

# 在磁场中的 Bridgman- $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 晶体生长数值模拟研究

王培林 张国艳 周士仁

(哈尔滨工业大学控制工程系 哈尔滨 150001)

**摘要** 对垂直 Bridgman- $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体生长系统,用数值模拟方法研究了与晶锭轴同方向的恒定磁场对熔体中温度场、流场、浓度场及 s-l 界面产生的影响,介绍了边界条件的处理方法.结果表明,随着磁场强度的增加,熔体中的热对流强度逐渐减弱,s-l 界面逐渐向上移动并趋于平坦.

**PACC:** 0260,6150C,8110

## 1 引言

$\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ (碲镉汞)是禁带宽度随  $x$  而变的组分敏感材料<sup>[1]</sup>,用于特定响应波长的探测器,要求材料有非常高的组分均匀性. Bridgman 技术作为该材料块晶的主要制备方法之一,在结晶过程中因熔体、晶体、石英安瓿的导热系数相差较大以及高温区、绝热区、低温区连接处温度陡变,一般很难生长出组分高度均匀的大块晶体.

由电磁感应定律可知,闭合导体在磁场中作切割磁力线运动,使穿过所围面积磁通量发生变化时,导体内将产生电荷位移运动. 导电熔体(如铝、硅等)在温度梯度和重力场作用下产生热对流运动时,可看作是由无数闭合导体构成. 在磁场中这种运动一旦发生,就将出现电荷的位移运动,使流体体元带有电荷. 这些具有电荷的体元在磁场中运动时又将受到洛伦兹力作用,力的方向与体元运动方向垂直,有改变原体元运动的作用. 因此导电熔体在磁场中运动时,洛伦兹力将限制这种运动. 如果磁场足够强,能抑制对流的产生. 这种阻滞热对流的效果可归结为磁场增加了流体的磁粘滞性,常用哈特曼数  $H_m$  来表征这个效应<sup>[2]</sup>. 磁场抑制了热对流,即抑制了热量的对流传输,消除相应的温度起伏,建立起更大的轴向温度梯度,对垂直 Bridgman 方法晶体生长尤为有利. 同时也会改变溶质分布. 因此,在生长晶体或合金时,用施加恒定或交变磁场的方法来提高组分均匀性和结构完整性,已取得很多满意结果<sup>[3~8]</sup>.

本文对垂直 Bridgman- $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体生长系统,用数值模拟方法研究与晶锭轴同方

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  
1995年3月11日收到初稿,1995年9月19日收到修改稿

向的恒定磁场对熔体中温度场、流场、浓度场及 s-l(固-液)界面产生的影响.

## 2 物理模型

用 Bridgman 方法生长  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体时,典型的拉晶速度为 0.2mm/h. 一个实际的生长炉(如图 1 所示)温度设置为高温区  $T_h=800^\circ\text{C}$ 、低温区  $T_c=600^\circ\text{C}$ ,绝热区厚度为 20mm,炉膛内径为 25mm,石英安瓿长 200mm、外径 20mm、壁厚 3mm.

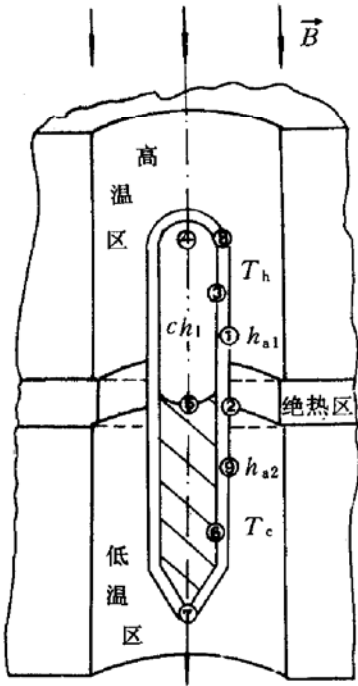


图 1 在磁场中的垂直 Bridgman- $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  晶体生长系统

熔体、晶体、安瓿壁三种均匀介质稳态无量纲热传输方程为<sup>[2]</sup>

$$\text{熔体: } (\vec{V} \cdot \nabla)\theta = \nabla^2\theta \quad (1)$$

$$\text{晶体: } P_c \frac{\partial \theta}{\partial Z} = \gamma_s \nabla^2\theta \quad (2)$$

$$\text{安瓿: } P_a \frac{\partial \theta}{\partial Z} = \gamma_a \nabla^2\theta \quad (3)$$

其中  $\theta$  为无量纲温度分布函数:

$$\theta = \frac{T - T_c}{T_h - T_c} \quad (4)$$

式中  $T(^{\circ}\text{C})$  为介质某位置点上的温度;  $T_h$ 、 $T_c$  分别为高、低温区温度.

