

垂直 Bridgman 生长 CdTe 过程的数值模拟*

魏彦锋 方维政 张小平 杨建荣 何 力

(中国科学院上海技术物理研究所 半导体材料器件研究中心, 上海 200083)

摘要: 采用 Galerkin 有限元算法, 计算了垂直 Bridgman 生长 CdTe 过程中的温场分布、液体流动和固液界面的形状, 分析了生长速率、温区分布等参数对固液界面的影响。计算结果表明, 较小的生长速率可以获得更为平坦的固液界面, 适当增加结晶区域的温度梯度也是改善固液界面形状的一个有效方法。同时, 通过对生长系统中的热流分析, 表明在生长过程的中间阶段, 热量交换主要集中在梯度区附近, 而坩埚两端与外部环境的热量交换较少。

关键词: CdTe; 垂直 Bridgman 方法; 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(2001)07-0853-07

1 引言

CdTe 在研制 X 和 Y 射线探测器、光电调制器件以及太阳能电池等方面都有广阔的应用前景^[1]。另外, 由于 Cd_{1-x}Zn_xTe 的晶格常数、化学成分与 Hg_{1-x}Cd_xTe 相匹配, 因此是 Hg_{1-x}Cd_xTe 外延的首选衬底^[2], 而 Hg_{1-x}Cd_xTe 在制造红外探测器方面有着不可替代的作用。因此, CdTe 和 Cd_{1-x}Zn_xTe 的制备一直受到人们的广泛关注^[3-5]。

垂直 Bridgman (VB) 是生长 CdTe 以及 CdZnTe 的常用方法^[1], 采用这种方法, 人们已经生长出了直径达 100mm 的 CdTe 锭条^[6]。在晶体生长过程中, 固液界面的形状是影响晶体质量的一个关键因素^[2, 7-9], 长晶过程应尽量保持一个平的或微凸向液体的固液界面。影响固液界面形状的因素既有内部的(如材料的热导率、相变潜热等), 又有外部的(生长系统中的温度场分布、生长速率、坩埚的形状等), 了解这些因素与晶体生长过程的关系是提高成晶质量的关键所在。

由于体材料生长的周期长, 费用高, 因此, 用数值模拟的方法来研究晶体生长过程一直受到人们的重视^[8-11]。Chin 等^[12]最先将有限元方法(FEM) 应

用到 VB 晶体生长系统中, 他们的模型较为简单, 忽略了熔体的对流效应。同样是采用有限元法, Route 等^[13]首次研究了 VB 生长 CdTe 时, 系统中的固液界面形状。最近, Kuppurao 等^[8]对 CdZnTe 的 VB 生长过程进行了更为详细的讨论, 分别考虑了准稳态和瞬态情况下的固液界面和等温线分布, 并且还包括了 Zn 的分凝效应。

本文采用数值模拟的方法研究了 CdTe 的垂直 Bridgman 生长过程, 考察了各种生长参数对固液界面的影响。在生长系统的物理模型中包括了传导、对流、辐射等热交换过程以及相变效应, 计算方法采用有限元法。在计算中, 采用了一种简单有效的方法来迭代求解固液界面的位置。以往的文献都未对系统中的热量流动加以讨论, 实际上从热流分布可以更直观地分析系统与外界之间的热交换过程。本文给出了典型生长条件下, 系统中的热流分布。

2 物理模型

本文所研究的垂直 Bridgman 晶体生长系统如图 1 所示。整个生长系统包括高温区、梯度区和低温区三个温区。晶体生长过程中, 锥形底部的石英坩埚由高温区缓慢向低温区移动, 通过梯度区时, 液态

* 国家自然科学基金资助项目(批准号: 69425002)。

魏彦锋 男, 1971 年出生, 博士, 现从事半导体材料的生长与特性分析研究。

2000-07-23 收到, 2000-09-22 定稿

©2001 中国电子学会

CdTe 结晶凝固形成固态 CdTe.

