

垂直布里奇曼法生长 CdZnTe 晶体时固液界面形状的控制*

李万万 桑文斌 闵嘉华 郁 芳 张 斌 王昆黍 曹泽淳

(上海大学材料科学与工程学院 电子信息材料系, 上海 201800)

摘要: 采用有限元法对探测器材料 CdZnTe 的晶体生长过程进行了热分析, 研究了不同因素对生长过程中固液界面形状的影响。模拟结果表明, 当坩埚下降速度约为 1mm/h 时, 可获得接近水平的固-液界面。晶体生长实验结果与计算机模拟的结论基本一致。因此, 通过适当选择和调节坩埚下降速度可获得高质量晶体。

关键词: CdZnTe; 垂直布里奇曼法; 有限元法

PACC: 0260; 6150C; 8110F

中图分类号: TN 304. 053

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2004)05-0535-07

1 引言

$\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ (CZT) 是重要的新型半导体材料, 具有强大的军事应用背景。 $x = 0.04$ 的 CZT 与 HgCdTe (MCT) 具有较好的晶格匹配, 是高性能 MCT 红外探测器最重要的衬底材料; $x = 0.1 \sim 0.2$ 的新一代核探测器, 应用前景广阔, 特别是高阻的 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶体制作的 γ 射线探测器具有较高的能量分辨率, 同时热稳定性好, 且无极化效应, 因此日益受到人们的重视^[1~3]。

垂直布里奇曼法(VBM)是用来生长 CdZnTe 晶体材料的常用方法, 但是要获得高质量的 CdZnTe 晶体材料却非常困难, 要受到很多因素的影响。首先, CdZnTe 材料的热导率较低, 生长过程中的相变潜热很难散发出去, 因此容易在材料中产生热应力。其次, 其机械强度较差, 容易受到热应力的影响而产生缺陷。例如, 由于该材料的堆垛缺陷形成能较小, 在晶体生长过程中, 温度波动等因素极易引起孪晶的出现^[4]。因此深入地理解生长过程中的不同工艺条件和以上因素的关系是生长出高质量 CdZnTe 晶体材料的关键, 而通过计算机建立模型

来进行模拟是了解这些关系的一个有效方法。

计算机模拟使用的模型经历了第一代模型^[5~7]、第二代模型^[8,9]和第三代模型^[10~12]的发展历程。最近, Cerny 等人^[13]对 CdZnTe 的晶体生长模拟过程作了较为详细的阐述, 使用了二组分系统的混合物线性理论。遗憾的是以上作者都没有对模拟的结果给出实验上的验证。

本文采用有限元法对 CdZnTe 的晶体生长过程进行了模拟, 研究了 VB 法晶体生长中不同因素对晶体生长过程中固液界面形状的影响。在计算中考虑了热传导、对流、辐射等热交换过程和相变过程, 同时利用傅里叶变换给出了变化炉温加载的函数表达式。关于固液界面形状在不同坩埚下降速度的条件下发生变化的本质, 本文进行了详细的分析。由于种种原因, 模拟结果缺乏实验证实是许多文献的缺点, 我们根据模拟结果进行了相应的实际晶体生长实验, 并将实验结果和模拟结果进行了比较分析。

2 建立模拟模型时主要考虑的问题

2.1 晶体生长过程的物理模型

垂直布里奇曼法长晶系统由一个封闭的长晶炉

* 国家自然科学基金资助项目(批准号: 10175040)

李万万 男, 1976 年出生, 博士研究生, 主要从事 CdZnTe 探测器材料及其器件的研究。

2003-05-09 收到, 2003-07-11 定稿

©2004 中国电子学会

和一个同时含有固-液态 CdZnTe 材料的安瓿组成, 其中安瓿由石英制成, 其内表面有一层薄碳层。长晶炉内部存在三个温区: 高温区、隔热区和低温区, 如图 1(a) 所示。晶体生长过程开始之前, 石英安瓿处于高温区, 其内部的 CdZnTe 均处于液相, 然后石英安瓿以一定的速度经过隔热区向低温区移动, 温度低于 CdZnTe 材料熔点的部分凝结成固态。为了便于模拟计算, 我们以石英坩埚及其内部的 CdZnTe 材料为主要研究对象, 对石英坩埚及其内部的 CdZnTe 材料在一定温场条件下的变化过程进行了计算, 其物理模型如图 1(b) 所示。

