

布里兹曼法碲镉汞 ($\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$) 晶体生长过程热场的数值分析

王培林 魏科 周士仁

(哈尔滨工业大学自控系 哈尔滨 150001)

摘要 用控制容积法对布里兹曼法碲镉汞 ($\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$) 晶体生长过程热场分布进行了计算。介绍了控制容积公式的推导和边界条件的处理,并对所得结果进行了分析。虽然碲镉汞晶体生长时热场受系统的影响情况错综复杂,但从本文的研究结果中仍可看出一些明显的规律,可供从事该方面研究工作时参考。

PACC: 6150C, 4410, 0260

1 引言

碲镉汞晶体作为红外探测器材料,在军事和空间技术中有极重要的应用价值,其制备方法受到了高度重视,已成为当代红外技术的中心研究课题^[1]。作为三元合金的碲镉汞相图,液相线和固相线分离的很宽,故获得组分均匀的高质量材料是非常困难的。诸种制备方法各有优势。因此对所应用方法技术细节的认识和掌握是相当重要的。

布里兹曼法是得到大直径碲镉汞体单晶的一种有效手段。国际上已用该方法生长出径向组分均匀性 $\Delta x \leq \pm 0.002$ 、直径 $\phi = 20\text{mm}$ 或更大的块晶碲镉汞^[2]。应用该方法时掌握每一时刻系统的状态都是重要的,如熔液运动方式、压力情况、固液界面形状、固液界面前沿温度梯度、溶质分布等等。而所有这些都与该时刻的温度分布有关。因此,控制和了解每一时刻系统中的温度分布,是正确使用布里兹曼法进行碲镉汞晶体生长成败的关键。

本文用数值计算方法对垂直布里兹曼法生长碲镉汞晶体时系统中温度分布情况进行了研究,介绍控制方程和边界条件的具体处理方法。作为计算机模拟的一大优点,是同时给出众多的信息结果,可供实际晶体生长时参考。

2 系统模型

实际布里兹曼炉总长度为 650mm,炉膛直径为 30mm。碲镉汞 ($\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$) 材料典型组分为 $x = 0.2$,生长速度为 0.2mm/h,结晶潜热为 130.4J/g。图1是针对实际晶体

生长系统, 计算中所采用的模型。柱面坐标系原点选在安瓿上端, Z 轴方向向下。图中符号物理意义及取值如表 1 所示。

表 1 模型参数及取值

安瓿长度 $h_z(\text{mm})$	100
安瓿外半径 $h_r(\text{mm})$	10
安瓿厚度 $h_a(\text{mm})$	3
安瓿在炉膛中的位置 $h_1(\text{mm})$	40
绝热区厚度 $bb(\text{mm})$	20
热区温度 $T_h(^{\circ}\text{C})$	800
结晶温度 $T_1(^{\circ}\text{C})$	702
冷区温度 $T_c(^{\circ}\text{C})$	600
无量纲温度 θ	$(T - T_c)/(T_h - T_c)$
碲镉汞组分 x	0.2
热区换热系数 $\alpha_1(\text{W}/\text{cm}^2\text{C})$	0.01
冷区换热系数 $\alpha_2(\text{W}/\text{cm}^2\text{C})$	0.01
熔体导热系数 $C_{k1}(\text{W}/\text{cm}^2\text{C})$	0.0196
晶体导热系数 $C_{k2}(\text{W}/\text{cm}^2\text{C})$	0.00291
石英安瓿导热系数 $C_{k3}(\text{W}/\text{cm}^2\text{C})$	0.0251