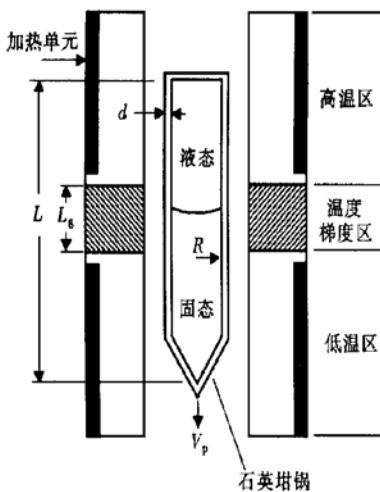


图 1 垂直 Bridgman 晶体生长系统示意图

FIG. 1 Schematic Diagram of Vertical Bridgman System of Crystal Growth

由于晶体生长速率 V_p (~1mm/h) 很小, 可采用准稳态模型^[8]. 本文计算的区域只包括坩埚部分, 将坩埚看作是处于给定环境温度下的完整系统. 计算中所采用的物理模型如图 2 所示.

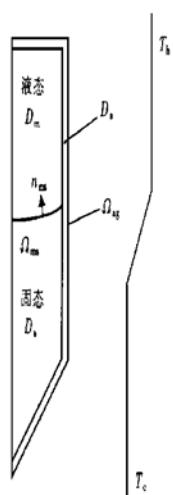


图 2 垂直 Bridgman 晶体生长系统的物理模型

FIG. 2 Physical Description of Vertical Bridgman System of Crystal Growth

图中可分为三个区域: 液态 CdTe 区(D_m)、固态 CdTe 区(D_s)、石英坩埚区(D_a). 在液态区(D_m) 中, 热传输机制为传导和液体对流; 固态区(D_s) 以及石英坩埚中(D_a) 的热传输机制为热传导. 坩埚外壁(Ω_{ag}) 与外部环境的热交换为对流和辐射. CdTe 的物理性质由表 1 给出, 生长系统的典型参数由表

2 给出.

表 1 CdTe 的物理性质^[8]

Table 1 Physical Properties of CdTe^[8]

物理性质	材料	数值	单位
密度(ρ)	CdTe(s)	5.68×10^3	kg/m^3
	CdTe(l)	5.68×10^3	
	Quartz	2.2×10^3	
热导率(k)	CdTe(s)	0.907	$\text{W}/(\text{m} \cdot \text{K})$
	CdTe(l)	1.085	
	Quartz	2.8	
热容(C_p)	CdTe(s)	159.5	$\text{J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$
	CdTe(l)	187	
	Quartz	770	
粘度(μ)	CdTe(melt)	2.36×10^{-3}	kg/ms
热膨胀系数(β)	CdTe	5×10^{-4}	K^{-1}
相变潜热(ΔH)	CdTe	209.2×10^3	J/kg
熔点(T_{mp})	CdTe	1365	K
发射率(ϵ_{ag})	Quartz	0.3	

表 2 垂直 Bridgman 生长系统的参数

Table 2 Operating Parameters for Vertical Bridgman System

参数	数值	单位
坩埚内径(R)	1.9×10^{-2}	m
坩埚内部长度(L)	13×10^{-2}	m
坩埚锥形底部的张角(θ)	60	(°)
坩埚厚度(d)	0.2×10^{-2}	m
生长速率(V_p)	1.0	mm/h
梯度区长度(L_g)	4.8×10^{-2}	m
高温区温度(T_h)	1393.15	K
低温区温度(T_c)	1323.15	K
坩埚壁的热交换系数	150	$\text{W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$
坩埚顶部的热交换系数	116.7	$\text{W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$
坩埚底部的热交换系数	116.7	$\text{W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$

为简便起见, 采用无量纲的形式来描述生长系统中的各种输运过程. 其中, 长度的归一化因子为 $L_0 = R$, 速度的归一化因子为 $U_0 = \alpha_m/R$, 压力的归一化因子为 $P_0 = \rho_m/U_0^2$, 温度的归一化因子为 $T_0 = T_{mp}$. 在无量纲形式下, 能量输运方程为^[14]:

$$\text{液态区域: } K_m(-\nabla^2 T + \nu \cdot \nabla T) = 0 \quad (1a)$$

$$\text{固态区域: } -\nabla^2 T = 0 \quad (1b)$$

$$\text{坩埚区域: } -K_a \nabla^2 T = 0 \quad (1c)$$

其中 T 为温度; ν 为液体流动速度; K_m 为液态 CdTe 与固态 CdTe 热导率的比值(k_m/k_s); K_a 为石英坩埚与固态 CdTe 热导率的比值(k_a/k_s).

