有横截面椭圆长轴所在平面对称, 因此安瓿中介质的计算域如图 1 所示, 只取半个圆柱

2.3.1 对称面上边界条件

图 1 中 FGCB 对称面上的边界条件根据计算域关于 $\varphi = 0$ 和 $\varphi = \pi$ 面对称的性质来处理, 即

$$\frac{\partial \theta}{\partial \Phi} = 0 \quad (\Phi = 0, \Phi = 1; 0 \leq Z \leq 1) \quad (7)$$

2.3.2 介质中心轴线上边界条件

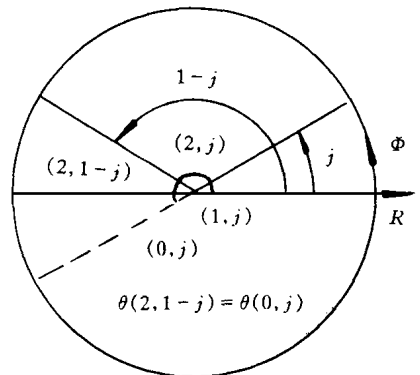
对于柱坐标系下的计算问题, 轴线上的边界条件处理非常重要 因为一般实际系统轴线处于介质内部, 计算过程中由于坐标系的选取而人为地将其视为边界, 故稍有不妥就可能产生不合理的计算结果 这里根据计算域关于 $\varphi = 0$ 和 $\varphi = \pi$ 面对称性质来处理, 在作差分处理时采用如下关系式:

$$\theta(-R, \Phi) = \theta(R, 1 - \Phi) \quad (R = 0, 0 \leq Z \leq 1) \quad (8)$$

如图 3 所示

2.3.3 侧面及上下端面边界条件

介质侧面及上下端面温度边界条件采用一类边界条件来处理 根据炉膛温度分布, 确定安瓿中介质侧面 (GIFB/C 面) 所在位置的温度值, 然后直接将其代入控制方程 (6) 式中 同时根据炉膛 ABCD 面及 EFGH 面温度分布确定出 CJB 面及 FGI 面所在位置的温度, 然后直接代入控制方程 (6) 式中



3 计算结果与分析

根据上述方程及边界条件的处理, 将炉膛内沿 Z 方向分 100 层, 每层内按直角坐标系建立差分网格, X

图 3 轴线上边界条件处理方法示意图

方向格点数为 $u=40$, Y 方向格点数为 $v=40$, 计算域内共有 1600×100 个格点, 安瓿内介质沿柱坐标 R 、 Φ 、 Z 方向建立差分网格, R 方向格点数为 $i=40$, Φ 方向格点数为 $j=20$, Z 方向格点数为 $k=100$, 整个计算域中有 80000 个格点

按中心差分方法将方程和边界条件表达式进行离散化处理, 然后对每个格点进行反复计算. 首先根据方程(1)计算炉膛内每层上的温度分布, 确定出介质区域上下端面及侧面所在几何位置处的温度值, 作为下一步计算介质区域温度场时的第一类边界条件; 然后根据方程(6)式计算介质的温度场, 所涉及边界条件分别按(7)、(8)式及第一步骤中所确定的温度值来确定, 最后将计算结果形成等温面数据文件. 对于 $x=0.2$ 组分的碲镉汞 ($\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$) 材料, 实际上在温度低于 792 (液相线温度) 到高于 702 (固相线温度) 范围内均有结晶现象发生. 这些晶粒根据其尺寸大小或被重熔或继续长大成大块晶体. 但是只有在低于固相线以下温度范围才能形成连续稳定的晶体, 因此在不考虑界面前沿枝晶及孔隙的数值模拟研究中, 常将 702 等温面近似看作固/液界面, 同时还将该固/液界面近似看作等浓度面^[6,9]. 故在高温区和低温区分别为 800 和 600 的 Bridgman 方法生长系统中, 将相对温度 $\theta=0.5$ 的等温面近似看作固/液界面. 下面以固/液界面 ($\theta=0.5$ 的等温面) 形状给出部分计算结果

3.1 安瓿位置对固/液界面形状的影响

比较图 4 与图 5, 在炉膛横截面椭圆长轴、短轴一定的情况下, 当安瓿中心接近炉膛中心时 ($d=1$), 固/液界面由整体的略微凸向上变成中心点处局部的凹向上, 类似于文献[3]中所模拟的结果. 当安瓿靠近炉膛边缘时 ($d=2$), 所得到的固/液界面几乎是平展的倾斜面. 对于晶体生长而言无疑这是所希望的固/液界面.