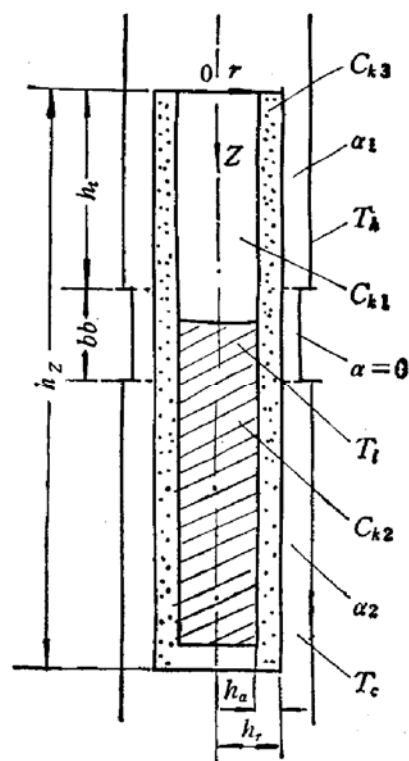


图 1 系统模型

一般情况下溶质的分布情况对浮力驱动的对流有一定的抑制作用^[3], 同时还可以应用磁场技术抑制熔体中的热对流, 使熔体内的传热机制主要是热传导^[4]。因此计算模型中只考虑熔体中有热传导, 不考虑对流对传热的作用。由于固液界面前沿组分分布发生变化, 结晶温度随组分分布而有所改变, 因此实际结晶界面并不是等温面。但是在一定精度范围内, 仍可以近似地认为结晶界面是温度为 T_1 的等温面^[5]。石英安瓿与炉膛之间的热传输有导热、对流换热及辐射换热三种机制, 作为一种近似, 将这三种传热机制一起考虑到总的换热中去, 用换热系数 α_1 、 α_2 值的大小来表征。计算模型中忽略生长速度 V_s 所带来的影响, 用安瓿在炉膛内的上下不同位置来反映不同生长时间下的实际情况。忽略结晶潜热。

3 控制方程和边界条件

研究温度场定常问题的数值计算方法有很多种。这里我们应用控制容积法, 这是一种计算传热、传质、流体流动以及有关过程的通用方法^[6]。它的基本思想是把整个计算域分成许多互不重叠的控制容积, 并使每一个网格点都由一个控制容积所包围, 对每个控制容积建立控制方程, 即得到控制容积公式。

3.1 建立控制容积公式

轴对称导热问题适合于采用二维柱面坐标系来描述, 导热微分方程为^[7]

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial Z} \left(K \frac{\partial T}{\partial Z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r K \frac{\partial T}{\partial r} \right) + S \quad (1)$$

对于无内热源定常问题,该方程可化简为:

$$\frac{\partial}{\partial Z} \left(K \frac{\partial T}{\partial Z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r K \frac{\partial T}{\partial r} \right) = 0 \quad (2)$$

上述方程中 K 为导热系数, S 为内热源项, ρ 为密度, c 是比热。

下面对图 2 所示的二维柱面坐标系统的网格划分,根据控制容积的能量平衡原理,来推导控制容积公式^[8]。对于任意一个控制容积 (i, j) ,沿 r 方向流入的净流量为:

$$\begin{aligned} J_r(i, j) &= -K_w(i, j) \frac{T(i, j) - T(i, j-1)}{dr} \\ &\quad \cdot (j-1)drdZ + K_e(i, j) \\ &\quad \cdot \frac{T(i, j+1) - T(i, j)}{dr} \\ &\quad \cdot (j)drdZ \end{aligned} \quad (3)$$

沿 Z 方向流入的净热流量为:

$$\begin{aligned} J_z(i, j) &= -K_n(i, j) \frac{T(i, j) - T(i-1, j)}{dZ} (j)(dr)^2 \\ &\quad + K_s(i, j) \frac{T(i+1, j) - T(i, j)}{dZ} (j)(dr)^2 \end{aligned} \quad (4)$$

无内热源定常传热问题要求流入控制容积的净热流量为零,即

$$J_r(i, j) + J_z(i, j) = 0 \quad (5)$$

将(3)式和(4)式代入(5)式中,整理得

$$\begin{aligned} a_r(i, j)T(i, j) &= a_n(i, j)T(i, j+1) + a_w(i, j)T(i, j-1) \\ &\quad + a_n(i, j)T(i-1, j) + a_s(i, j)T(i+1, j) \end{aligned} \quad (6)$$