液态 CdTe 区域中, 流体的动量输运与能量输运相互耦合, 在 Boussinesq 近似下, 描述液体流动的 Navier-Stokes 方程为:

$$(1/\text{Pr}) \nu \nabla \nu - \nabla \Gamma - \text{Ra}(T - 1) \mathbf{e}_z = 0 \quad (2a)$$

$$\Gamma = -p \mathbf{I} - \tau = -p \mathbf{I} + (\nabla \nu + \nabla \nu^T) \quad (2b)$$

式中 Γ 描述了黏性力和动力学压力; p 为动力学压力; \mathbf{I} 为单位矩阵, \mathbf{e}_z 代表 z 方向单位矢量. $\text{Ra} = g\beta T_{\text{mp}} R^3 / \alpha_m \nu$ 为热 Rayleigh 数; $\text{Pr} = \nu / \alpha_m$ 为 Prandtl 数; g 为重力加速度; β 为热膨胀系数; $\alpha_m = k_m / \rho_m C_p m$ 为热扩散系数; $\nu = \mu / \rho_m$ 为液体的动力学粘度.

液体流动的连续性方程为:

$$\nabla \cdot \nu = 0 \quad (3)$$

能量方程的边界条件为:

在石英坩埚外壁:

$$-(\nabla \cdot T)_a \cdot \mathbf{n}_{\text{ag}} = \text{Bi}(T - T_f) + \text{Rad}(T^4 - T_f^4) \quad (4a)$$

在固液界面处:

$$(\mathbf{q}_m - \mathbf{q}_s) \cdot \mathbf{n}_{\text{ms}} = S_c (\mathbf{e}_z \cdot \mathbf{n}_{\text{ms}}) \quad (4b)$$

$$T = T_{\text{mp}} \quad (4c)$$

其中 \mathbf{n}_{ag} 为坩埚外壁的外法线单位矢量; $\text{Bi} = hR/k_a$ 代表坩埚与周围环境的对流热交换; h 为坩埚外壁与周围环境间的热交换系数, 坩埚外壁不同部位的热交换系数是不同的. $\text{Rad} = \epsilon_{\text{ag}} \sigma T_{\text{mp}}^3 R / k_a$, 为辐射系数, 代表坩埚与周围环境的辐射热交换; ϵ_{ag} 为坩埚外壁的发射率; σ 为 Stefan-Boltzman 常数; \mathbf{q}_m 是由固液界面流入液态区的热流; \mathbf{q}_s 是由固液界面流入固态区的热流; \mathbf{n}_{ms} 是垂直固液界面并指向液态区的单

$$\begin{aligned} K_a \int_{\Omega_a} \left[\frac{\partial \phi}{\partial r} \times \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial \phi}{\partial z} \times \frac{\partial T}{\partial z} \right] dV + K_m \int_{\Omega_m} \left[\frac{\partial \phi}{\partial r} \times \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial \phi}{\partial z} \times \frac{\partial T}{\partial z} \right] dV + K_m \int_{\Omega_m} \phi \left[\nu_r \frac{\partial T}{\partial r} + \nu_z \frac{\partial T}{\partial z} \right] dV \\ + \int_{\Omega_s} \left[\frac{\partial \phi}{\partial r} \times \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial \phi}{\partial z} \times \frac{\partial T}{\partial z} \right] dV - S_c \int_{\Omega_{\text{ms}}} (\mathbf{e}_z \cdot \mathbf{n}_{\text{ms}}) \phi dS \\ + K_a \int_{\Omega_{\text{ag}}} \phi [\text{Bi}(T - T_f) + \text{Rad}(T^4 - T_f^4)] dS = 0 \end{aligned} \quad (7a)$$

$$\int_{\Omega_m} \left[\phi \left[\frac{1}{\text{Pr}} \left(\nu_r \frac{\partial \nu_r}{\partial r} + \nu_z \frac{\partial \nu_z}{\partial z} \right) + \left(-p + \frac{2\nu_r}{r} \right) \frac{1}{r} \right] + \frac{\partial \phi}{\partial r} \left[-p + 2 \frac{\partial \nu_r}{\partial r} \right] + \frac{\partial \phi}{\partial z} \left[\frac{\partial \nu_z}{\partial r} + \frac{\partial \nu_r}{\partial z} \right] \right] dV = 0 \quad (7b)$$

$$\int_{\Omega_m} \left\{ \phi \left[\frac{1}{\text{Pr}} \left(\nu_r \frac{\partial \nu_z}{\partial r} + \nu_z \frac{\partial \nu_z}{\partial r} \right) - \text{Ra}(T - 1) \right] + \frac{\partial \phi}{\partial r} \left[\frac{\partial \nu_z}{\partial r} + \frac{\partial \nu_r}{\partial z} \right] + \frac{\partial \phi}{\partial z} \left[-p + 2 \frac{\partial \nu_z}{\partial z} \right] \right\} dV = 0 \quad (7c)$$

$$\int_V \left[\frac{\partial \nu_r}{\partial r} + \frac{\partial \nu_z}{\partial z} + \frac{\nu_r}{r} \right] dV = 0 \quad (7d)$$