$\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  也记为  $(\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x)\text{Te}_{1-y}$ , 在相图分析中通常将其看作由 CdTe 和 HgTe 构成的赝二元系统. 由于  $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$  熔体动粘滞系数与 Ge 掺 Ga 稀溶液流动粘滞系数 ( $1.3 \times 10^{-3} \text{cm}^2/\text{s}$ ) 相当, 故可将其看成稀溶液. 而 CdTe 又属于少数组元, 因此分析 Cd 在  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  熔体(溶液)中的分布时, 将 CdTe 看作溶质, 而溶剂为 HgTe. 稳态无量纲溶质传输方程为:<sup>[2]</sup>

$$\frac{S_c}{P_r} (\vec{V} \cdot \nabla) S = \nabla^2 S \quad (5)$$

其中  $S$  为无量纲浓度分布函数:

$$S = \frac{c - c_0}{c_0} = C - 1 \quad (6)$$

式中  $c_0$  为原始配料时 CdTe 的浓度;  $c$  为某一位置处流体 ( $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  熔体) 中 CdTe 的浓度.

流体的宏观运动对温度场和浓度场均有直接影响. 确定流体速度场的无量纲流体动力学方程和连续性方程为<sup>[2,9,10]</sup>

$$(\vec{V} \cdot \nabla)\vec{V} = -\nabla P + P_r \nabla^2 \vec{V} + P_r (R_{as} S - R_{at} \theta) \vec{e}_z + H_s^2 P_r ((\vec{V} \times \vec{e}_z) \times \vec{e}_z) \quad (7)$$

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0 \quad (8)$$

在上述控制方程中, 用安瓿长度  $L$  对坐标量进行无量纲化, 用  $\rho_1 (\alpha_1/L)^2$  对压力  $p$  作无量纲化, 用  $\alpha_1/L$  对速度  $\vec{v}$  作无量纲化<sup>[11,12]</sup>. 各无量纲参数定义及取值列于表 1<sup>[13]</sup>.

利用轴对称性,将问题处理成二维计算,引入流函数  $\varphi$  和涡量  $\omega$ ,用流场来表征速度场. 计算域如图 2 所示:轴线以右区间的熔体、晶体及安瓿壁. 各区控制方程已在图中标明. 计算模型中安瓿上、下端头均取齐,不考虑晶体生长过程中的端头非稳态效应.

表 1 无量纲参数的定义及取值 ( $x=0.2$ )

无量纲参数	定义	取值
热瑞利数	$R_{aT} = g\beta_T \Delta T L^3 / \nu \alpha_1$	$2 \times 10^4$
溶质瑞利数	$R_{as} = g\beta_c c_0 L^3 / \nu \alpha_1$	$-4 \times 10^4$
热皮克勒特数	$P_e = V_g L / \alpha_1$	$5 \times 10^{-3}$
普兰特数	$P_r = \nu / \alpha_1$	0.11
斯密特数	$S_c = \nu / D$	19.6
斯忒藩数	$S_t = \Delta H_s / C_p \Delta T$	1.35
固体和熔体热扩散率比	$r_s = \alpha_s / \alpha_1$	0.215
安瓿和熔体热扩散率比	$R_a = \alpha_a / \alpha_1$	1.47
固体和熔体密度比	$\sigma = \rho_s / \rho_l$	1.01
哈特曼数	$H_a = B_0 L (\sigma_m / \mu)^{1/2}$	
固体和熔体热导率比	$k = K_s / K_l$	6.73

### 3 边界条件

下面参照图 2 给出边界条件.

#### 3.1 流场边界条件

边界③:  $V_R = 0, V_z = P_e$ .

边界④:  $V_R = 0, V_z = \sigma P_e$ .