其中

$$\left. \begin{aligned} a_n(i, j) &= K_n(i, j)(j)(dr)^2/dZ \\ a_w(i, j) &= K_w(i, j)(j-1)dZ \\ a_n(i, j) &= K_n(i, j)(j)(dr)^2/dZ \\ a_s(i, j) &= K_s(i, j)(j)(dr)^2/dZ \\ a_r(i, j) &= a_n(i, j) + a_w(i, j) + a_n(i, j) + a_s(i, j) \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

(3)式中第一项是经过 w 界面进入控制容积的热流,第二项是经过 e 界面流入控制容积的热流。(4)式中第一项是经过 n 界面进入控制容积的热流,第二项是经过 s 界面流入

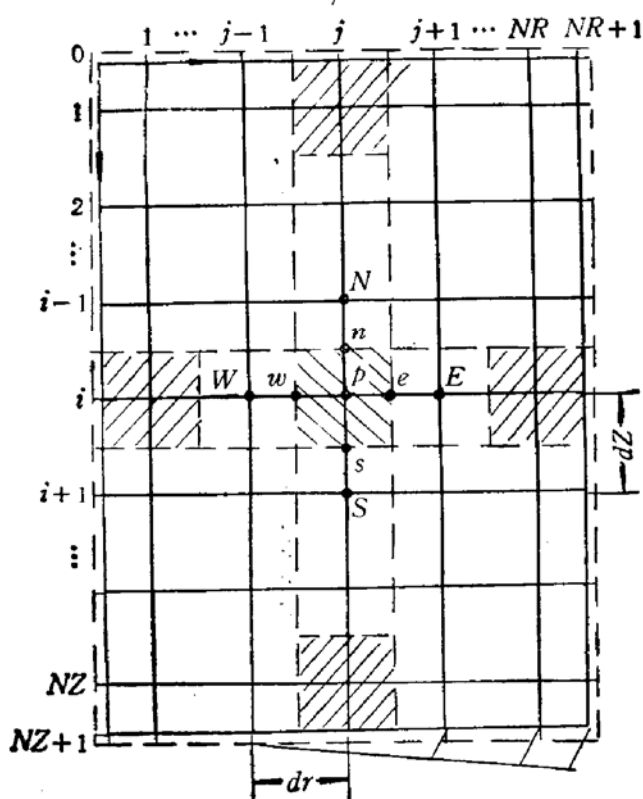


图 2 二维柱面坐标系统控制容积的网格划分方法

控制容积的热流。(6)式和(7)式就是我们要推导的控制容积公式。计算过程中取相邻格点上导热系数的调和平均值作为控制容积界面上的导热系数,例如

$$K_e(i,j) = 2K(i,j)K(i,j+1)/[K(i,j) + K(i,j+1)].$$

3.2 边界条件

根据图2所示的网格结构,可以对边界条件进行分别处理。

3.2.1 上边界、下边界

控制容积 $(1,j)$ 的 n 分界面与格点 $(0,j)$ 相重合。可以认为格点 $(0,j)$ 是在控制容积 $(1,j)$ 的 n 分界以外,但距 n 分界面的距离为零。因此有

$$K_n(1,j) = K(0,j) \quad (8)$$

考虑到上边界处于热区中,令

$$T(0,j) = T_h \quad (9)$$

通过对控制容积 $(1,j)$ 建立热流平衡方程式,可得

$$a_n(1,j) = 2K(0,j)(j)(dr)^2/dZ \quad (10)$$

公式(8)、(9)、(10)就是上边界条件。

同理,对控制容积 (NZ,j) 建立热流平衡方程,可得到下边界条件

$$T(NZ+1,j) = T_c \quad (11)$$

$$K_s(NZ,j) = K(NZ+1,j) \quad (12)$$

$$a_s(NZ,j) = 2K(NZ+1,j)(j)(dr)^2/dZ \quad (13)$$

3.2.2 左边界

与处理上、下边界情况相似,对控制容积 $(i,1)$ 建立热流平衡方程,可得到左边界条件:

$$a_w(i,1) = 0 \quad (14)$$

$$T(i,0) = T(i,1) \quad (15)$$

3.2.3 右边界

右边界条件是安瓿与外界的热交换条件,分三种情况:热区、冷区、绝热区。首先考虑按绝热条件来处理绝热区的边界条件。绝热条件下应有 $K_e(i,NR) = 0$, 于是对控制容积 (i,NR) 建立热流平衡方程,可得到绝热区内边界条件为:

$$a_E(i,NR) = 0 \quad (16)$$

$$T(i,NR+1) = T(i,NR) \quad (17)$$

对于热区或冷区,仍然对控制容积 (i,NR) 建立热流方程。此时根据换热系数 α_1 、 α_2 及炉膛温度 T_f 来确定进出安瓿表面的热流,可得热区边界条件为:

$$T_f = T_h \quad (18)$$

$$a_E(i,NR) = \alpha_1(NR)drdZ \quad (19)$$

冷区边界条件为:

$$T_f = T_c \quad (20)$$

$$a_E(i,NR) = \alpha_2(NR)drdZ \quad (21)$$

4 计算结果与分析

将上述控制容积公式和边界条件编程计算,大致计算顺序是首先对 $T(i,j)$ 、 $K(i,j)$ 赋初值,然后计算导热系数 $K_c(i,j)$ 、 $K_w(i,j)$ 、 $K_a(i,j)$ 、 $K_s(i,j)$ 以及系数 $a_c(i,j)$ 、 $a_w(i,j)$ 、 $a_n(i,j)$ 、 $a_s(i,j)$,计算时取 $i = 1, 2, 3 \cdots NZ$, $j = 1, 2, 3 \cdots NR$. 再利用三对角矩阵算法 (TDMA) 进行逐行和逐列计算 $T(i,j)$,最后比较前后两次迭代计算的温度是否满足精度要求而结束运算。计算中模型参数取值如表 1 所示,共划分 6000 个控制容积,迭代精度为 0.01。下面以曲线的形式给出计算结果,各图中其它未标注的参数取值均与表 1 相一致。

图 3 结果是空炉膛和实际晶体生长时的温度分布,绝热区在 35—65mm 之间。由于碲镉汞熔体的导热系数比晶体的导热系数大,因此熔体中的轴向温度梯度很小,晶体中的轴向温度梯度很大,在晶体生长过程中很容易发生组分过冷或晶体中应力过大。