求解固液界面的位置可采用不同的方法, 一种是采用广义流体的方法^[16], 将流体的物理性质看作是温度的函数, 这种方法可以用统一的方程描述固液两相的状态, 但会增加问题的非线性程度; 另一种方法是由 Derby 等人^[14]提出的, 他们将等温条件(4c)与固液界面位置组合成一个附加方程, 这种求

位矢量. $S_c = V_p R \Delta H \rho_s / k_s T_{\text{mp}}$ 为 Stefan 数, 表征了相变放热过程.

动量方程的边界条件:

$$\text{在坩埚内壁和固液界面上: } \nu = 0 \quad (5)$$

对于轴对称情况, 在中心轴线处还满足下列条件:

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{e}_r|_{r=0} = 0 \quad (6a)$$

$$\nu \cdot \mathbf{e}_r|_{r=0} = 0 \quad (6b)$$

$$\partial(\nu \cdot \mathbf{e}_z)/\partial r|_{r=0} = 0 \quad (6c)$$

3 算法描述

本文采用 Galerkin 有限元法来求解方程^[15], 整个求解区域包括液态区、固态区和石英坩埚区. 由于满足轴对称条件, 三维问题简化为二维, 并采用柱坐标系(以 r, z 为坐标变量). 采用三角形网格来划分整个求解区域. 在液态区, 网格划分较密, 以保证动量方程的收敛. 对温度(T)、速度(ν)采用六节点三角形网格, 相应的插值函数为二次函数 ϕ , 对压力(p)采用三节点三角形网格, 相应的插值函数为线性基函数 ψ , 其中 $i = 1, 2, \dots, N, N$ 为总节点数. 用插值函数分别乘以方程(1—3), 在整个求解区域积分, 应用散度定理, 并带入边界条件(4—6), 可得以下的余值方程:

$$\begin{aligned} K_a \int_{\Omega_a} \left[\frac{\partial \phi}{\partial r} \times \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial \phi}{\partial z} \times \frac{\partial T}{\partial z} \right] dV + K_m \int_{\Omega_m} \left[\frac{\partial \phi}{\partial r} \times \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial \phi}{\partial z} \times \frac{\partial T}{\partial z} \right] dV + K_m \int_{\Omega_m} \phi \left[\nu_r \frac{\partial T}{\partial r} + \nu_z \frac{\partial T}{\partial z} \right] dV \\ + \int_{\Omega_s} \left[\frac{\partial \phi}{\partial r} \times \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial \phi}{\partial z} \times \frac{\partial T}{\partial z} \right] dV - S_c \int_{\Omega_{\text{ms}}} (\mathbf{e}_z \cdot \mathbf{n}_{\text{ms}}) \phi dS \\ + K_a \int_{\Omega_{\text{ag}}} \phi [\text{Bi}(T - T_f) + \text{Rad}(T^4 - T_f^4)] dS = 0 \end{aligned} \quad (7a)$$

$$\int_{\Omega_m} \left[\phi \left[\frac{1}{\text{Pr}} \left(\nu_r \frac{\partial \nu_r}{\partial r} + \nu_z \frac{\partial \nu_z}{\partial z} \right) + \left(-p + \frac{2\nu_r}{r} \right) \frac{1}{r} \right] + \frac{\partial \phi}{\partial r} \left[-p + 2 \frac{\partial \nu_r}{\partial r} \right] + \frac{\partial \phi}{\partial z} \left[\frac{\partial \nu_z}{\partial r} + \frac{\partial \nu_r}{\partial z} \right] \right] dV = 0 \quad (7b)$$

$$\int_{\Omega_m} \left\{ \phi \left[\frac{1}{\text{Pr}} \left(\nu_r \frac{\partial \nu_z}{\partial r} + \nu_z \frac{\partial \nu_z}{\partial r} \right) - \text{Ra}(T - 1) \right] + \frac{\partial \phi}{\partial r} \left[\frac{\partial \nu_z}{\partial r} + \frac{\partial \nu_r}{\partial z} \right] + \frac{\partial \phi}{\partial z} \left[-p + 2 \frac{\partial \nu_z}{\partial z} \right] \right\} dV = 0 \quad (7c)$$

$$\int_V \left[\frac{\partial \nu_r}{\partial r} + \frac{\partial \nu_z}{\partial z} + \frac{\nu_r}{r} \right] dV = 0 \quad (7d)$$