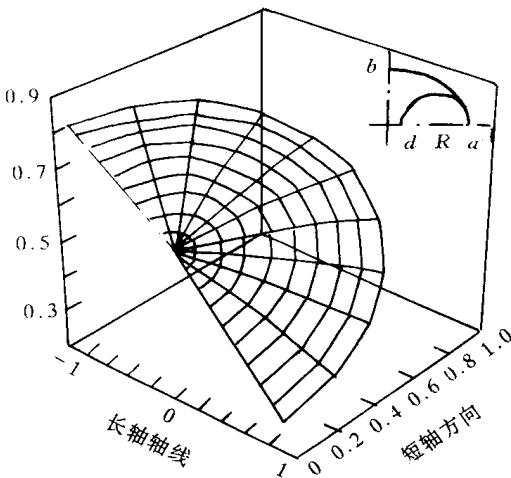


图 4 固/液界面

$a=3, b=2, d=2, R=1$

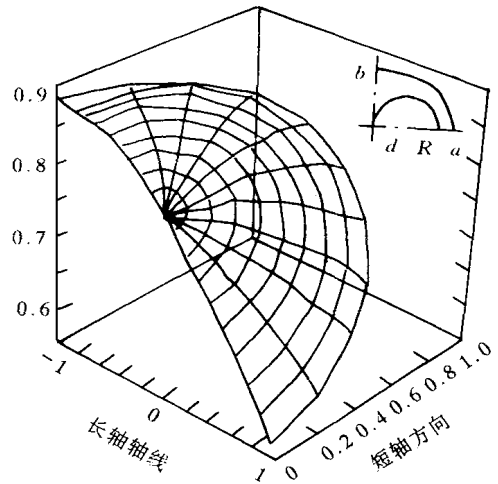


图 5 固/液界面

$a=3, b=2, d=1, R=1$

3.2 安瓿直径对固/液界面形状的影响

安瓿直径变化时的计算结果显示, 直径大小与炉膛长短轴比例要协调, 过大或过小都不理想. 如图 6 所示, 安瓿半径相对过小时 ($R=0.5$) 其固/液界面畸变较为严重. 同时当安瓿直径过大时倾斜加剧, 中心点附近出现明显的局部凹向上现象. 图 4 所示结果中的比例是计

算中认为比较合理的一种

3.3 炉膛特征对固/液界面的影响

炉膛长轴 a 、短轴 b 比例变化研究结果表明, a 、 b 比例调整要与安瓿直径 $2R$ 及位置 d 协调进行, 当 a 与 b 接近时其情况即为文献[3]中的偏心 Bridgman 系统的计算结果, a 相对于 b 过大时, 要求安瓿直径不能太大, 否则固/液界面更趋向于弯曲

另外炉膛温度场设置对固/液界面的影响很大, 当调整炉膛梯度区内的温度分布时, 直接影响固/液界面的形状, 甚至会改变固/液界面凹向, 因此合理的温度场设计是模拟过程中主要考虑的因素之一。由于篇幅所限, 计算图形省略

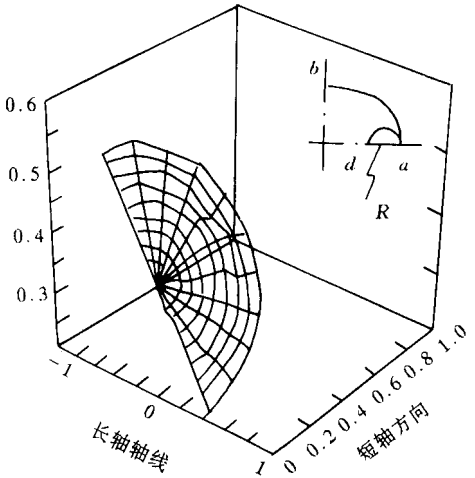


图6 固/液界面

$a=3, b=2, d=2.5, R=0.5$

4 结论

通过对固/液界面附近温度场进行的数值模拟研究, 进一步验证了本文所提出的用椭圆柱 Bridgman 炉生长 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 晶体设想的可行性。计算结果显示该方法可获得比较理想的固/液界面, 该界面为倾斜平面。这对提高 Bridgman 法生长碲镉汞晶体横向组分均匀性有一定的指导意义。

参 考 文 献

- [1] J. L. Schmit, J. Crystal Growth, 1983, **65**: 249.
- [2] R. K. Bagai, W. N. Borle, J. Crystal Growth, 1989, **94**: 561.
- [3] 王培林, 邓开举, 张国艳, 等, 半导体学报, 1996, **17**(1): 16.
- [4] T. W. Fu, W. R. Wilcox, J. Crystal Growth, 1980, **48**: 416.
- [5] 王培林, 魏科, 周士仁, 半导体学报, 1994, **15**(9): 596.
- [6] Y. M. Dakhoul, R. Famer, S. L. Lehoczky *et al*., J. Crystal Growth, 1988, **86**: 49.
- [7] 王培林, 张国艳, 周士仁, 半导体学报, 1996, **17**(7): 485.
- [8] 陈景仁, 流体力学及传热学, 北京: 国防工业出版社, 1984.
- [9] C. J. Chang and R. A. Brown, J. Crystal Growth, 1983, **63**: 343.

Numerical Simulation of S-L Interface Shape in Elliptically-Cylindrical Bridgman Furnace for $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ Crystal Growth

Wang Peilin¹, Bai Hong² and Yang Jingqi¹

(1 *Department of Astronautical electronics and optoelectronic engineering*

2 *Department of Mathematics Harbin Institute of Technology, Harbin 150001*)

Received 19 November 1996, revised manuscript received 15 September 1997

Abstract The temperature distribution near the S-L interface of the elliptically-cylindrical Bridgman furnace for $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ Crystal growth is studied by using three-dimensional numerical analysis method. The effects of ampoule position, the diameter relative size of the ampoule compared with that of the furnace and the temperature distribution in the furnace on the S-L interface have been investigated. The results have shown that the temperature field in the elliptically-cylindrical furnace has a possibility to effectively increase the lateral uniformity of each composition in $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ crystal.

PACC: 6150C, 4410, 0260