边界①①:  $V_R = 0, \frac{\partial V_z}{\partial R} = 0$

边界⑤: 认为  $\theta = 0.5$  的等温面为 s-l 界面<sup>[11,12]</sup>, 位置用  $R$  的单值函数表示为  $Z = h(R)$ . 从坐标原点向 s-l 界面上某一点  $P$  作矢径, 得矢量:

$$\begin{aligned} \vec{A} &= \vec{OP} = R \vec{e}_R + Z \vec{e}_z \\ &= R \vec{e}_R + h(R) \vec{e}_z \end{aligned} \quad (9)$$

由于轴对称性, s-l 界面在二维计算中约化成曲线. 根据曲线坐标系理论<sup>[14]</sup>, s-l 界面曲线的切线方向与矢量

$$\vec{A}_R = \frac{\partial \vec{A}}{\partial R} = \vec{e}_R + \frac{\partial h}{\partial R} \vec{e}_z \quad (10)$$

方向相同. 记  $h_R = \partial h / \partial R$ , 于是曲线上  $P$  点的单位切向矢量为:

$$\vec{t} = \vec{A}_R / |\vec{A}_R| = (\vec{e}_R + h_R \vec{e}_z) / \sqrt{1 + (h_R)^2} \quad (11)$$

另外,  $P$  点的法向与该点的温度梯度方向一致. s-l 界面上的温度方程为:

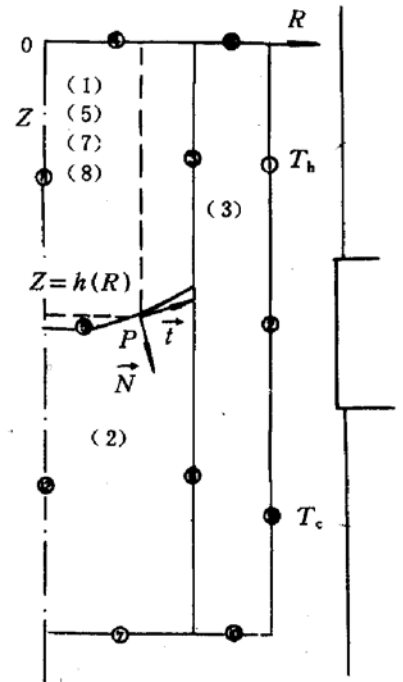


图 2 计算域

$$\theta = \theta_i = f(R, Z) = f(R, h(R)) \quad (12)$$

式中  $\theta_i$  为无量纲结晶温度. 取梯度得

$$\nabla\theta = \frac{\partial f}{\partial R} \vec{e}_R + \frac{\partial f}{\partial Z} \vec{e}_Z \quad (13)$$

对(12)式求偏导数, 得

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial R} + \frac{\partial f}{\partial h} \times \frac{\partial h}{\partial R} = 0 \\ \frac{\partial f}{\partial Z} = \frac{\partial f}{\partial h} \end{cases} \quad (14)$$

代入(13)式中, 得

$$\nabla\theta = -\frac{\partial f}{\partial h} \times \frac{\partial h}{\partial R} \vec{e}_R + \frac{\partial f}{\partial h} \vec{e}_Z \quad (15)$$

于是得到  $P$  点单位法向量为

$$\vec{N} = \nabla\theta / |\nabla\theta| = (\vec{e}_Z - h_R \vec{e}_R) / \sqrt{1 + (h_R)^2} \quad (16)$$

故  $s-l$  界面流场边界条件按法向质量守恒和切向无滑移条件给出:

$$\begin{cases} \vec{V} \cdot \vec{N} = \sigma P_c (\vec{e}_z \cdot \vec{N}) \\ \vec{V} \cdot \vec{t} = \sigma P_c (\vec{e}_z \cdot \vec{t}) \end{cases} \quad (17)$$

式中

$$\begin{cases} \vec{N} = (\vec{e}_Z - h_R \vec{e}_R) / \sqrt{1 + (h_R)^2} \\ \vec{t} = (\vec{e}_R + h_R \vec{e}_Z) / \sqrt{1 + (h_R)^2} \end{cases}$$

### 3.2 浓度场边界条件

$$\text{边界③: } \frac{\partial S}{\partial R} = 0$$

$$\text{边界④: } S = 0$$

$$\text{边界①: } \frac{\partial S}{\partial R} = 0$$

边界⑤: 按照溶质边界层的概念<sup>[2]</sup>, 在边界层厚度之内, 宏观流动只是平行于界面的层流, 扩散是沿界面法向溶质传输的唯一机制. 故  $s-l$  界面处浓度边界条件可考虑成沿法向溶质扩散流与单位时间内结晶时吸收溶质的量相平衡:

$$\vec{N} \cdot \nabla S = \frac{P_c S_c}{P_r} (\vec{e}_z \cdot \vec{N}) (1-K)(S+1) \quad (18)$$

式中  $K$  是分凝系数(见表 2).