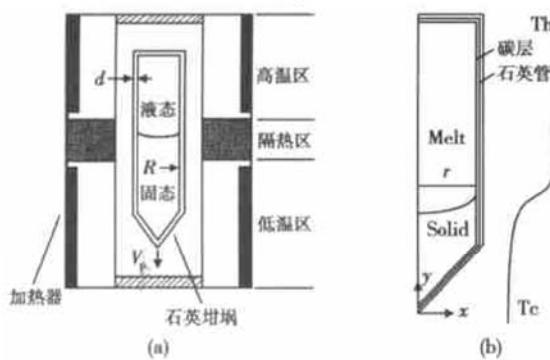


图 1 (a) 垂直布里奇曼晶体生长系统结构示意图; (b) 晶体生长系统物理模型

Fig. 1 Vertical Bridgman system for growth of CdZnTe (a) Schematic diagram of the system; (b) Mathematical model

2.2 主要方程

ANSYS 有限元软件在求解方程方面主要通过使用一定的单元来解出质量、动量和能量的守恒方程。在晶体生长过程中存在固-液相变的问题上, 假定液相遵循牛顿定律, 热传导过程遵守傅里叶定律, 同时假定流体遵循 Boussinesq 近似, 即流体的密度只随温度的变化而变化。由此, 可得出如下平衡方程:

(a) 连续性方程

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{U} = - \frac{\nabla P}{\rho} + \mu \nabla^2 \mathbf{U} + \rho \beta (T - T_{ref}) \mathbf{g} \quad (1)$$

其中 \mathbf{U} 是流动速度矢量。

(b) 动量方程

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{U} \right) = - \frac{\nabla P}{\Delta} + \mu \nabla^2 \mathbf{U} + \rho \beta (T - T_{ref}) \mathbf{g} \quad (2)$$

其中 ρ 是流体密度; P 是静态压力; μ 是流体分子的粘度; β 是流体的热膨胀系数; T 是温度; T_{ref} 是参

考温度; g 是重力加速度。

(c) 能量方程

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla T \right) = \frac{k}{\Delta} \frac{\partial T}{\partial r} + Q \quad (3)$$

其中 C_p 是流体在定压下的比热; k 是流体的热导率; Q 是与材料有关的术语, 它包含了材料的热函(即焓)。在有限元方法中, 以上方程可以转化成以下形式来进行求解^[15]:

$$[\mathbf{C}]^T \{ \mathbf{U} \} = 0 \quad (4)$$

$$[\mathbf{M}] \frac{d\mathbf{U}}{dt} + [\mathbf{A}(\mathbf{U})] \{ \mathbf{U} \} + [\mathbf{K}(T, \mathbf{U})] \{ \mathbf{U} \} -$$

$$[\mathbf{C}] \{ P \} + [\mathbf{G}(T)] \{ T \} = \{ F(T, T_{ref}) \} \quad (5)$$

$$[\mathbf{N}] \frac{dT}{dt} + [\mathbf{D}(\mathbf{U})] \{ T \} + [\mathbf{L}(T)] \{ T \} = G(\mathbf{U}, T) \quad (6)$$

