

ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЕТ РАДИАЦИОННОГО ТЕПЛООБМЕНА ДЛЯ ПРОЦЕССА НАПРАВЛЕННОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ CdZnTe

Л.Б. Берлинер, ведущий научный сотрудник, Л.А. Гвелесиани, аспирант
кафедры Материалы микро-, опто- и наноэлектроники, МИТХТ им. М.В. Ломоносова
e-mail: berliner.leonid@gmail.com, lgveliesiani@yandex.ru

Предложен метод расчета радиационного теплообмена для процесса направленной кристаллизации. Метод основан на численном расчете тепловых потоков от стенок муфеля с заданной температурой к стенкам ампулы с определяемой температурой. Расчет проводили в два этапа: на первом этапе с помощью аналитических формул определяли вид угловых коэффициентов, на втором – рассчитывали тепловые потоки во множестве точек на стенках ампулы и штоке. Расчеты, проведенные для системы CdZnTe по предложенному нами алгоритму, хорошо согласуются с расчетами в интегральной среде разработки COMSOL Multiphysics 3.5.

A method for the computation of radiative heat transfer was suggested. It is based on numeric computation of heat flows from the muffle walls with a specified temperature to the ampoule walls with a temperature that needs to be estimated. The computation was realized in two steps. At the first step the form of view factors was determined with the use of analytic formulas. At the second step the heat flows were computed in the array of points on the ampoule and rod walls. Computations carried out for the CdZnTe system with the use of our algorithm are in good agreement with the computations carried out in the integrated development environment COMSOL Multiphysics 3.5.

Ключевые слова: твердые растворы CdZnTe, вертикальная направленная кристаллизация, угловые коэффициенты, радиационный теплообмен.

Key words: solid solutions CdZnTe, vertical crystal growth, view factors, radiative heat transfer.

Монокристаллы CdZnTe обладают неблагоприятными физико-химическими и тепловыми свойствами, как то: высокое парциальное давление паров кадмия, склонность к двойникованию, низкая теплопроводность и др., поэтому производство монокристаллов с требуемыми характеристиками представляет собой сложную технологическую задачу. Наиболее распространенными методами выращивания монокристаллов CdZnTe являются: традиционный метод Бриджмена, метод Бриджмена высокого давления, метод движущегося теплового поля [1–4]. С точки зрения математического моделирования все эти методы сводятся к моделированию вертикальной направленной кристаллизации (ВНК) в запаянной кварцевой ампуле [1–8]. Математические модели ВНК представляют собой сложные системы уравнений в частных производных, учитывающие подвижную межфазную границу кристалл/расплав, свободную конвекцию в расплаве, диффузию, процессы теплообмена в системе кристалл/расплав–ампула. Важную роль в технологическом процессе ВНК твердых растворов CdZnTe играет процесс радиационного теплообмена между ампулой и нагревателем [2–4], точный расчет которого требует решения сложных интегральных уравнений [4, 5].

Целью данной работы является замена сложной системы интегральных уравнений радиационного теплообмена аналитическим решением и оценка точности и области применимости этого решения. Предлагается алгоритм расчета радиационного теплообмена с использованием угловых коэффициентов для геометрических конфигураций теплообмена, характерных для аппаратного оформления процесса ВНК на примере системы CdZnTe.

Алгоритм расчета радиационного теплообмена

На рис. 1 представлена установка для проведения процесса ВНК и температурный профиль на стенках муфеля, близкие по характеристикам к используемым в ОАО ГНЦ РФ «Государственный научно-исследовательский и проектный институт редкометаллической промышленности «Гиредмет».

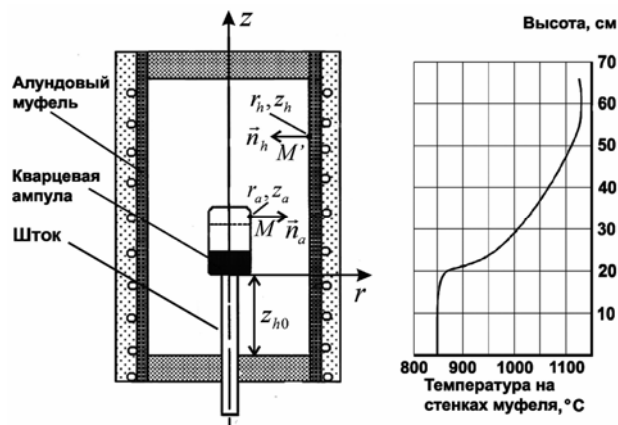


Рис. 1. Установка и температура на стенках муфеля.