### 3.3 温度场边界条件

$s-l$  界面⑤处温度边界条件为

$$\begin{cases} \vec{N} \cdot \nabla\theta_s - k \vec{N} \cdot \nabla\theta_l = S_l P_c \vec{e}_z \cdot \vec{N} \\ \sigma_s = \theta_s = \theta_l = 0.5 \end{cases} \quad (19)$$

其余各处温度场边界条件与文献[15]中相似.

上述诸边界条件公式中无量纲参数见表 1.

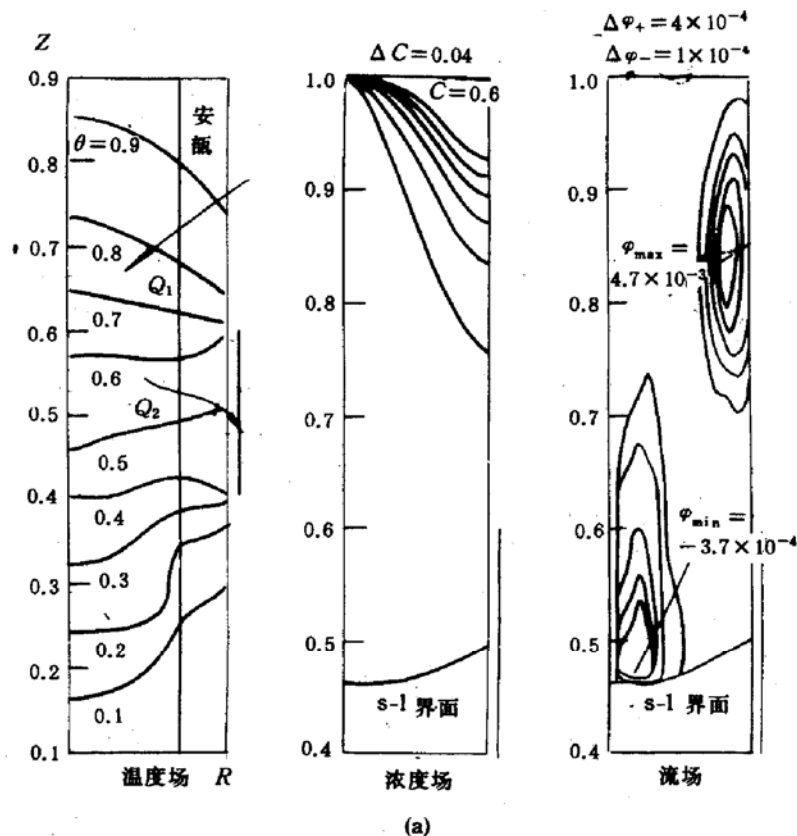
## 4 结果与分析

用差分方法,表 1 中无量纲参数取值是根据表 2 所示 Hg<sub>0.8</sub>Cd<sub>0.2</sub>Te 物性参数得到的. 计算中用到了三个换热系数: $h_{a1}=0.1\text{W}/(\text{C}\cdot\text{cm}^2)$ 、 $h_{a2}=0.1\text{W}/(\text{C}\cdot\text{cm})$ 、 $ch_1=0.05\text{W}/(\text{C}\cdot\text{cm})$ ,分别为安瓿外壁与炉膛之间高温区和低温区换热系数,以及安瓿内壁与熔体之间换热系数. 这些换热系数在取值上除包括单纯对流换热成分外,还在一定程度上反映了辐射传热和热传导作用. 下面给出部分计算结果.