解方法更为精确, 但程序的实现较为复杂. 本文采用了一种新的方法, 即首先假定一个任意的固液界面, 在此基础上求解方程, 然后将计算得到的熔点等温线作为新的固液界面, 这样逐次迭代. 计算表明, 经过 10 次左右的迭代, 即可得到稳定的固液界面. 这种迭代算法思路清晰, 实现起来也较为简单. 在计算

中, 余值方程(7)的求解方法采用 Newton-Raphson 算法^[15].

4 结果和讨论

固液界面的形状受很多因素的影响. 在本文中, 我们研究了各种生长参数对固液界面形状的影响.

图 3 是采用表 2 的生长参数时, 坩埚中的等温线和流线分布, 右面为流线, 左面为等温线. 图中的各物理量均采用归一化的单位. 图中低温区、梯度区和高温区的归一化长度分别为 2.32、2.53、2.32. 在以下各图中, 如未加说明, 三个温区长度均与此一致. 在图 3 中, 液态区的等温线基本是平的, 只是在坩埚边界处有较大曲率, 这是由于 CdTe 与石英的热导率不同所造成的. 而在固态区, 等温线则是弯曲的, 固液两相的分界面较为平坦. 从图 3 的流线分布可以看到, 液态区中有两个对流环^[18], 上部的对流环包括的流动区域较大, 流速较高, 流动方向为逆时针方向; 而下部较小的对流环则按顺时针方向流动, 流速较小. 在生长三元合金(如 CdZnTe)时, 融体的对流可以起到搅拌的作用, 使溶质(Zn)在融体中的分布更为均匀. 但由于两个对流环分别处于不同的区域, 互不相交, 从而也在一定程度上阻碍了溶质的扩散.

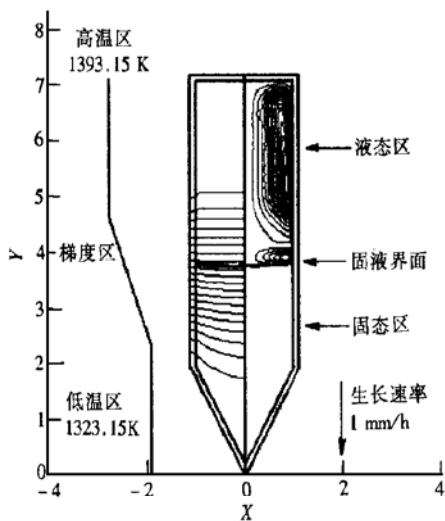


图 3 等温线和流线分布示意图

FIG. 3 Temperature Contours and Stream Function Contours

图 4 给出了在不同的生长速率下的固液界面和流线分布. 图中均出现两个流向不同的对流环. 随着

生长速度的增加, 下部的对流环逐渐增大, 流动速度也逐渐增加. 固液界面的形状也是随生长速率的改变而逐渐变化的, 当生长速率为 1mm/h 时, 固液界面基本是平的, 生长速率为 3mm/h 时, 可以看到固液界面发生明显的弯曲, 当生长速率增加到 5mm/h 时, 固液界面的弯曲程度更大. 为了表征固液界面的弯曲程度, 可以定义一个无量纲曲率 η , η 定义为坩埚中心与边界处固液界面纵坐标的差, 因此, η 为正值, 表明界面凸向液态区, η 为负值, 代表界面凸向固态区, 而 $|\eta|$ 绝对值的大小代表弯曲程度. 图 4 中生长速率为 1、3、5mm/h 时的 η 值分别为 -0.05、-0.127、-0.233.

