

文章编号: 1672-8785(2010)01-0041-03

碲锌镉晶体生长炉温度场的一阶仿真

王忆锋 姜 军

(昆明物理研究所, 云南昆明 650223)

摘 要: 介绍了一种碲锌镉晶体生长炉温度场一阶仿真的实用方法。该方法基于传热学原理, 利用蒙特卡罗法计算没有解析表达式的角系数, 利用 MATLAB 的矩阵计算功能实现多变量线性代数方程组的求解, 具有简单、易用的特点。

关键词: 碲锌镉; 温度场; 角系数; MATLAB

中图分类号: TN304.053 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3969/j.issn.1672-8785.2010.01.009

First-order Simulation of Temperature Field of Cadmium Zinc Telluride Crystal Growth Furnace

WANG Yi-feng, JIANG Ju

(Kunming Institute of Physics, Kunming 650223, China)

Abstract: A practical first-order simulation method for simulating the temperature field of a cadmium zinc telluride crystal growth furnace is presented. The method is based on the heat transfer principle, uses the Monte Carlo method to calculate the angle factors without analytical expressions and utilizes the matrix computation function in MATLAB to solve the multi-variable linear algebraic equations. It is simple and easy to use.

Key words: cadmium zinc telluride; temperature field; angle factor; MATLAB

1 引言

碲锌镉晶体是一种重要的碲镉汞红外探测器衬底材料, 常用布里奇曼法生长, 通过安瓿与生长炉中温度场的相对运动实现定向冷却结晶。作为直接可控的参数, 温度场可以通过合适的炉膛温度分布和抽拉速率进行调整。温度场对于晶体生长质量有着最重要的影响。已有的理论研究表明, 许多与微观组织有关的参数均和温度场有直接关系。温度场的准确描述是一个复杂的传热问题, 涉及传导、对流和辐射三种传热机制以及它们之间的相互作用, 可用传热方程来描述。实际所用的生长炉温度在 1065 °C ~ 1130 °C 之间。根据传热学理论, 当温度高

于 1000 °C 时, 辐射传热起主要作用^[1]。因此, 作为一阶近似分析, 可以暂不考虑传导和对流对于温度场的影响。利用 MATLAB 提供的矩阵计算功能, 容易实现对碲锌镉晶体生长炉温度场进行分析的一阶仿真。

2 温度场模型与计算过程

碲锌镉晶体生长炉为圆柱腔体结构, 其主要特点是它有一个双温区, 炉子的上中段提供锭料熔化温度, 下段提供长晶后的保温退火, 中间是温度梯度调节区, 如图 1 所示。由于在晶体的生长过程中, 安瓿的移动非常缓慢 ($\mu\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ 或者 $\text{mm} \cdot \text{h}^{-1}$), 可以形成准稳态的温度场, 故

收稿日期: 2009-08-26

作者简介: 王忆锋 (1963-), 男, 湖南零陵人, 工学士, 高级工程师, 主要从事器件仿真研究。E-mail: wangyifeng63@sina.com

分析中人们大多采用准稳态模型。作为一种简化的近似分析,本文只考虑没有安瓿时的生长炉稳态温度场。

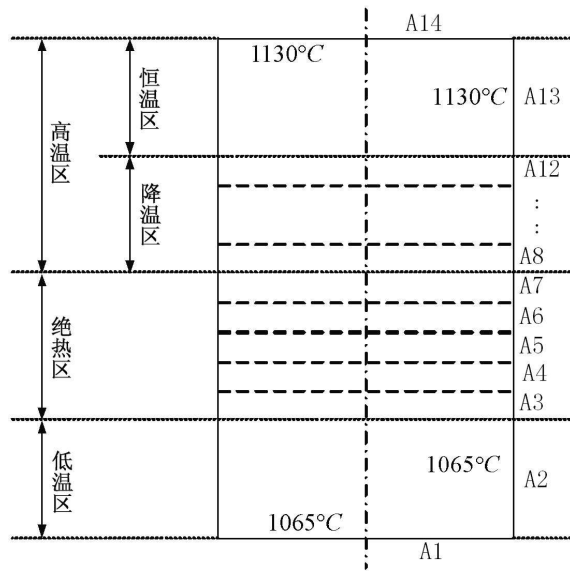


图 1 碲锌镉生长炉的结构和加热温度分布示意图

辐射换热的数值求解过程可以概括如下[1,2]:

① 确定各表面的发射率 ε_i 和辐射换热角系数 F_{ij} 。多数情况下,角系数 F_{ij} 的计算公式可以从文献中查出[3,4],本文不再单列;对于文献中可能查不到计算公式的情况,例如图 1 中底面 A1 对侧面圆环 A3 的角系数,根据角系数的定义[5],可以写出

$$F_{1,3} = \frac{2}{\pi R} \times \int_{\theta=0}^{2\pi} \int_{r=0}^R \int_{h=0}^H \frac{hr(R+r\cos\theta)}{(h^2+R^2+r^2+2Rr\cos\theta)^2} dh dr d\theta \quad (1)$$

该积分没有解析形式的结果,可通过用蒙特卡罗方法编程来做数值计算。

根据角系数的相对性,有

$$A_i F(i, j) = A_j F(j, i) \quad (2)$$

另外,角系数之间满足下列关系:

$$\sum_{j=1}^{14} F(i, j) = 1 \quad (3)$$

据此可以验证角系数计算的正确性。根据上述关系计算出来的角系数如表 1 所示。

② 对于所有已经给定温度的表面,利用 $E_{b_i} = \sigma T_i^4$ 的关系式计算出 E_{b_i} ;

③ 对于所有有效辐射 J_i ,列出节点方程,其中对于具有指定温度的表面,可按式计算:

$$J_i = \frac{1}{1 - F_{i,i}(1 - \varepsilon_i)} \left[(1 - \varepsilon_i) \sum_{j \neq i} F_{i,j} J_j + \varepsilon_i E_{b_i} \right] \quad (4)$$

对于绝热表面,可按式计算:

$$J_i = \frac{1}{1 - F_{i,i}} \sum_{j \neq i} F_{i,j} J_j \quad (5)$$

上述关系可以合并写成下列形式的矩阵方程:

$$\begin{bmatrix} 1 & -c_1 F_{1,2} & -c_1 F_{1,3} & \cdots & -c_1 F_{1,14} \\ -c_2 F_{2,1} & 1 & -c_2 F_{2,3} & \cdots & -c_2 F_{2,19} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ -c_{14} F_{14,1} & -c_{14} F_{14,2} & \cdots & \cdots & 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} J_1 \\ J_2 \\ \vdots \\ J_{14} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{14} \end{bmatrix} \quad (6)$$

其中,对于具有指定温度的表面,

$$\begin{cases} c_i = \frac{1 - \varepsilon_i}{1 - F_{i,i}(1 - \varepsilon_i)} \\ b_i = \frac{\varepsilon_i E_{b_i}}{1 - F_{i,i}(1 - \varepsilon_i)} \end{cases} \quad (7)$$

对于绝热表面,

$$\begin{cases} c_i = \frac{1}{1 - F_{i,i}} \\ b_i = 0 \end{cases} \quad (8)$$

④ MATLAB 以其矩阵计算能力而著称,非常适合于上述多元一阶线性方程的求解。只要做好两个相应的系数矩阵,利用一条矩阵除法命令即可得到各项 J_i 的值;

⑤ 对于绝热表面,利用 $J_i = E_{b_i} = \sigma T_i^4$ 的关系式来计算 T_i 。通过编写一个 MATLAB 程序,可以得到绝热区 A3 ~ A7 各圆环带的温度值及整个绝热区温度分布的拟合曲线,如图 2 所示。