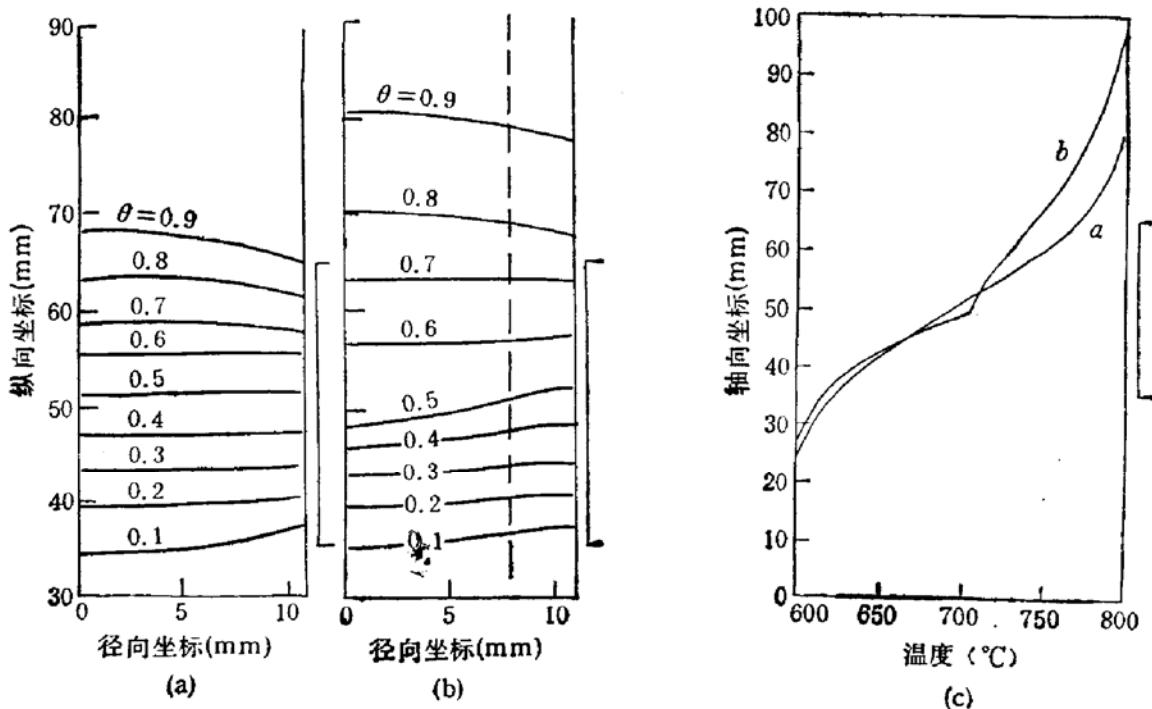


图 3 (a) 空炉膛温度分布 (b) 实际晶体生长时的温度分布 (c) 中心轴线上两种情况的温度分布。
 $h_r = 11 \text{ mm}$ $h_c = 35 \text{ mm}$ $bb = 30 \text{ mm}$ 空气导热系数 $K_{g,1} = 6.5 \times 10^{-4} \text{ W/cm}^\circ\text{C}$

图 4 是热区和冷区换热系数不同时的温度分布情况,固/液界面(图中 $\theta = 0.5$ 的等温线)一般情况下总是呈凹形,下凹的深度受换热系数的影响不大,一般均为 2—3mm,这与 P. Capper 等人^[9]的实验结果相符合。随着热区换热系数的增大,界面向下平移,同时轴向温度梯度亦随之增大。

图 5 所示为对应晶体生长的不同阶段固/液界面在绝热区中的变化情况。比较曲线(1)、(2)、(3)、(4)、(6)可看到,在晶体生长过程中,固/液界面逐渐向下移动,而且下凹深度逐渐增大。碲镉汞材料的导热系数与组分密切相关^[10],比较曲线(7)和(2)以及(4)和(5),可看到当晶体的导热系数增加时,固/液界面下凹深度相应减小,即径向温度梯度减