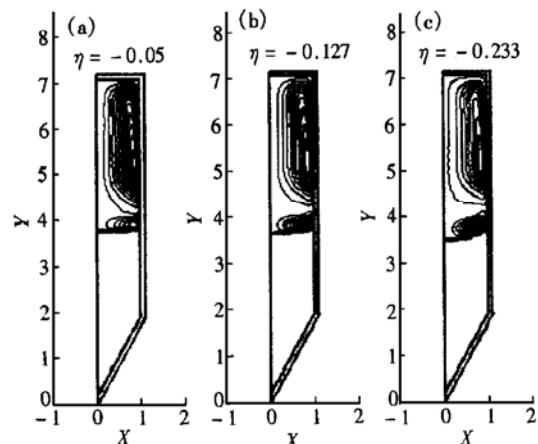


图 4 不同生长速率时的固液界面和流线分布 生长速率为: (a) 1mm/h; (b) 3mm/h; (c) 5mm/h

FIG. 4 Melt/Crystal Interface and Stream Function Contours at Different Growth Rates (a) 1mm/h; (b) 3mm/h; (c) 5mm/h

图 5 是改变高温区(T_h)和低温区(T_c)的温度时固液界面的变化. 图中的生长速率均保持为 3mm/h. 图 5(a)的高温区温度为 $T_h = 1393.15\text{K}$, 低温区温度为 $T_c = 1323.15\text{K}$, 界面曲率 $\eta = -0.127$; 图 5(b)中, 高温区保持为 $T_h = 1393.15\text{K}$, 低温区降为 $T_c = 1303.15\text{K}$; 图 5(c)中, 高温区升为 $T_h = 1413.15\text{K}$, 低温区保持为 $T_c = 1323.15\text{K}$. 在图 5(b)和 5(c)的两种情况下, 固液界面都变得更为平坦, 界面曲率 η 分别为 -0.092 和 -0.117. 不同的是, 在图 5(b)中, 固液界面靠近高温区, 而图 5(c)中的固液界面靠近低温区. 图 5(d) ($T_h = 1373.15\text{K}$, $T_c = 1323.15\text{K}$) 和 5(e) ($T_h = 1393.15\text{K}$, $T_c = 1343.15\text{K}$) 分别是降低高温区和升高低温区温度时的固液界面, 在这两种情况下, 固液界面的弯曲程度

增加, 界面曲率 η 分别为 -0.171 和 -0.234, 界面的位置也改变了.

图 5 的结果可以做如下解释: 在图 5(b) 和(c) 中, 降低低温区温度或是升高高温区温度, 本质上是增加了温度梯度; 而图 5(d) 和(e) 中其实是减小了温度梯度. 图 5(a) —(e) 的温度梯度分别为: 14.6、18.8、18.8、10.4、10.4 K/cm. 增加温度梯度可以使

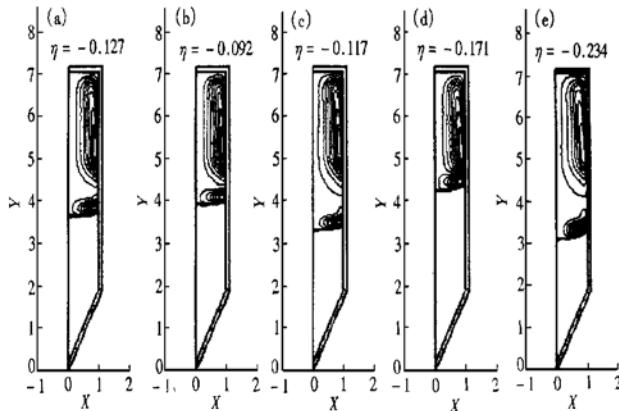


图 5 不同高温区(T_h)和低温区(T_c)温度时的固液界面

FIG. 5 Melt/Crystal Interface at Different Temperature in Hot Zone (T_h) and Cold Zone (T_c)