Предлагаемый алгоритм расчета радиационного теплообмена состоит из двух этапов: на первом этапе, исходя из расположения поверхностей, участвующих в теплообмене, определяется вид угловых коэффициентов; на втором этапе с использованием формул интерполяции получают выражение для эквивалентной температуры T_{eq} , учитывающей радиационное излучение от стенок муфеля и его торцов в каждую точку поверхности ампулы.

Рассмотрим первый этап. Здесь определяется вид угловых коэффициентов [4, 5], полученных ранее аналитически [4], в зависимости

от расположения поверхностей, участвующих в теплообмене:

$$F_c(M, M') = -\frac{2}{\pi} \left(A\theta_{\max} + \text{Barctg} \left(\sqrt{\frac{a-b}{a+b}} \text{tg} \frac{\theta_{\max}}{2} \right) + C \frac{\sin \theta_{\max}}{a + b \cos \theta_{\max}} \right), A = \frac{b'b''}{b^2},$$

$$B = -2 \frac{a^3 b' b'' - 2ab^2 b' b'' - ab^2 a' a'' + b^3 b' a'' + b^3 a' b''}{b^2 (a^2 - b^2)^{\frac{3}{2}}}, C = \frac{abb' a'' + aba' b'' - a^2 b' b'' - b^2 a' a''}{b(a^2 - b^2)}, \quad (1)$$

где M – точка, лежащая на поверхности ампулы или штока; M' – точка, лежащая на поверхности муфеля; $a, a', a'', b, b', b'', \theta_{\max}$ – параметры, зависящие от расположения поверхностей, участвующих в теплообмене. Значения этих параметров для всех возможных конфигураций расположения поверхностей в заданной геометрии (рис.1) приводятся в таблицах 1 – 4. Используются следующие обозначения: R_a – радиус ампулы; H_a – высота ампулы; R_h – радиус муфеля; H_h – высота муфеля; R_{sh} – радиус штока; z_{h0} – длина штока; r_a, z_a – координаты точки M на поверхности ампулы; r_h, z_h – координаты точки M' на поверхности муфеля; z_{sh} – координата точки M на поверхности штока по оси z , при этом координата по оси r имеет постоянную величину R_{sh} .

Таблица 1. Теплообмен муфеля с боковой стенкой ампулы.

Параметр	Боковая стенка муфеля	Верхняя стенка муфеля	Нижняя стенка муфеля
a'	$-R_a$	$-R_a$	$-R_a$
a''	$-R_h$	$z_a - H_h$	$-z_a$
a	$R_h^2 + R_a^2 + (z_h - z_a)^2$	$r_h^2 + R_a^2 + (H_h - z_a)^2$	$r_h^2 + R_a^2 + z_a^2$
b'	R_h	r_h	r_h
b''	R_a	0	0
b	$-2R_a R_h$	$-2R_a r_h$	$-2R_a r_h$
θ_{\max}	$\arccos \left(\frac{R_a}{R_h} \right)$	$\arctg \left(\frac{\sqrt{R_h^2 - r_h^2}}{r_h} \right)$	$\arctg \left(\frac{\sqrt{R_h^2 - r_h^2}}{r_h} \right)$

Таблица 2. Теплообмен муфеля с верхней стенкой ампулы.

Параметр	Верхняя стенка муфеля	Боковая стенка муфеля
a'	$H_h - (z_{h0} + H_a)$	$z_h - (z_{h0} + H_a)$
a''	$z_{h0} + H_a - H_h$	$-R_h$
a	$r_h^2 + r_a^2 + (H_h - (z_{h0} + H_a))^2$	$R_h^2 + r_a^2 + (z_h - (z_{h0} + H_a))^2$
b'	0	0
b''	0	r_a
b	$-2r_a r_h$	$-2r_a R_h$
θ_{\max}	Pi	Pi

Таблица 3. Теплообмен муфеля с нижней стенкой ампулы.