2.3 相变模型

固-液相变是一个非线性的瞬态问题, 也是在晶体生长过程中决定体系温场分布的重要因素之一。ANSYS 是通过采用 enthalpy-porosity 方程来解决该问题的, 其中潜热已经合并到了方程(3)中, 潜热在 0(固态) 和 H_f , 即融化热(液态) 的范围内变化。尽管表中给出的熔点为一定值, 但在模型中我们将发生相变的温度范围设定在 $T_{melt} - \delta T \sim T_{melt} + \delta T$ 之间的糊状区域(mushy zone) 中, 其中糊状区域是一个假多孔区域, 其液态组分数在 0~1 之间; 为了保证数值的稳定, 我们实验地将其定为 1K。在模拟中糊状区域的厚度相对计算单元的尺寸来说非常薄, 其宽度仅为几个计算单元, 因此固态区域和熔体区域的界线非常清楚, 这使得我们能获得可靠且具有代表性的界面特征, 文献[14]在对 CdTe 晶体生长的模拟过程中也采用了该方法。值得一提的是, 相变热分析是 ANSYS 软件最强大的功能之一, 在操作上 ANSYS 是通过定义材料的焓值随温度变化来考虑相变潜热的^[15], 如图 2 所示。

其中焓的单位是 J/cm³, 可用密度与比热的乘积对温度的积分来表示:

$$H = \int c(T) dT \quad (7)$$

在求解过程中, 通过设定足够小的时间步长来提高其精度。

2.4 炉温分布函数

由于 CdZnTe 是一种低热导率材料, 为了保证

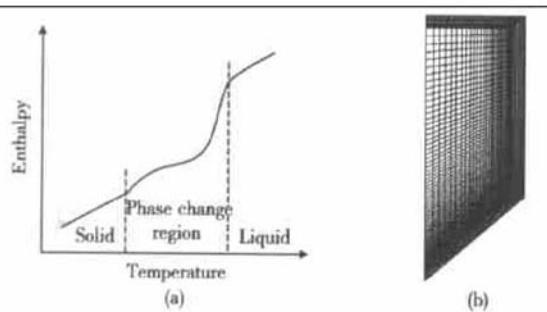


图 2 (a) 材料的焓随温度变化的关系;(b) 模型的网格划分示意图

Fig. 2 (a) Enthalpy of the material as the function of temperature; (b) Schematic diagram of computational grid of the ampoule in the mathematic model

一定的晶体生长速率, 应使温度梯度较大, 但是温度梯度也不能过大。温度梯度是由高温区和低温区的温差造成的, 要增加温度梯度就要提高高温区的温度或者降低低温区的温度。但过高地提高高温区的温度将导致熔体剧烈挥发、分解和沾污, 影响生长出的晶体质量。而如果把低温区的温度降得过低, 生成的晶体在短距离内经受很大的温差, 会造成大的热应力, 使晶体的位错密度增大, 因此一般在 CdZnTe 材料的晶体生长中温度梯度在 8~15K/cm 是合适的^[16]。本文采用如图 3 所示的温度分布。

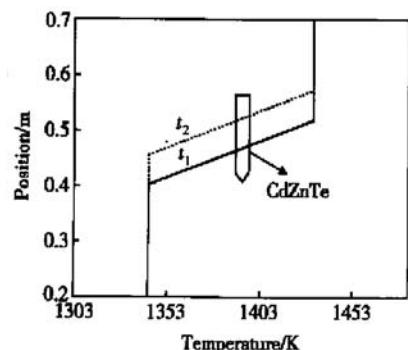


图 3 系统在时间 t_1 及 t_2 时的温度分布

Fig. 3 Applied temperature profile at the time of t_1 and t_2

需要指出的是: 在实际的晶体生长过程中, 是通过下降装置使坩埚在具有一定温度分布的长晶炉内缓慢下降。而在模拟过程中, 安瓿的向下移动是通过使炉内的温度分布以一定的速率向上移动来实现的。如图 3 所示, 相对应加载的函数形式如下:

$$T_{\text{furnace}} = A_0 + \sum_{n=1}^{30} A_n \cos\left[\frac{2n\pi(y - vt)}{1}\right] + \sum_{n=1}^{30} B_n \sin\left[\frac{2n\pi(y - vt)}{1}\right] \quad (8)$$

