

偏心 Bridgman- $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 晶体生长 S-L 界面形状的数值模拟

王培林 邓开举 张国艳 周士仁

(哈尔滨工业大学控制工程系 哈尔滨 150001)

摘要 用三维数值模拟方法研究了偏心 Bridgman- $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 晶体生长系统 S-L 界面附近的温度分布. 考察了偏心程度、安瓿与炉膛直径相对大小以及炉膛温度分布等对倾斜 S-L 界面的影响情况. 结果表明, 偏心温度场可提高晶片上一较大区域内的横向组分均匀性. $\varphi=0, \pi$ 面上的等温线分布可作为确定切片倾角的依据.

PACC: 6150C, 4410, 0260

1 引言

用经典的垂直 Bridgman 法生长 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 晶体时, 安瓿中从熔体到晶体热导率急剧下降, 同时为承受 Hg 蒸气的高压而采用很厚的石英安瓿, 使固液(S-L)界面前沿的热量有很大一部分是从熔体经安瓿壁向外传输. 因而产生了沿径向的温度梯度, 引起 S-L 界面弯曲. 另外一些因素, 如石英对红外波的透射、辐射视角 α 和 β 的相对大小及生长速度等也影响着界面形状. 象 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 这种溶质分凝很严重的赝二元合金, S-L 界面形状的微小变化都会给晶体组分分布带来很大的影响. 以至于目前组分均匀性成为制约 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 晶体质量的关键之一. 一些改进的 Bridgman 方法都着眼于获得平坦或略呈凸形的 S-L 界面. 凸形 S-L 界面有利于消除安瓿壁处的杂散晶核, 改善晶粒择优生长条件、提高单晶率. 而平坦 S-L 界面即是等温面又是等浓度面, 界面前沿径向温度梯度趋于零, 消除了此处的热对流, 使流态变成平面层流, 从而提高径向组分均匀性^[1,2]. 可用边界层扩散理论处理轴向溶质分布, 而不存在径向分凝问题. 在多种改进方法中, Bagai^[3]的使安瓿轴线平行偏离炉膛轴线而构成的非对称温度场方法(以下简称偏心 Bridgman 法)以简便为特征, 实验结果也比较理想.

本文用数值模拟方法进一步研究了这种技术. 至今为止, 关于 Bridgman 系统的数值模拟问题还仅限于一维或二维计算^[4], 而偏心 Bridgman 系统不具备轴对称性, 因此数值模拟属三维计算问题.

2 计算模型

偏心 Bridgman-Hg_{1-x}Cd_xTe 晶体生长与经典垂直 Bridgman 法基本相同, 只是将安瓿轴线平行偏离炉膛轴线. 装好材料的安瓿以拉晶速度 v_g 从热区向冷区移动, 在绝热区熔体凝固结晶. 当整个安瓿全部进入冷区后, 晶体生长结束, 如图 1(a) 所示.