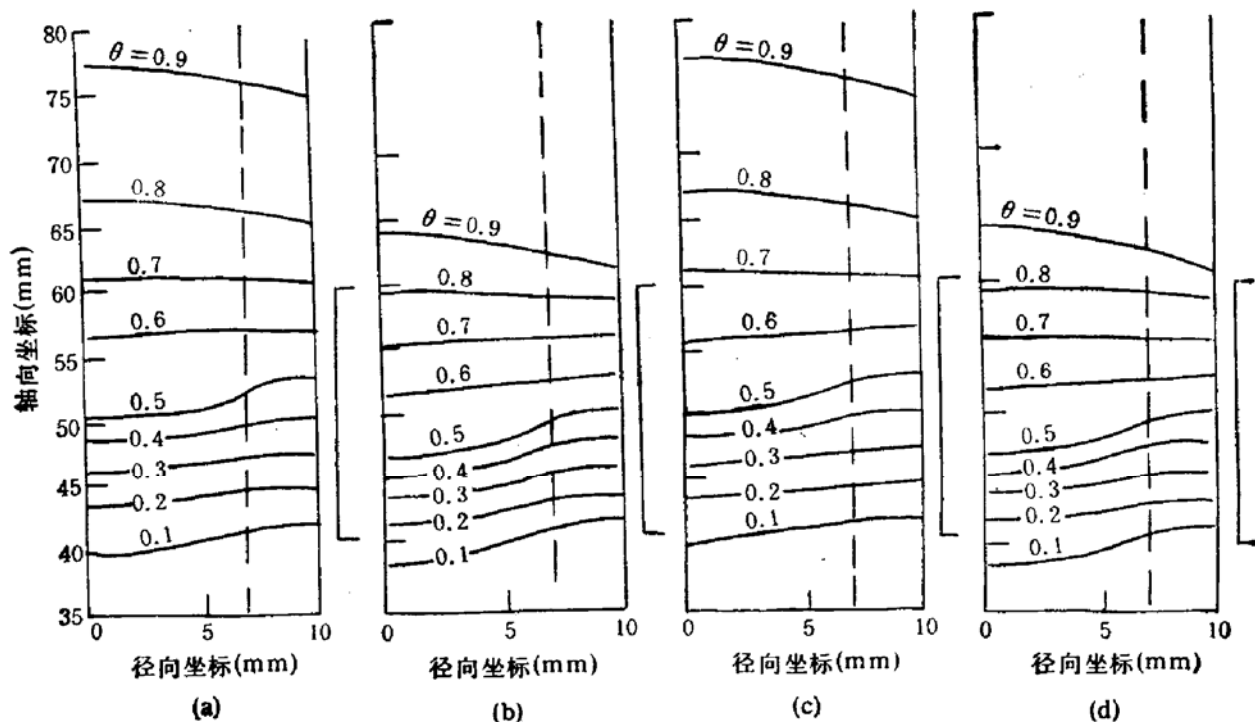


图4 不同换热系数情况下的温度分布

(a) $\alpha_1 = 0.01 \text{ W/cm}^2\text{°C}$ $\alpha_2 = 0.01 \text{ W/cm}^2\text{°C}$ (b) $\alpha_1 = 0.1 \text{ W/cm}^2\text{°C}$ $\alpha_2 = 0.01 \text{ W/cm}^2\text{°C}$
 (c) $\alpha_1 = 0.01 \text{ W/cm}^2\text{°C}$ $\alpha_2 = 0.1 \text{ W/cm}^2\text{°C}$ (d) $\alpha_1 = 0.1 \text{ W/cm}^2\text{°C}$ $\alpha_2 = 0.1 \text{ W/cm}^2\text{°C}$

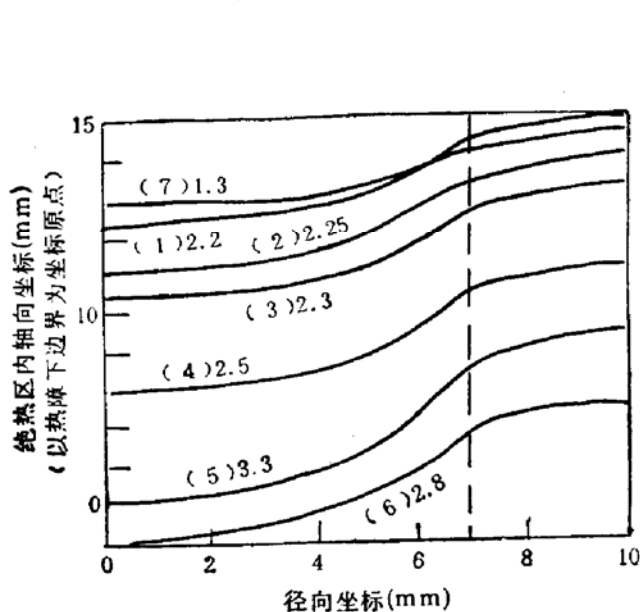


图5 不同生长时期固/液界面在绝热区中的位置及

下凹深度(图中数字 (mm)) h_i 分别取值为:

- (1) 80 (2) 60 (3) 40 (4) 20
 (5) 20 ($C_{k1} = 0.0392 \text{ W/cm}^2\text{°C}$) (6) 0
 (7) 60 ($C_{k2} = 0.006 \text{ W/cm}^2\text{°C}$)