Параметр	Нижняя стенка муфеля	Боковая стенка муфеля
a'	z_{h0}	$z_{h0} - z_h$
a''	$-z_{h0}$	$-R_h$
a	$r_h^2 + r_a^2 + z_{h0}^2$	$R_h^2 + r_a^2 + (z_h - z_{h0})^2$
b'	0	0
b''	0	r_a
b	$-2r_a r_h$	$-2r_a R_h$
θ_{\max}	Pi	Pi

Таблица 4. Теплообмен муфеля со штоком.

Параметр	Боковая стенка муфеля	Верхняя стенка муфеля	Нижняя стенка муфеля
a'	$-R_{sh}$	$-R_{sh}$	$-R_{sh}$
a''	$-R_h$	$z_{sh} - H_h$	$-z_{sh}$
a	$R_h^2 + R_{sh}^2 + (z_h - z_{sh})^2$	$r_h^2 + R_{sh}^2 + (H_h - z_{sh})^2$	$r_h^2 + R_{sh}^2 + z_{sh}^2$
b'	R_h	r_h	r_h
b''	R_{sh}	0	0
b	$-2R_{sh}R_h$	$-2R_{sh}r_h$	$-2R_{sh}r_h$
θ_{max}	$\arccos\left(\frac{R_{sh}}{R_h}\right)$	$arctg\left(\frac{\sqrt{R_h^2 - r_h^2}}{r_h}\right)$	$arctg\left(\frac{\sqrt{R_h^2 - r_h^2}}{r_h}\right)$

В рамках предлагаемого алгоритма температуру на стенках муфеля считали заданной, а степень черноты муфеля – равной 1. Тогда интегральное уравнение радиационного теплообмена метода «сальдо» [4]:

$$\sigma T^4(M) - \frac{1}{\varepsilon} q(M) = \sigma \int F_c(M, M') T^4(M') r dl - \int F_c(M, M') \frac{1 - \varepsilon(M')}{\varepsilon(M')} q(M') r dl, \quad (2)$$

примет вид:

$$q(M) = \sigma \cdot \varepsilon \cdot (T^4(M) - T_{eq}^4), \quad (3)$$

$$T_{eq} = \sqrt[4]{\int F_c(M, M') T^4(M') r dl}. \quad (4)$$

здесь ε – степень черноты ампулы, $\sigma = 5.6693 \cdot 10^{-12}$ Вт·см⁻²·К⁻⁴ – постоянная Стефана-Больцмана, q – тепловой поток, Вт·см⁻².

На втором этапе выражение (4) рассчитывали в конечном множестве точек на поверхности ампулы и, используя формулы кубической интерполяции, получали непрерывное выражение для T_{eq} в любой точке поверхности.

Таким образом, сложная задача расчета радиационного теплообмена (интегральное уравнение (2)) свелась к упрощенному аналитическому расчету по формулам (3) – (4).

Оценим погрешность предлагаемого алгоритма. Для этого рассмотрим глобальную тепловую задачу, включающую теплопроводность кристалла, расплава, ампулы и радиационный теплообмен между стенками ампулы и муфеля. Расчеты проведем для модельной системы CdZnTe в стационарном приближении без учета движения расплава и теплового эффекта на фронте кристаллизации.

Модельная глобальная тепловая задача

Тепловые процессы в элементах установки и рабочем объеме описываются уравнением теплопроводности:

$$\nabla \cdot (k \nabla T) = 0,$$

где k – теплопроводность, Вт·см⁻¹·К⁻¹, ∇ – оператор Лапласа.

Граничные условия можно записать в следующем виде:

1) на внешних границах ампулы:

$$-(k \nabla T) = q;$$

2) на внутренних границах ампулы–расплав/кристалл задано условие непрерывности:

$$k_a \nabla T = k \nabla T,$$

где k_a – теплопроводность ампулы;

3) вдоль оси $r = 0$ – условие осевой симметрии:

$$k \nabla T = 0.$$

Теплопроводность CdZnTe считали функцией температуры:

$$k = \begin{cases} k_s, & T < T_m \\ k_m, & T > T_m \end{cases},$$

где k_s , k_m – теплопроводность твердой и жидкой фазы CdZnTe, соответственно; а форму фронта кристаллизации определяли по изотерме плавления.