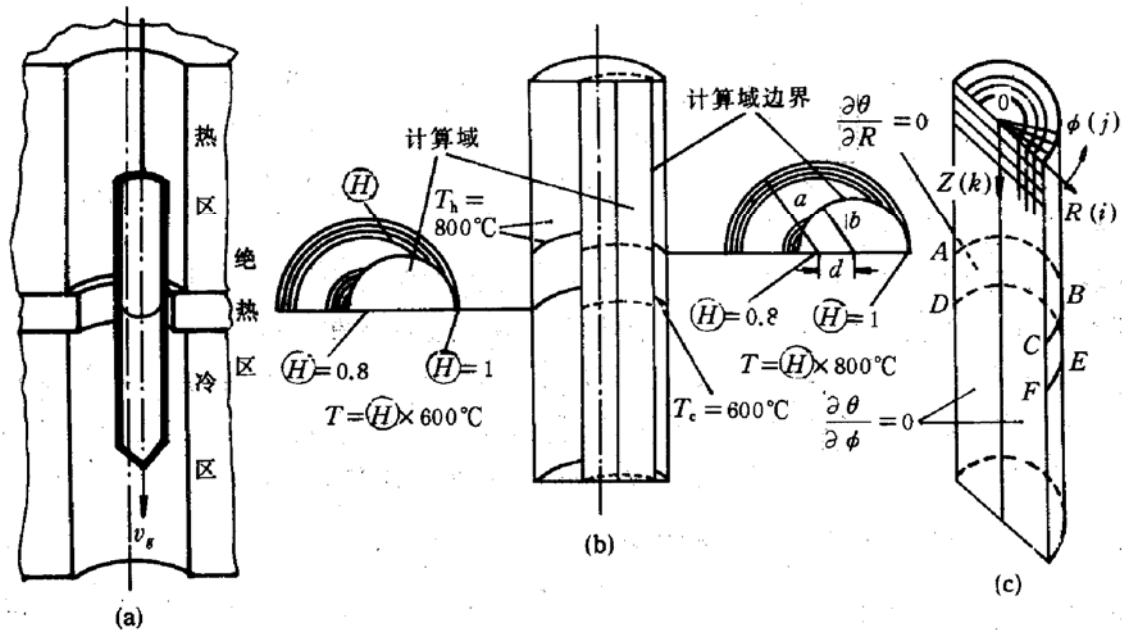


图 1 (a) 偏心 Bridgman-Hg_{1-x}Cd_xTe 晶体生长系统

(b) 计算域 (c) 绝热区上、下边界面温度分布确定方法示意图

根据以往的计算结果^[5,6], 如果 Bridgman 炉热区温度 $T_h = 800^\circ\text{C}$ 、冷区温度 $T_c = 600^\circ\text{C}$, 则绝热区内等温面近似为平行平面. 可以想象, 在这样的温度场中, 是否使安瓿轴线偏离炉膛中心位置, 对 S-L 界面形状不会带来明显的影响. 按照 Dakhoul 的数值模拟结果^[7], 降低冷区温度到一定值以后, 可以使 Bridgman 系统 S-L 界面由凹形变成凸形, 即绝热区内的温度分布为中心低、边缘高, 等温面呈凸形. 因此, 计算中这样来考虑图 1(a) 中炉膛的温度分布: 适当降低冷区温度, 使绝热区内的温度分布处于中心低、边缘高的状态. 同时绝热区上边界及以上区域炉膛壁温度为 $T_h = 800^\circ\text{C}$, 绝热区下边界炉膛壁温度为 $T_c = 600^\circ\text{C}$.

2.1 确定炉膛内温度分布

根据以上分析, 用一维无量纲热传导方程

$$\frac{d^2 \Theta}{dR^2} + \frac{1}{R} \frac{d\Theta}{dR} = 0 \quad (1)$$

来确定图 1(b) 所示的绝热区上、下两边界面等距同心圆上的温度值. 其中 $\Theta = T/T_i$, $R = r'/a$, T 是温度、 T_i 为炉膛壁温度. 绝热区上边界及热区以上: $T_i = T_h = 800^\circ\text{C}$, 绝热区下边界: $T_i = T_c = 600^\circ\text{C}$. a 为炉膛半径, r' 为径向坐标, 坐标系原点选在轴线上.

2.2 计算域内的无量纲热传输方程及边界条件

计算域如图 1(c) 所示, 不考虑安瓿本身的影响. 系统关于炉膛轴线和安瓿轴线所在平面对称, 故计算域取半个圆柱体, 坐标选取如图中所示, 并假设整个计算域有一致的导热系数 k .

柱坐标中只有沿 z 轴方向运动 ($v_r = v_\varphi = 0, v_z = v_y$) 的介质, 定常状态下的热传输方程为^[8]:

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

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 $k/\rho C_P b$ 对速度进行无量纲化, 用 π 对坐标 φ 进行无量纲化, 用计算域半径 b 对坐标 (r, z) 进行无量纲化, 则得到无量纲热传输方程:

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial R^2} + \frac{1}{R} \frac{\partial \theta}{\partial R} + \frac{1}{(\pi R)^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \Phi^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial Z^2} - P_e \frac{\partial \theta}{\partial Z} = 0 \quad (3)$$

式中 $P_e = v_g \rho C_P / k$, $R = r/b$, $\Phi = \varphi/\pi$, $Z = z/b$, $\theta = (T - T_c)/(T_h - T_c)$. 上式就是计算域内的温度方程.