表 2 Hg<sub>0.8</sub>Cd<sub>0.2</sub>Te 主要物性参数<sup>[13]</sup>

熔体热导率, $K_l/(\text{W}\cdot\text{C}^{-1}\cdot\text{cm}^{-1})$	$1.96\times 10^{-2}$
固体热导率, $K_s/(\text{W}\cdot\text{C}^{-1}\cdot\text{cm}^{-1})$	$2.91\times 10^{-3}$
熔体密度, $\rho_l/(\text{g}\cdot\text{cm}^{-3})$	7.55
固体密度, $\rho_s/(\text{g}\cdot\text{cm}^{-3})$	7.63
熔体比热, $C_{p,l}/(\text{J}\cdot\text{C}^{-1}\cdot\text{g})$	$2.57\times 10^{-1}$
固体比热, $C_{p,s}/(\text{J}\cdot\text{C}^{-1}\cdot\text{g})$	$1.77\times 10^{-1}$
动粘滞系数, $\nu/(\text{cm}^2\cdot\text{s}^{-1})$	$1.08\times 10^{-3}$
凝固潜热, $\Delta H_s/(\text{J}\cdot\text{g}^{-1})$	130.4
热膨胀系数, $\beta_T/\text{C}^{-1}$	$7.95\times 10^{-5}$
溶质膨胀系数, $\beta_c/(\text{CdTe 摩尔分数})^{-1}$	-0.305
CdTe 在 HgCdTe 中的扩散系数, $D/(\text{cm}^2\cdot\text{s}^{-1})$	$5.5\times 10^{-5}$
CdTe 平衡分凝系数, $K$	2.62

如图 3 所示当磁场强度较弱时,熔体存在着上下两个对流胞运动. 由于石英的导热系数 ( $K_a=2.51\times 10^{-2}\text{W}/(\text{C}\cdot\text{cm})$ ) 比 Hg<sub>0.8</sub>Cd<sub>0.2</sub>Te 晶体导热系数大很多,因此 s-l 界面前沿熔