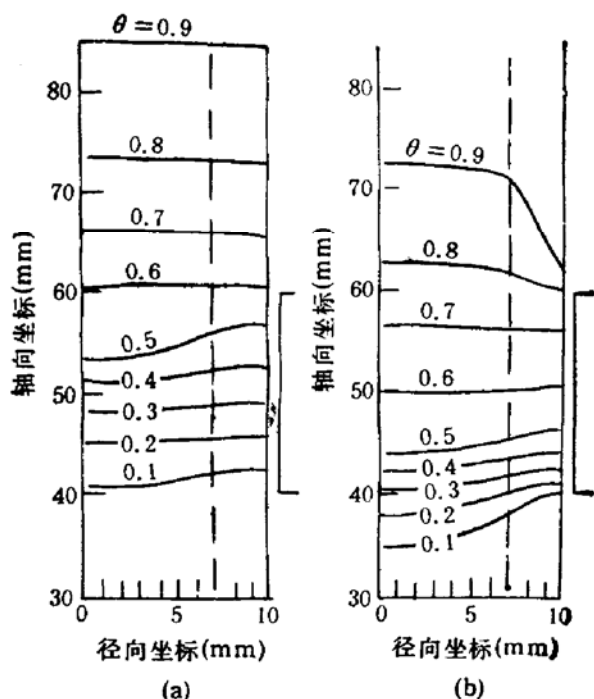


图6 安瓿导热系数对热场的影响

(a) $C_{k1} = 0.1 \text{ W/cm}^2\text{°C}$
 (b) $C_{k1} = 0.002 \text{ W/cm}^2\text{°C}$

小;当熔体中的导热系数增加时,固/液界面下凹深度增加。

图6是安瓿导热系数对热场影响情况。可看出固/液界面下凹深度随安瓿导热系数减小而减小。

5 结论

本研究工作用控制容积方法对布里兹曼法碲镉汞 ($\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$) 晶体生长过程进行了传热数值计算,对计算结果进行分析,得出如下结论,仅供参考:

(1) 在固/液界面前沿熔体中,由于熔体导热系数比晶体大得多,因此难以得到大的轴向温度梯度,而晶体中的轴向温度梯度却很大。

(2) 固/液界面一般总是呈凹形,下凹深度为 1—4mm。热区换热系数变化对固/液界面影响较明显,随着它的增大而向下移动,同时轴向温度梯度也随之增大。

(3) 石英安瓿对固/液界面的影响表现为在安瓿壁附近引起一较大的径向温度梯度。随着安瓿导热系数的减小,径向温度梯度逐渐减小,固/液界面向下移动并且下凹深度减小。

(4) 随着生长的进行,固/液界面不断向下移动,下凹深度逐渐增大。

(5) 另外,计算结果还表明若晶体导热系数增大、熔体导热系数减小,或适当提高热区、冷区温度差值 ($T_h - T_c$),则界面处的径向温度梯度减小。

参 考 文 献

- [1] 宋炳文,红外技术,1987 9(4): 1.
- [2] F. R. Szofran and S. L. Lenoczky, J. Crystal Growth, 1984, 70: 349.
- [3] D. H. Kim and R. A. Brown, J. Crystal Growth, 1989, 96: 609.
- [4] Ching-Hua Su, S. L. Lenoczky and F. R. Szofran, J. Crystal Growth, 1991, 109: 392.
- [5] C. J. Chang and R. A. Brown, J. Crystal Growth, 1983, 63: 343.
- [6] S. V. 帕坦卡,传热与流体流动的数值计算,北京: 科学出版社,1984, 33.
- [7] 郭宽良,孔祥谦,陈善年,计算传热学,北京: 中国科学技术出版社,1988, 53.
- [8] E. R. G. 埃克特, R. M. 德雷克,传热与传质分析,北京: 科学出版社,1983, 132.
- [9] P. Capper, J. J. G. Gdsney, C. L. Jones and M. J. T. Quelch, J. Crystal Growth, 1983, 63: 154.
- [10] Ching-Hua Su, J. Crystal Growth, 1986, 78: 51.

Numerical Analysis of Temperature Field in Bridgman Crystal Growth of $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$

Wang Peilin, Wei Ke and Zhou Shiren

(Department of Automatic Control Harbin Institute of Technology, Haerbin 150001)

Abstract The temperature field distribution in Bridgman crystal growth of $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ is calculated with volumecontrol method. The derivation of volume-control equations and the treatments of boundary conditons are introduced. The calculated results are analysed. Although the temperature field affected by the system during the $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ crystal growth is very complicated, some explicit results which would be useful in the research can also be obtained from the analysis.

PACC: 6150C, 4410, 0260

Received 7 January 1993, revised manuscript received 2 June 1993