在本系统中,

$$A_0 = 803.35$$

$$A_n = 2 \left\{ \int_{0.44}^{0.44} 1353 \times \cos(2n\pi y) dy + \int_{0.44}^{0.5} \left[\left(\frac{90}{0.06}(y - 0.44) + 1353 \right) \cos(2n\pi y) \right] dy + \int_{0.5}^{0.94} 1443 \times \cos(2n\pi y) dy + \int_{0.5}^{0.94} \left[\left(\frac{-30}{0.02}(y - 0.94) + 1443 \right) \cos(2n\pi y) \right] dy \right\}$$

$$B_n = 2 \left\{ \int_{0}^{0.44} 1353 \times \sin(2n\pi y) dy + \int_{0.44}^{0.5} \left[\left(\frac{90}{0.06}(y - 0.44) + 1353 \right) \sin(2n\pi y) \right] dy + \int_{0.5}^{0.94} 1443 \times \sin(2n\pi y) dy + \int_{0.5}^{0.94} \left[\left(\frac{-30}{0.02}(y - 0.94) + 1443 \right) \sin(2n\pi y) \right] dy \right\}$$

系数 A_0, A_n 和 B_n 是与长晶系统尺寸有关的常数。

在模拟过程中, 随着温度分布曲线逐渐上升, 熔体在石英管内自下而上地结晶。固液界面是由相变等温线($T = 1393\text{K}$)的位置所决定^[17, 18]。其它计算

中需要用到的参数见表 1, 表 2。

在上述基础上, 我们重点研究了晶体生长过程中坩埚下降速度 V_p 与 CdZnTe 材料的晶体生长过程中固液界面形状之间的关系。

表 1 与 CdZnTe 材料属性有关的参数
Table 1 Physical properties of the system

属性	材料	表达式或数值
$\rho / (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$	Cd _{1-x} Zn _x Te	$\rho^S = [5636 + 218(1-x)][1 - \beta_T^S(T - 298)]$ $(\beta_T^S = 3(4.865 + 1.855T/1000) \times 10^{-6})$ $\rho^L = 5780 - 0.29(T - 1406)$ ^[13]
	Quartz	2200 ^[14]
	Graphite	1900 ^[14]

续表

属性	材料	表达式或数值
$C_p/(J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1})$	Cd _{1-x} Zn _x Te	$C_p^S = 219 + 9.5x + (0.0792 + 0.0178x)T - 3.07 \times 10^6/T^2$ $C_p^L = 314^{[13]}$
	Quartz	770 ^[14]
	Graphite	712 ^[14]
$K/(W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1})$	CdTe	$K^S = 1.5^{[14]}; K^L = 3.0^{[14]}$
	ZnTe	10.8 ^[13]
	Quartz	2.8 ^[14]
	Graphite	120 ^[14]
$H/(J \cdot kg^{-1})$	CdTe	209200 ^[14]
T_m/K	Cd _{0.9} Zn _{0.1} Te	1393 ^[19]

表 2 VB 法晶体生长系统的参数

Table 2 Operating parameters for VBM system

参数	数值
石英坩埚长度, L	0.05m
石英坩埚内径, R	0.015m
石英坩埚壁厚, d_q	2.5mm
石英坩埚锥形底部张角, θ	90°
绝热区长度, L_g	0.08m
高温区温度, T_h	1433K
低温区温度, T_c	1353K
碳层厚度, d_e	0.1mm

3 模拟结果

3.1 下降速度对固液界面的影响

图 4 为在不同坩埚下降速度条件下固液界面形状的变化情况。为了表征固液界面的弯曲程度, 我们定义了一个高度差 η , 它表示周边和坩埚中心处固液界面纵坐标之差。若 η 为正值, 则表示固液界面凸向固态区; η 为负值, 表示固液界面凸向液态区, 而 η 绝对值的大小则代表弯曲程度。由图可知, 坩埚下降速度显著地影响固液界面的形状。在坩埚下降速度较大时, 如 $V_p = 50\text{ mm/h}$ 和 100 mm/h , 固液界面呈现明显的下凹。在坩埚下降速度 V_p 从 100 mm/h 减小至 1 mm/h 的过程中, 随着 V_p 的减小, 固液界面趋于平坦, 当 $V_p = 1\text{ mm/h}$ 时, 固液界面形状接近水平。如果在此基础上, 继续减小坩埚下降速度, 固液界面将呈现向上凸起的形状, 如 $V_p = 0.1\text{ mm/h}$ 时的情况。