В расчетах использовали геометрические параметры установки (рис. 2), приведенные в табл. 5, а также теплофизические данные для CdZnTe, приведенные в табл. 6.

Таблица 5. Геометрические параметры установки.

Параметр	Значение	Описание
R_a	25 мм	Радиус ампулы
H_a	80 мм	Высота ампулы
d_a	2.5 мм	Толщина стенки ампулы
R_h	52.5 мм	Радиус муфеля
H_h	660 мм	Высота муфеля
R_{sh}	10 мм	Радиус штока
d_{sh}	2.5 мм	Толщина стенки штока

Для оценки погрешности предложенного нами алгоритма использовали интегральную среду разработки (ИСП) Comsol Multiphysics 3.5 [9].

Таблица 6. Теплофизические характеристики [4].

Параметр	Значение	Описание
k_s	$1.5 \cdot 10^{-2} \text{ Вт} \cdot \text{К}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$	Теплопроводность кристалла
k_m	$3 \cdot 10^{-2} \text{ Вт} \cdot \text{К}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$	Теплопроводность расплава
k_a	$2.82 \cdot 10^{-2} \text{ Вт} \cdot \text{К}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$	Теплопроводность ампулы
T_m	1371 K	Температура кристаллизации

На рис. 2 показаны диалоговые окна настроек параметров численного расчета радиационного теплообмена в среде Comsol Multiphysics. В поле «Radiation type» устанавливали режим «Surface-to-surface» (поверхность к поверхности), задавали степень черноты поверхности ϵ и в поле T_{amb} указывали текущую температуру поверхности T. В поле «Azimuthal sectors» указывали число секторов, на которые поворачивается меридиональная плос-

кость осесимметричного сечения (координаты $r-z$), для автоматического вычисления максимальных углов видимости θ_{max} . Чем больше число этих секторов, тем больше времени требуется для решения. При этом оказалось, что расчет в среде Comsol Multiphysics при заданной степени черноты муфеля $\epsilon = 1$ совпадает с точным аналитическим решением по предложенному нами алгоритму.