表 1 碲锌镉生长炉的内壁表面参数条件与角系数表

表面	$j = 1$	2	3	...	12	13	14
温度 ($^{\circ}\text{C}$)	1065	1065	T_3	...	T_{12}	1130	1130
发射率 ε	0.9	0.9	0.8	...	0.8	0.8	0.8
角系数 $F_{i,j}$							
$i = 1$	0	0.98998	...	...	...	0.0045794	0.0020543
2	0.047792	0.90433	...	...	...	0.0087302	0.00025074
...	...	...	...	...	...	...	...
13	0.00023313	0.0092064	...	...	...	0.89922	0.050348
14	0.0020543	0.0051939	...	...	...	0.98898	0

拟合曲线的方程为

$$T(x) = 3.43x + 882.081$$

由此可以计算出, 与凝固温度 1092°C 对应的绝热区的位置在 $x = 61.2\text{cm}$ 处。考虑到坩埚壁热传导会使温度降低, 可以估计最边缘的熔体降到凝固温度时的位置约在 $x = 62\text{cm}$ 附近, 即当坩埚进入绝热区后不远的位置时开始凝固, 或者认为以此处为分界线, 上面部分为液体, 下面部分为固体。上述计算中, A3 ~ A12 各圆环带的高度取为 1cm 。可以根据需要作进一步细分。

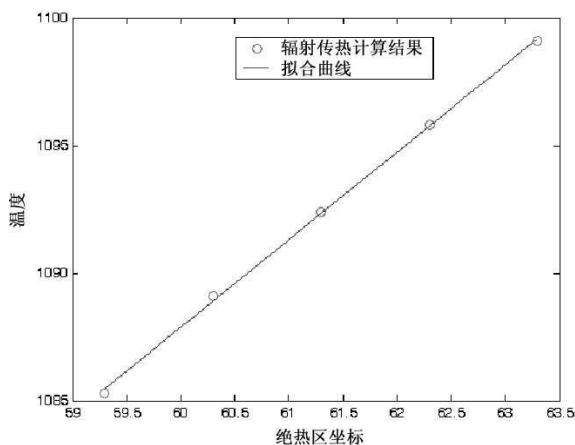


图 2 绝热区的温度值及其拟合曲线

碲锌镉的热导率低。为了保证晶体生长速率, 要求维持一定的温度梯度。温度梯度是由高温区和低温区的温差决定的。高温区的温度过

高, 或者低温区的温度过低, 都不利于高质量碲锌镉晶体的生长。实用中的生长系统对于温度梯度范围有着具体的量值要求。本例计算中得到的温度梯度量值与实际要求是吻合的。

3 结束语

通过对碲锌镉晶体生长炉的温度场进行分析, 主要可解决两个问题, 一是角系数的计算。对于没有解析公式的情况, 相应的多重积分可用蒙特卡罗方法求解; 二是求解一个多变量线性代数方程组。由于计算量大, 人们在分析温度场时, 一般倾向于使用诸如 ANSYS 等大型 CAD 软件, 其原理与上述过程其实并无二致。本文表明, 基于传热学原理, 利用 MATLAB 的矩阵计算功能, 也能比较方便地完成碲锌镉晶体生长炉温度场的一阶仿真分析。

参考文献

- [1] 杨世铭, 陶文铨. 传热学 (第三版) [M]. 北京: 高等教育出版社, 2003.
- [2] J P Holman. Heat Transfer [M]. 北京: 机械工业出版社, 2005.
- [3] 杨贤荣, 马庆芳, 原庚新, 等. 辐射换热角系数手册 [M]. 北京: 国防工业出版社, 1982.
- [4] 白心爱. 辐射换热角系数的计算 [J]. 红外, 2008, 29(8): 30-33.
- [5] E B Magrab, S Azarm, B Balachandran, et al. MATLAB 原理与工程应用 [M]. 北京: 电子工业出版社, 2002.