3.2 隔热区的温度梯度对固液界面的影响

图 5 为不同的坩埚下降速度条件下, 固液界面的形状随隔热区温度梯度的变化而变化的情况。从图中可以看出, 当坩埚下降速度较大时(如 $V_p =$

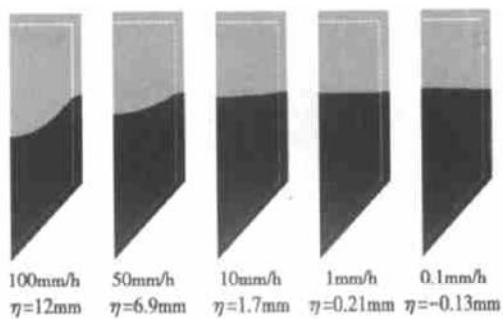
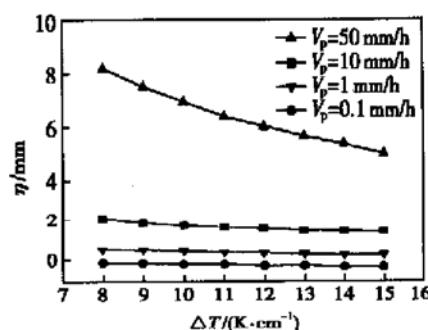


图 4 不同坩埚下降速度下的固液界面形状

Fig. 4 Variation of solid/liquid interface configurations at different crucible moving rates

50 mm/h), 随着温度梯度的增加, η 值随之减小, 且减小的幅度相对较大; 当坩埚下降速度较小时(如 $V_p = 1$ 和 0.1 mm/h), 随着温度梯度的增加, η 值减小得较为缓慢, 且 η 值有从正值变为负值的趋势。

图 5 温度梯度- η 关系图Fig. 5 Relationship between temperature gradient and η

3.3 晶体生长过程中固液界面形状的变化

图 6 给出了在不同坩埚速度下, 晶体生长的不同时刻固液界面的变化情况。从图中我们可以看出,

在晶体生长过程的不同时刻, 固液界面的形状将发生变化, 同时我们发现, 尽管过程中固液界面形状发生改变, 但是在过程中存在一段稳定区, 在该区域中固液界面形状的变化很小, 而接近末端的形状要比稳定区的平坦或者上凸一些。

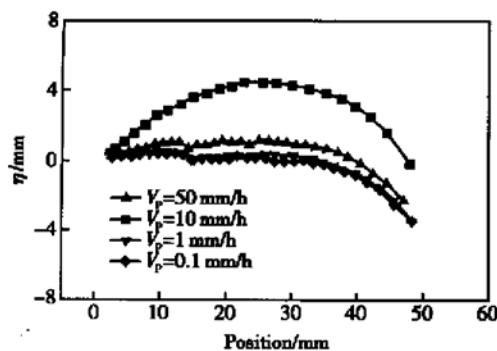


图 6 晶体生长过程中固液界面形状的变化

Fig. 6 Variation of solid/liquid interface shape during the crystal growth procedure

4 实验结果

为了验证计算机模拟结果的可靠性, 我们使用不同的坩埚下降速度(温度梯度为 10K/cm)进行了 CZT 材料的晶体生长实验, 实验结果如图 7 和图 8 所示。

图 7(a), (b), (c) 分别是坩埚下降速度为 7.3, 1.5 和 0.9 mm/h 的条件下生长出来的 CZT 晶体, 由图可以看出: (a) 中晶体末端呈下凹状, (b) 中晶体末端较为平坦, 而(c) 中晶体末端则呈现微凸状。