轴线到炉膛壁之间, 根据计算需要可生成一定数量的等距同心圆. 这些等距同心圆上的温度值由方程(1)确定. 图 1(c) 中 ABC、DEF 的温度边界条件, 可根据这些与计算域边界相交的等距同心圆的温度值来按 I 类边界条件给出, 如图 1(b) 所示. 由于重点考察 S-L 界面附近的温度分布情况, 因此计算域端头取齐, 并与热区、冷区一起均按 I 类边界条件处理. 绝热区长度取 $2b$ 、热区和冷区长度均取 $4b$. 绝热区边界 (ACFDA 柱面) 按热流为零条件处理成 $\frac{\partial \theta}{\partial R} = 0$, $\Phi = 0, 1$ 平面边界条件按关于 Φ 对称条件处理成 $\frac{\partial \theta}{\partial \Phi} = 0$.

3 计算结果与分析

按着上述方程及边界条件, 在计算域内进行数值计算. 沿 R, Φ, Z 方向建立网格: $i = 1 \sim 20$; $j = 1 \sim 11$; $k = 1 \sim 100$. 绝热区内部有 4000 多个体元. 用有限差分方法对方程(3)进行离散化处理, 然后对每个体元逐一反复计算. 大致计算顺序是: 先按方程(1)计算炉膛内温度分布, 据此结果确定计算域边界条件, 再对内部节点赋初值, 然后进行 $\Phi = 0$ 面上体元的计算, 直到 $\Phi = 1$ 面为止. 当多次迭代计算后, 比较同一节点上前后两次温度值, 若满足精度要求就可结束计算, 最后生成图形文件.

关于柱坐标系中场量三维数值模拟结果的表现形式, 还是个有待于深入探讨的问题. 对于温度场, 若在同一图中给出 $\theta = 0.1, 0.2, \dots, 0.9$ 每个等温面立体图, 则多个等温面会交叠在一起, 使结果混乱难以分辨. 另外, 立体图形反映等温面比较形象, 但若定量反映其倾斜或弯曲, 却不如剖面上等温线准确. 我们是这样来处理计算结果的: 用 $\varphi = 0, \frac{\pi}{3}, \frac{2}{3}\pi, \pi$ 四个剖面上的等温线联合反映温度分布情况, 如图 2 所示. 由于主要研究 S-L 界面, 故只给出绝热

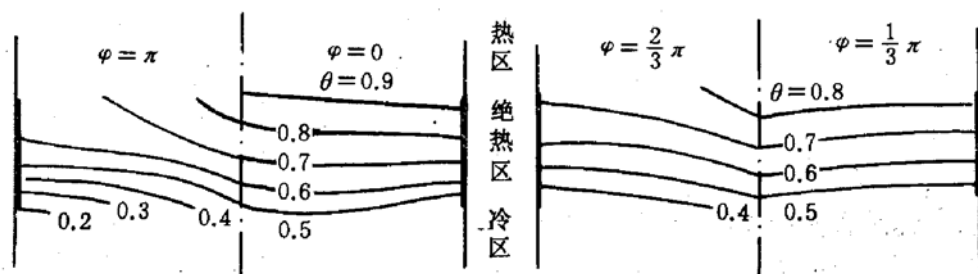


图 2 特性参数为 $a : b = 2 : 1, d = b, P_e = 0.2, \theta = 0.8 \sim 1$ 时的温度分布

区内的温度分布. 等温线曲率反映了径向温度梯度, 等温线间的疏密反映了轴向温度梯度, $\theta = 0.5$ 的等温面为 S-L 界面. 因为每一等温面代表一个可能的界面, 故实际进行晶体生长时, 亦可通过调整冷区热区温度而使 S-L 界面与某一特定 θ 值等温面对应. 部分结果还给出了 S-L 界面立体图. 重点考察了安瓿中心轴线偏离炉膛中心轴线的距离 d 、炉膛温度分布 θ 、炉膛半径与安瓿半径比 $a:b$ 以及无量纲拉晶速度 P_s 对 S-L 界面的影响. 图 3~图 5 为 $P_s=0.5$ 、 $\theta=0.8\sim 1$, 几何参数 $a:b$ 及 d 不同时所计算的 S-L 界面. 下面对计算结果作一归纳分析.