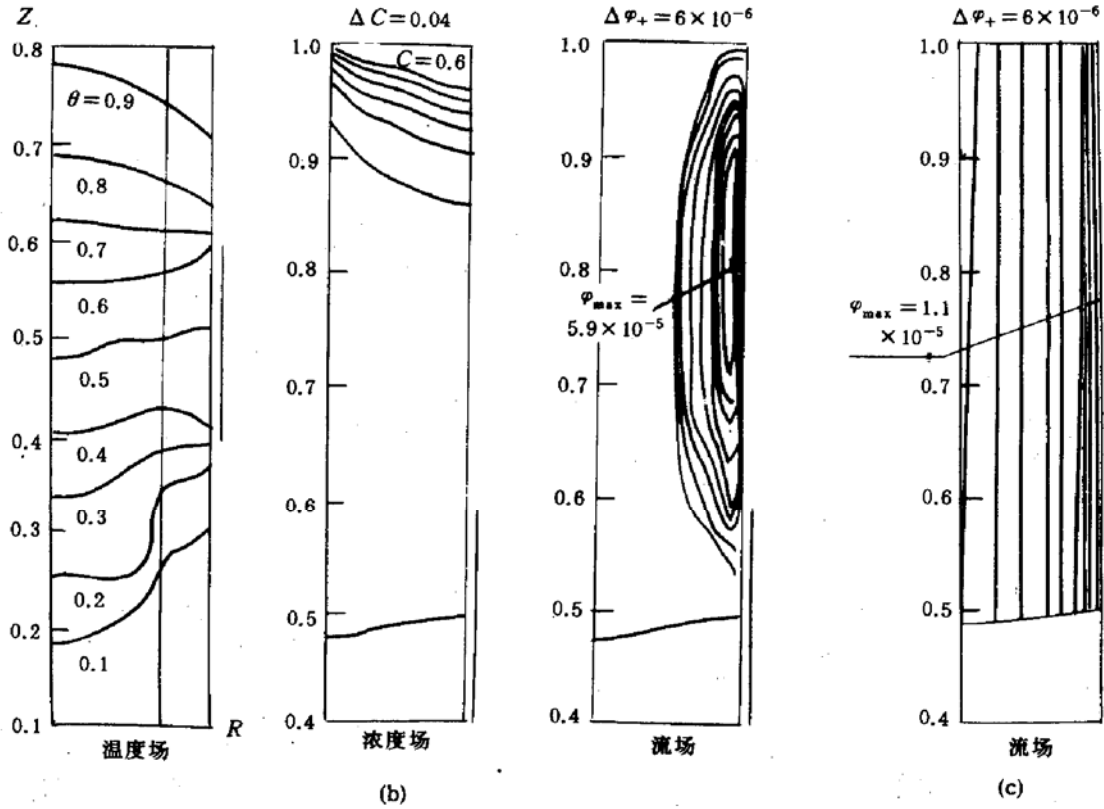


图 3 不同哈特曼数下的温度场、浓度场、流场

(a)  $H_a=400$ ; (b)  $H_a=1000$ ; (c)  $H_a=3000$ , 浓度场中  $C$  为无量纲浓度,  $C=S+1$ .

体中的热量主要通过边缘安瓿壁向低温炉膛传输,如图 3(a)温度场中热流  $Q_2$  所示. 建立起径向温度梯度:中心温度高、靠近安瓿温度低. 不同温度处密度存在差异,在重力场作用下形成顺时针对流运动(图 3(a)流场中的下胞). 结晶时 s-l 界面前沿熔体富集 HgTe, 下对流胞的存在使 Hg 逐渐向锅底形 s-l 界面的谷心迁移, 对流胞心靠近谷心. 由于炉膛中高温区只有在接近绝热区的下端才有明显的温度降低, 因此在和绝热区相交处附近熔体及安瓿壁中均建立起径向温度梯度, 使热流从高温炉膛传递到熔体内部, 如图 3(a)温度场中热流  $Q_1$  所示. 因温差引起密度差, 导致熔体沿逆时针对流运动(图 3(a)流场中的上胞). 胞心靠近安瓿边缘. 当所加磁场强度逐渐增强时, 熔体中对流逐渐被抑制, 浓度场愈加均匀, 从温度场分布可见 s-l 界面逐渐向上移动并趋于平坦. 图 4 集中表现了磁场强度对 s-l 界面的影响情况.

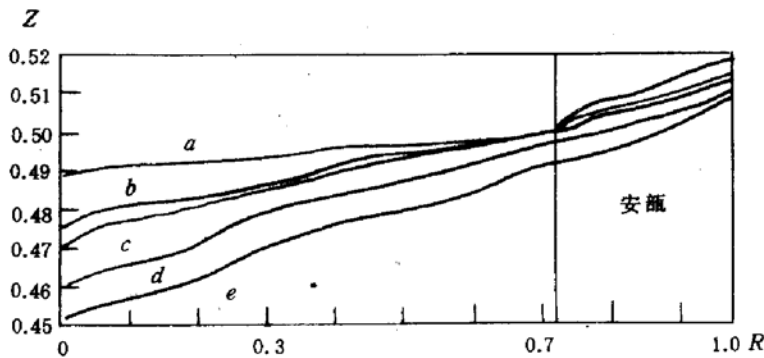


图 4 磁场强度对 s-l 界面的影响

a  $H_a=3000$ ; b  $H_a=1000$ ; c  $H_a=600$ ; d  $H_a=400$ ; e  $H_a=200$ .

图 5 所示结果为拉晶速度对 s-l 界面的影响情况, 皮克勒特数大者对应较大的拉晶速

度. 较小的拉晶速度有利于获得平坦的 s-l 界面.

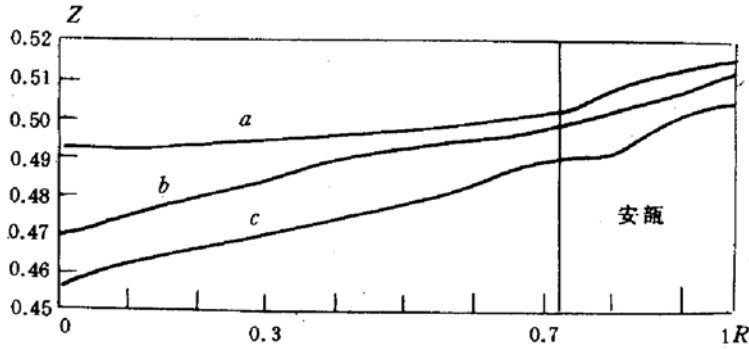


图 5 不同拉晶速度下的 s-l 界面

$a P_e=0.0025$ ;  $b P_e=0.005$ ;  $c P_e=0.001$ .