为了表征三种晶体的质量水平, 我们将晶体切片后分别做了腐蚀坑实验。腐蚀坑密度(EPD)可以反映出晶体中缺陷的水平, EPD 数值越大, 晶体中的缺陷越多, 晶体质量越差, 反之晶体质量就越好。一般 EPD 数值的数量级在 10^4cm^{-2} 或者更低, 表明晶体结构的完整性好; 而如果其数量级大于 10^5cm^{-2} , 则表明晶体中的缺陷较多, 晶体的完整性就相对较差了。图 8(a), (b), (c) 为与图 7 中三种条件下相对应晶体(111)面的腐蚀坑图, 与之相对应的腐蚀坑密度分别为 $3 \times 10^5 \text{cm}^{-2}$, $7 \times 10^4 \text{cm}^{-2}$ 和 $4 \times 10^4 \text{cm}^{-2}$ 。



图 7 不同坩埚下降速度下 CZT 晶体末端形状的变化 (a) 7.3 mm/h (凹状); (b) 1.5 mm/h (接近水平); (c) 0.9 mm/h (凸状)

Fig. 7 Variation of crystal bottom shape at different V_p (a) $V_p = 7.3 \text{mm/h}$; (b) $V_p = 1.5 \text{mm/h}$; (c) $V_p = 0.9 \text{mm/h}$

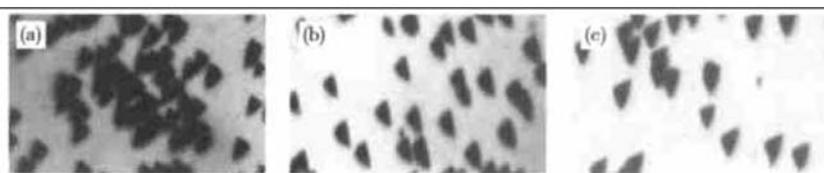


图 8 与图 7 中三种条件下相对应的腐蚀坑图 其腐蚀坑密度(EPD)分别为: (a) $3 \times 10^5 \text{cm}^{-2}$; (b) $7 \times 10^4 \text{cm}^{-2}$; (c) $4 \times 10^4 \text{cm}^{-2}$

Fig. 8 EPD values of crystals according to the conditions in Fig. 7 (a) $3 \times 10^5 \text{cm}^{-2}$; (b) $7 \times 10^4 \text{cm}^{-2}$; (c) $4 \times 10^4 \text{cm}^{-2}$

5 讨论与分析

将图 4, 5, 6 的模拟结果和图 7 的实验结果进行

比较, 发现模拟结果中的固液界面形状和实验结果中的末端形状在不同坩埚下降速度的条件下变化趋势是一致的。这说明模拟过程中我们所采取的物理模型和具体的计算处理是合理的, 因此我们认为在

该模型的基础上所得到的其他模拟结果与 CdZnTe 晶体生长的物理过程总体上是相符的。

固液界面形状是影响晶体质量的重要因素, 在晶体生长过程中使固液界面形状保持水平或微凸将获得质量相对高的晶体。在坩埚下降速度对固液界面形状产生影响的问题上, Satheesh Kuppurao 等人^[9]的模拟结果表明, 随着坩埚下降速度减小, 固液界面将由凸向固态逐渐趋于平坦, 我们的实验和模拟结果与此有所不同: 我们在模拟中发现, 当坩埚下降速度小于 1mm/h, 如 0.1mm/h 时, 固液界面将凸向熔体。关于不同隔热区温度梯度对固液界面的影响, 我们的模拟结果和魏彦峰等人^[20]报道的结果类似, 温度梯度的增加将使固液界面趋于平坦。