在计算中, 我们的着眼点在于坩埚, 认为炉子内壁处的温度分布与坩埚外壁处的温度分布相同, 如果炉腔内径与坩埚外径很接近, 这种近似是成立的, 但实际上两者内径并不一致. 由于热辐射以及坩埚壁与炉腔内壁之间空气层对流的影响, 坩埚外壁处与炉子内壁处的温度分布并不等同. 较好的解决方法是将坩埚和炉子作为一个整体考虑, 但由于辐射热传输的复杂性以及炉子和坩埚形状的复杂性, 使得炉子与坩埚之间辐射热流的计算极为复杂. 在 Hong Ouyang 等人^[17]计算中, 坩埚和炉子之间的辐射热流采用两个无限长同轴圆筒之间的辐射热流表达式, 但这一表达式并未充分考虑坩埚和炉子的具体形状对辐射热流的影响. 这里, 我们做一个定性的讨论, 由于辐射和空气层对流的影响, 会使坩埚外壁处的梯度区长度大于炉子内壁处的梯度区长度, 这相当于降低了梯度区的温度梯度, 根据前面的讨论可知, 降低温度梯度会增加固液界面弯曲程度. 在图 6 中, 给出了不同长度的梯度区对固液界面的影响. 图中 (a)、(b)、(c) 三种情况的梯度区长度分别为 2.53、4.21、5.26, 生长速率均为 3mm/h, 高温区温度为 1393.15K, 低温区为 1323.15K. 可见, 随着梯度区长度的增加, 固液界面弯曲程度随之增加. 因

固液界面变得更为平坦, 而减小温度梯度会增加固液界面的曲率. 如果单纯从晶体生长的形态学稳定性来考虑, 结晶区的温度梯度越大, 固液界面越平. 但是温度梯度太大, 由热应力所导致的缺陷也会增加. 因此, 在生长 CdTe 晶体时, 应考虑采取合适的温度梯度, 通常结晶区的温度梯度应小于 10(15) K/cm^[11].

此, 在实际长晶过程中, 如果坩埚直径与炉腔内径的比值太小, 也会对固液界面有很大的影响.

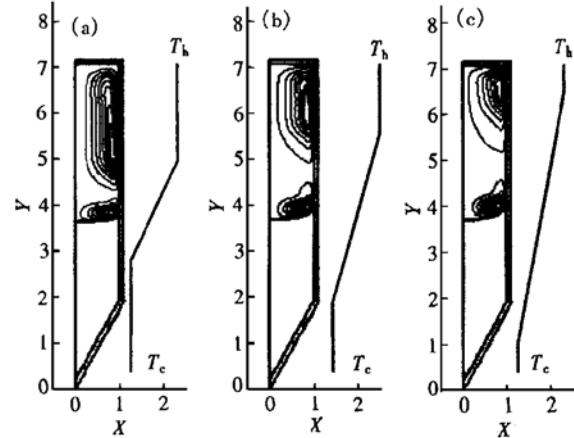


图 6 不同长度的梯度区对固液界面的影响

FIG. 6 Influence of Length of Gradient Zone on the Melt/Crystal Interface

晶体生长过程中的温场分布决定了晶体中的热量流动. 图 7 给出了系统中的热流分布, 生长条件为: 生长速率 $V_p = 3\text{mm}/\text{h}$, 高温区温度 $T_h = 1393.15\text{K}$, 低温区温度 $T_c = 1323.15\text{K}$. 图 7(a) 是内部热流, 可以看到, 在坩埚中部的结晶区域, 热流较

大,而在坩埚的两端,热流较小.图7(b)给出了坩埚外壁处的热量交换情况,向左(向右)的箭头代表单位时间流入(流出)坩埚壁的热流,可见,坩埚与外部环境之间的热交换主要发生在固液界面以及梯度区附近,坩埚两端与外部环境的热量交换较少.因此,采用不同底部形状的坩埚,在晶体生长的中间阶段,对固液界面影响不大,Hong Ouyang 等人^[17]的计算结果也表明,采用平底或是半球形底部的坩埚,固液界面的形状没有显著的变化.但是,在生长的起始阶段,坩埚底部形状对固液界面以及结晶过程的影响不可忽略^[18].

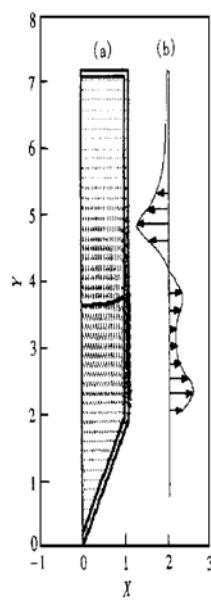


图7 垂直 Bridgman 生长 CdTe 过程中的热流分布

FIG. 7 Heat Flow in the Vertical Bridgman System During the Growth of CdTe

5 总结

在采用垂直 Bridgman 方法生长 CdTe 时,固液界面的形状是一个重要的因素,保持一个平的或凸向液体的固液界面有利于提高成晶质量.本文采用数值模拟的方法讨论了不同因素对固液界面形状的影响,计算表明,可以通过生长时的外部条件来改善固液界面的形状.