图 6 所示结果反映绝热区厚度对 s-l 界面造成的影响. 在满足结晶过程组分过冷的条件下, 选择较厚的绝热区有利于使 s-l 界面趋于平坦.

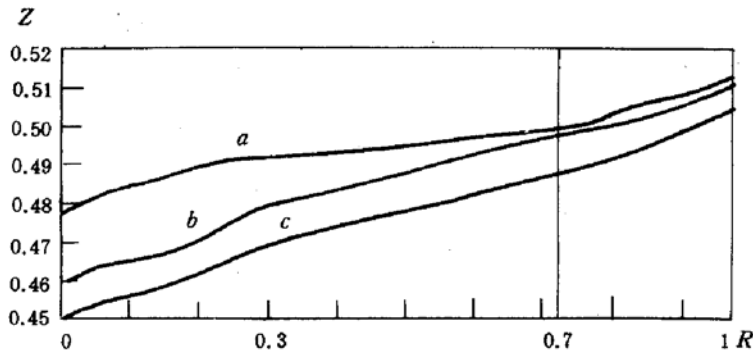


图 6 绝热区不同厚度

$a 6\text{cm}$ ;  $b 4\text{cm}$ ;  $c 2\text{cm}$

## 5 结论

计算结果表明, 用垂直 Bridgman 方法生长 Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te 晶体时, 若配合施加与轴同方向的恒定磁场, 利用磁场能有效地抑制熔体热对流, 改善热传输条件, 从而使 s-l 界面趋于平坦; 同时在满足组分过冷的条件下选择适当厚的绝热区和较慢的拉晶速度, 会使晶体径向组分均匀性有明显的提高. 针对 Hg<sub>0.8</sub>Cd<sub>0.2</sub>Te 晶体生长, 文中研究结果表明所加磁场强度应使哈特曼数大于 1000 为宜.

## 参 考 文 献

- [1] J. L. Schmit, J. Crystal Growth, 1983, **65**:249.
- [2] 冈乃本, 晶体生长的物理基础, 上海: 科学技术出版社(1982).
- [3] K. Hoshikawa, H. Kirata and H. Nakanishi, Jpn. J. Appl. Phys., 1980, **19**:L33.
- [4] K. N. Kim, J. Electrochem. Soc., 1982, **129**:427.
- [5] K. Hashikawa, Jpn. J. Appl. Phys., 1982, **21**:L545.

- [6] H. A. Chedzey and D. T. J. Hurle, *Nature*, 1966, **210**:933.
- [7] D. H. Matthiesen, M. J. Wargo, S. Motakof *et al.*, *J. Crystal Growth*, 1987, **85**:557.
- [8] C-H. Su, S. L. Lehoczky and F. R. Szofran, *J. Crystal Growth*, 1991, **109**:392.
- [9] 陈景仁, *流体力学及传热学*, 北京:国防工业出版社(1984), 31.
- [10] 贝特曼, *磁流体力学不稳定性*, 北京:原子能出版社(1982), 30.
- [11] D. H. Kim, P. M. Adornato and R. A. Brown, *J. Crystal Growth*, 1988, **89**:339.
- [12] P. M. Adornato, R. A. Brown, *J. Crystal Growth*, 1987, **80**:155.
- [13] 王培林, 魏科, 张国艳, 周士仁, *材料研究学报*, 1994, **8**(5):411.
- [14] 张秋光, *场论(上册)*, 北京:地质出版社(1983).
- [15] 王培林, 魏科, 周士仁, *半导体学报*, 1994, **15**(9):596.

## Research on Numerical Simulation for Bridgman-Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te Crystal Growth in Magnetic Field

Wang Peilin, Zhang Guoyan and Zhou Shiren

(Department of control Engineering, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001)

Received 11 March 1995, revised manuscript received 19 September 1995

**Abstract** This paper studies the effect of magnetic field parallel with the growth axis to the temperature field, flow field, concentration field as well as s-l interface in vertical Bridgman-Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te crystal growth system using the method of numerical simulation. The processing method of boundary conditions are also described. The results have shown that the heat convective intensity in melt decreases gradually with increasing of magnetic field and the s-l interface moves upward and tends to flatten.

**PACC:** 0260, 6150C, 8110