关于晶体生长过程中不同时刻的固液界面形状和晶体长成后其末端表面形状的关系问题, 我们也进行了研究, 其实晶体末端的表面形状就是晶体生长结束时的固液界面形状。Riquet^[21] 和 Chang^[22] 等人分别对坩埚为有限长和无限长的情况进行了模拟研究。前者认为坩埚的长度有限, 坩埚的顶部和底部将对晶体生长过程产生影响, 为了获得稳定的固液界面形状, 可以事先设定程序调节高温区和低温区的温度来达到。

由图 6 我们发现, 在晶体生长过程的初期和末期, 固液界面形状的变化是渐进的, 尽管晶体末端的形状和稳定区的固液界面形状不完全相同, 但是却存在一定的规律, 因而我们可以从晶体末端的形状来推测晶体生长过程中稳定区固液界面的形状。因此, 实验结果中采用坩埚下降速度为 0.9mm/h 时所得的晶体其末端上凸, 和理论模拟的结果基本一致。在该条件下, 晶体生长过程应具有一段长而平坦的稳定区, 这一结果与长出的晶体具有较小的腐蚀坑密度($4 \times 10^4 \text{ cm}^{-2}$, 见图 8(c))相印证。

我们认为, 与 Riquet 等人所建议的通过设定的程序调节高温区和低温区的温度来控制稳定区的范围相比较, 通过调节坩埚下降速度来获得较大的稳定区是更为可行的, 鉴于整个晶体生长系统具有较大的热惯性, 调节坩埚下降速度是一种更为灵敏的措施。

6 结论

对于 CdZnTe 材料, 采用垂直布里奇曼法进行晶体生长的实验结果与模拟结果互相印证, 所获得

的晶体具有较小的位错密度, 说明采用 1mm/h 的坩埚下降速度是合理的。

通过模拟研究了影响晶体生长过程中固液界面形状的因素。结果表明, 坩埚下降速度越大, 固液界面越凸向固体; 而隔热区温度梯度越大, 固液界面则越凸向熔体。它们的结合决定着晶体生长过程中的固液界面形状。

根据我们的模拟结果, 对于特定的材料, 可以能动地选定合适的坩埚下降速度来获得生长过程中固液界面较为平坦的晶体, 从而保证较好的晶体质量。由于固液界面形状在实际晶体生长过程中是渐变的, 为了在生长过程中保持较长的稳定区, 还需要适时地对坩埚下降速度进行微调。

参考文献

- [1] Eisen Y, Shor A. CdTe and CdZnTe materials for room-temperature X-ray and gamma ray detectors. *J Cryst Growth*, 1998, 184/185: 1302
- [2] Niemela A, Silila H, Ivanov V I. Improving CdZnTe X-ray detector performance by cooling and rise time discrimination. *Nucl Instrum Methods Phys Res A*, 1996, 377: 484
- [3] Schieber M, Schlesinger T E, James R B, et al. Study of impurity segregation, crystallinity, and detector performance of melt-grown cadmium zinc telluride crystals. *J Cryst Growth*, 2002, 237~239: 2082
- [4] Asahi T, Oda O, Taniguchi Y, et al. Growth and characterization of 100mm diameter CdZnTe single crystals by the vertical gradient freezing method. *J Cryst Growth*, 1996, 161: 20
- [5] Sen S, Konkel W H, Tighe S J, et al. Crystal growth of large-area single-crystal CdTe and CdZnTe by the computer-controlled vertical modified-bridgman process. *J Cryst Growth*, 1987, 86: 111
- [6] Parfeniu C, Weinberg F, Samarasakera I V, et al. Measured critical resolved shear stress and calculated temperature and stress fields during growth of CdZnTe. *J Cryst Growth*, 1992, 119: 261
- [7] El Mokri A, Triboulet R, Lusson A, et al. Growth of large, high purity, low cost, uniform CdZnTe crystals by the cold travelling heater method. *J Cryst Growth*, 1994, 138: 168
- [8] Alexiades V, Solomon A D. Mathematical modeling of melting and freezing processes. New York: Hemisphere, 1993
- [9] Cerny R, Prikryl P. Computational model of laser-induced melting and solidification with density change. *Computer Physics Communications*, 1992, 73: 179
- [10] Kuppurao S, Brandon S, Derby J J. Modeling the vertical Bridgman growth of cadmium zinc telluride. I. Transient analysis of zinc segregation. *J Cryst Growth*, 1995, 155: 93