(1) 比较图 3 与图 4, 它们所对应的特性参数区别只在于偏心距离 d . 图 4 中的 S-L 界面

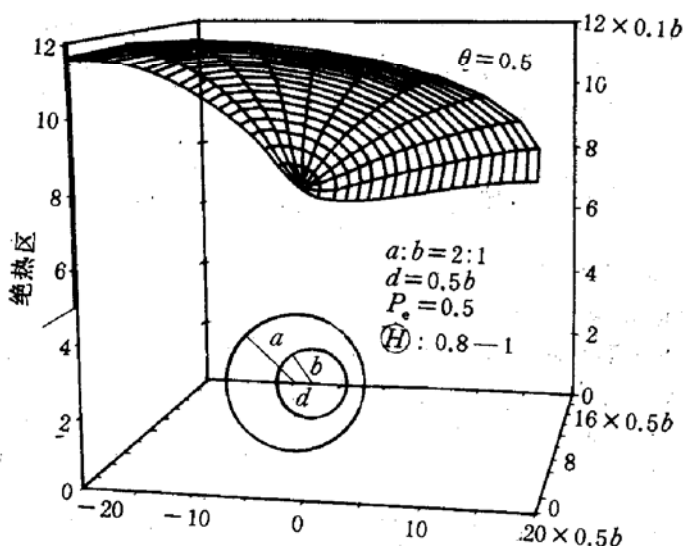


图 3 $a:b=2:1, d=0.5b$ 时的 S-L 界面

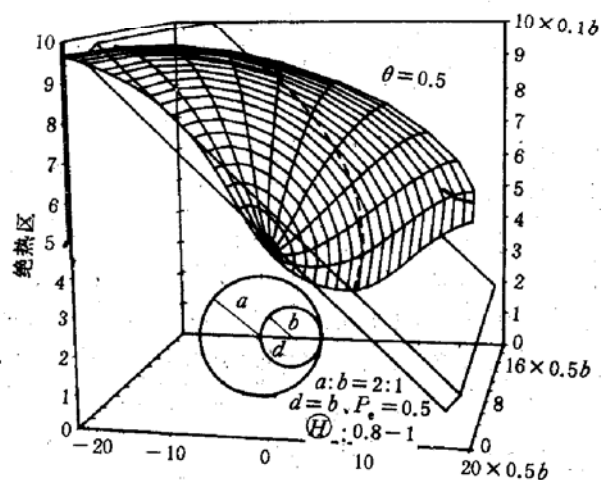


图 4 $a:b=2:1, d=b$ 时的 S-L 界面

倾斜现象比图 3 严重, 这说明 d 愈大, S-L 界面倾斜愈明显. $\theta=0.8\sim 1$ 代表炉膛内温度分布的范围: 热区和绝热区上、下边界轴线处无量纲温度为 0.8, 炉膛壁处为 1, 如图 1(b) 所示.

(2) 比较图 4 和图 5 可知, 炉膛与安瓿半径相差较大者, 其 S-L 界面倾斜较明显. 这说明适当增大炉膛直径, 并尽可能使安瓿靠近边缘位置, 才能有效利用偏心温度场技术.

(3) 图 6 将四种情况下的 $\theta=0.5$ 等温线集中在一起. 从曲线 1、2、3 可看出, 随着无量纲拉晶速度增大, S-L 界面逐渐向下移动, 更加靠近冷区. 这与以往的计算结果^[6,9]相同.

(4) 比较图 6 中 2、4 两条曲线, 可见炉膛中温度分布对 S-L 界面弯曲和倾斜影响很大. 炉膛径向温度梯度愈大, S-L 界面倾斜愈明显.