晶体的最大生长速率 V_{\max} 取决于固液界面处的温度梯度^[1],在满足生长速率 $V_p < V_{\max}$ 的前提条件下,降低生长速率 V_p 可以使界面趋于平坦,但生长速率过低,会使得生长周期太长.另一种改善固液界

面的方法是提高结晶区域的温度梯度,温度梯度越大,越容易获得平坦的固液界面,但综合考虑热应力的影响,温度梯度应保持一个合适的值,通常要求小于 10(15) K/cm.在晶体生长的中间阶段,由于坩埚与外部环境的热交换主要发生在梯度区附近,因此不同形状的坩埚(平底、半球形底部、锥形底部等)对固液界面的形状影响不大.

应当指出,材料的物理性质(热容、热导等)均与温度有关,而上面的计算中未考虑这些参数与温度之间的关系,因此,只有基于这些参数的精确测量,才能获得与实际生长系统更为吻合的数值模拟结果.

参考文献

- [1] P. Rudolph, Prog. Crystal Growth and Charact., 1994, **29**: 275.
- [2] M. Pfeiffer and M. Muhlberg, J. Cryst. Growth, 1992, **118**: 269.
- [3] T. Asahi, O. Oda, Y. Taniguchi and A. Koyama, J. Cryst. Growth, 1996, **161**: 20.
- [4] W. Palosz et al., J. Cryst. Growth, 1996, **169**: 20.
- [5] P. Hoschl et al., J. Cryst. Growth, 1998, **184/185**: 1039.
- [6] G. T. Neugebauer et al., Proc. SPIE Int. Soc. Opt. Eng., 1994, **2228**: 2.
- [7] T. Jasinski and A. F. Witt, J. Cryst. Growth, 1985, **71**: 295.
- [8] Satheesh Kuppurao, Simon Brandon and Jeffrey J. Derby, J. Cryst. Growth, 1995, **155**: 93.
- [9] Satheesh Kuppurao and Jeffrey J. Derby, J. Cryst. Growth, 1997, **172**: 350.
- [10] C. E. Chang and W. R. Wilcox, J. Cryst. Growth, 1974, **23**: 135.
- [11] C. Martinez-Tomas, V. Munoz and R. Triboulet, J. Cryst. Growth, 1999, **197**: 435.
- [12] L. Y. Chin and F. M. Calson, J. Cryst. Growth, 1983, **62**: 561.
- [13] R. K. Route, M. Wolf and R. S. Feigelson, J. Cryst. Growth, 1984, **70**: 379.
- [14] S. Brandon and J. J. Derby, J. Cryst. Growth, 1992, **121**: 473.
- [15] Kenneth H. Huebner and Earl A. Thornton, The Finite Element Method for Engineers, 2nd ed., John Wiley & Sons. Inc Press, 1982.
- [16] Wei Shyy and Ming-Husung Chen, Int. J. Heat Mass Transfer., 1990, **33**: 2545.
- [17] Hong Ouyang and Wei Shyy, J. Cryst. Growth, 1997, **173**: 352.
- [18] V. M. Lakeenkov, V. B. Ufimtsev, N. I. Shmatov and Yu. F. Schelkin, J. Cryst. Growth, 1999, **197**: 443.

Numerical Simulation of CdTe Growth with Vertical Bridgman Method^{*}

WEI Yan-feng, FANG Wei-zheng, ZHANG Xiao-ping, YANG Jian-rong and HE Li

(Shanghai Institute of Technical Physics, The Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China)

Abstract: A Galerkin finite element method is employed to calculate the thermal fields, melt flow and shape of the crystal-melt interface. The influence of the growth parameters on the crystal-melt interface is analyzed in detail. The simulations show that at a lower growth rate, a flatter interface would be obtained. Increasing the temperature gradients has also proved effective to improve the interface. Heat flow analysis shows that the heat exchange mainly concentrates near the gradient zone during the middle stage of the growth.

Key words: CdTe; vertical Bridgman method; finite element method

PACC: 0260; 6150C; 8110F

Article ID: 0253-4177(2001)07-0853-07

* Project Supported by National Natural Science Foundation of China Under Grant No. 69425002.

WEI Yan-feng postdoctor, was born in 1971. His research interest is in the growth and characterization of semiconductor materials.

Received 23 July 2000, revised manuscript received 22 September 2000

© 2001 The Chinese Institute of Electronics