- [11] Kuppurao S, Brandon S, Derby J J. Modeling the vertical Bridgman growth of cadmium zinc telluride. II. Quasi-steady analysis of heat transfer and convection. *J Cryst Growth*, 1995, 155: 103
- [12] Kuppurao S, Derby J J. Designing thermal environments to promote convex interface shapes during the vertical Bridgman growth of cadmium zinc telluride. *J Cryst Growth*, 1997, 172: 350
- [13] Cerny R, Kalbac A, Prikryl P. Computational modeling of CdZnTe crystal growth from the melt. *Computational Materials Science*, 2000, 17: 34
- [14] Martinez-Tomas C, Munoz V. CdTe crystal growth process by the Bridgman method: Numerical simulation. *J Cryst Growth*, 2001, 222: 435
- [15] ANSYS Co. 1999 ANSYS heat analysis manual, 1999: 23
- [16] Mühlberg M, Rudolph P, Laasch M. Correlation between superheating and supercooling in CdTe melts during unseeded Bridgman growth. *J Cryst Growth*, 1993, 128: 571
- [17] Kim D H, Brown R A. Modeling of the dynamics of HgCdTe growth by the vertical Bridgman method. *J Cryst Growth*, 1991, 114: 411
- [18] Brandon S, Derby J J. Heat transfer in vertical bridgman growth of oxides: effects of conduction, convection, and internal radiation. *J Cryst Growth*, 1991, 121: 473
- [19] Yu T C, Brebrick R F. The Hg-Cd-Zn-Te phase diagram. *J Phase Equilibria*, 1992, 13: 476
- [20] Wei Yanfeng, Fang Weizheng, Zhang Xiaoping, et al. Numerical simulation of CdTe growth with vertical Bridgman method. *Chinese Journal of Semiconductors*, 2001, 22(7): 702 (in Chinese) [魏彦峰, 方维政, 张小平, 等. 垂直 Bridgman 生长 CdTe 过程的数值模拟. 半导体学报, 2001, 22(7): 853]
- [21] Requet J P, Durand F. Étude thermique de la vitesse de l'interface solide-liquide au cours d'une solidification Bridgeman. *J Cryst Growth*, 1976, 33: 303
- [22] Chang C E, Wilcox W R. Control of interface shape in the vertical bridgman-stockbarger technique. *J Cryst Growth*, 1974, 21: 135

Controlling Solid-Liquid Interface Configuration During Crystal Growth of CdZnTe by Vertical Bridgman Method^{*}

Li Wanwan, Sang Wenbin, Min Jiahua, Yu Fang, Zhang Bin, Wang Kunshu and Cao Zechun

(Department of Electronic Information Materials, School of Materials Science and Engineering,
Shanghai University, Shanghai 201800, China)

Abstract: Finite element method (FEM) is used to simulate the growth process of CdZnTe crystal and the effects of different crucible moving rates and other processing parameters on solid/liquid interface shape are studied as well. Simulations show that when crucible translates at the rate of about 1mm/h, which nearly equals to crystal growth rate, nearly flat solid/liquid interface can be obtained, which are well consistent with the results of experiments. Therefore, CdZnTe crystal with low dislocation density can be obtained by employing and adjusting appropriate crucible moving rate during the crystal growth.

Key words: CdZnTe; vertical bridgman method; finite element method

PACC: 0260; 6150C; 8110F

Article ID: 0253-4177(2004)05-0535-07

* Project supported by National Natural Science Foundation of China(No. 10175040)

Li Wanwan male, was born in 1976, PhD candidate. He is interested in the research on CdZnTe materials and detectors.

Received 9 May 2003, revised manuscript received 11 July 2003

© 2004 The Chinese Institute of Electronics