(5) 全部模拟结果均表明, 偏心 Bridgman-Hg_{1-x}Cd_xTe 晶体生长时, S-L 界面呈倾斜状态, 同时尚有下凹现象, 但下凹谷点偏离中心位置. 如果按图 4 中所示的倾斜平面对样品切片, 能使晶片上一较大区域内的横向组分均匀性得到改善, 而这是经典 Bridgman 方法所不能办到的. 模拟结果中提供的 $\varphi=0$ 与 $\varphi=\pi$ 面上的等

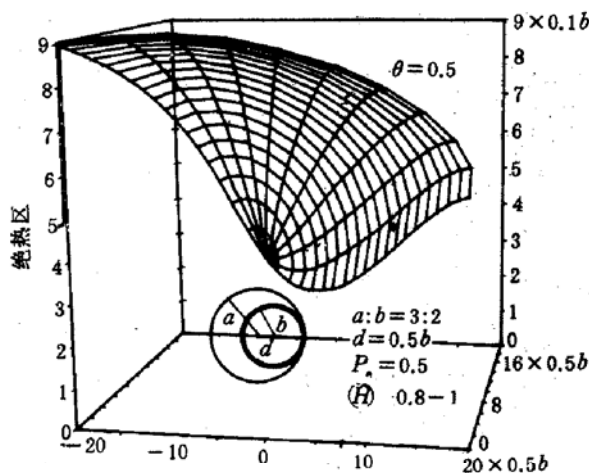


图 5 $a:b=3:2, d=0.5b$ 时的 S-L 界面

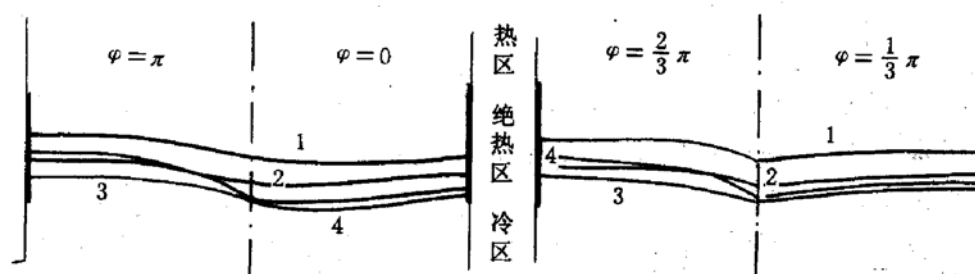


图 6 四种不同情况下的 S-L 界面

1. $a:b=2:1$, $d=0.5b$, $P_e=0$, $\Theta=0.8\sim 1$; 2. $a:b=2:1$, $d=0.5b$, $P_e=0.5$, $\Theta=0.8\sim 1$;
3. $a:b=2:1$, $d=0.5b$, $P_e=1$, $\Theta=0.8\sim 1$; 4. $a:b=2:1$, $d=0.5b$, $P_e=0.5$, $\Theta=0.6\sim 1$.

温线可以作为确定切片角度的依据。

参 考 文 献

- [1] P. Capper, J. J. G. Gosney and C. L. Jones, J. Crystal Growth, 1984, **70**:356.
- [2] C-H. Su, S. L. Lehoczky and F. R. Szofran, J. Crystal Growth, 1991, **109**:392.
- [3] B. Antar, University of Tennessee Space Institute. Private Communication, 1988.
- [4] 王培林, 魏科, 张国艳等, 材料研究学报, 1994, **8**(5):411.
- [5] T-W. Fu and W. R. Wilcox, J. Crystal Growth, 1980, **48**:416.
- [6] 王培林, 魏科, 周士仁, 半导体学报, 1994, **15**(9):596.
- [7] Y. M. Dakhoul, R. Farmer, S. L. Lehoczky *et al.*, J. Crystal Growth, 1988, **86**:49.
- [8] 陈景仁, 流体力学及传热学, 北京: 国防工业出版社, 1984.
- [9] 王培林, 刁凤斌, 魏科等, 哈尔滨工业大学学报, 1994, **26**(6):50.

Numerical Simulation of S-L Interface Shape of Asymmetrical Bridgman- $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ Crystal Growth

Wang Peilin, Deng Kaiju, Zhang Guoyan and Zhou Shiren

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

Received 27 July 1994, revised manuscript received 2 January 1995

Abstract The temperature distribution around the S-L interface of the asymmetrical Bridgman- $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ crystal growth system has been studied by using the three-dimensional numerical analysis method. The effects of asymmetrical degree, the size of the ampoule compared with the furnace and the temperature distribution in the furnace on the inclined S-L interface, etc., have been investigated. The results show that the asymmetrical temperature field is able to increase the radial compositional uniformity in a large area. $\varphi=0$ and the isotherm distribution on the π plane can be used as basis in position determination of the cut slice.