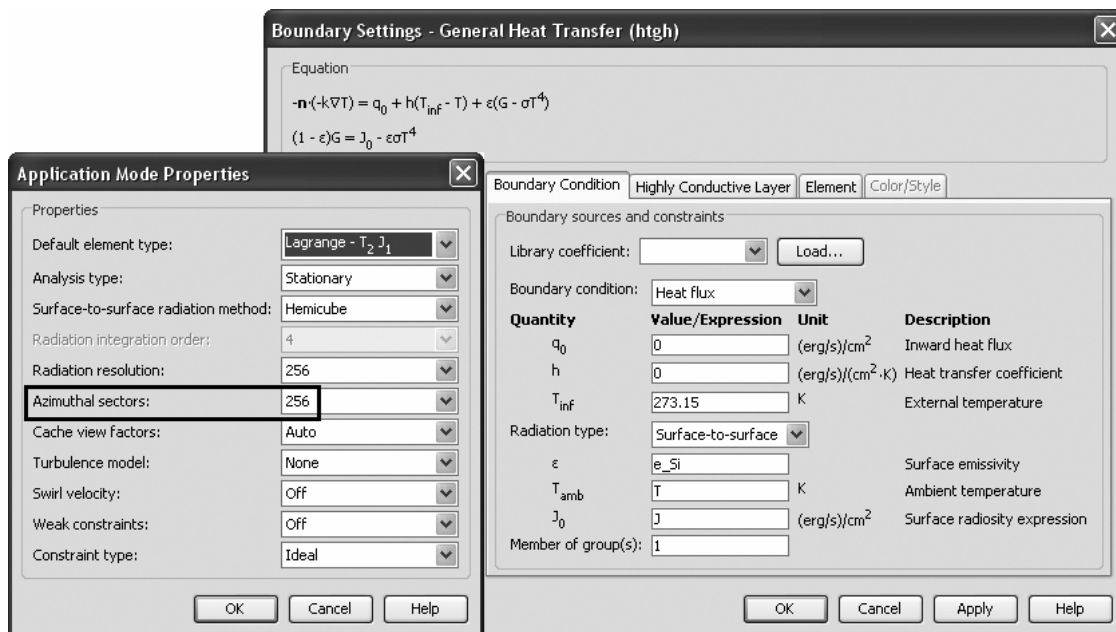


Рис. 2. Диалоговые окна настроек параметров радиационного теплообмена в среде Comsol Multiphysics 3.5.

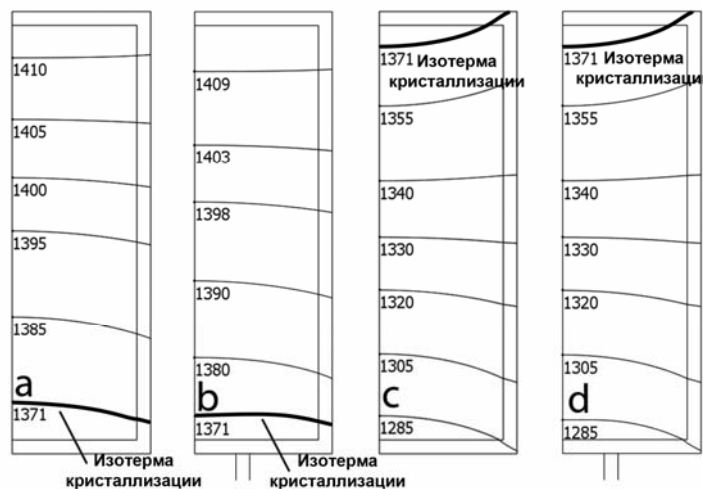


Рис. 3. Распределение температур (K) в ампуле: а) и с) без учета влияния штока; б) и d) с учетом влияния штока.

Результаты расчетов и их обсуждение

В результате решения глобальной тепловой задачи нами получены изотермы кристаллизации, температуры на поверхности ампулы для

начального и конечного этапов процесса ВНК, которые найдены подбором величины z_{h0} – длины штока, с помощью которого осуществляется перемещение ампулы в рабочей области

муфеля. Исследовали влияние штока на форму межфазной поверхности кристалл/расплав при степени черноты муфеля $\varepsilon = 1$. С помощью среды Comsol Multiphysics рассчитывали температуры на поверхности ампулы при различных значениях ε .

На рис. 3 показаны распределения температур внутри ампулы на начальном и конечном этапах процесса ВНК с учетом и без учета штока. Влияние штока проявляется на начальном этапе процесса выращивания, т.к. непосредственно влияет на форму фронта кристаллизации. Здесь шток играет роль теплоотвода, снижающего температуру внутри ампулы, что приводит (как видно из рис. 3) к дополнительному прогибу изотерм внутри ампулы.

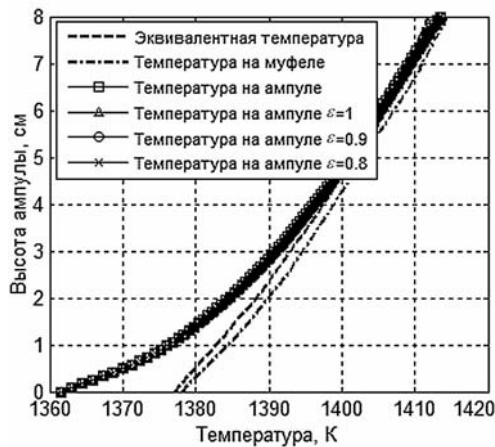


Рис. 4. Распределения температур на боковой стенке ампулы и на муфеле в «горячей» зоне ($z_{h0}=47\text{см}$).

На рис. 4. показаны рассчитанные распределения температур в «горячей» зоне на боковой стенке ампулы при разных ε , температура на муфеле и эквивалентная температура. Разница между температурами на стенке ампулы, рассчитанными аналитически по предлагаемому алгоритму и с помощью среды Comsol Multiphysics при степенях черноты муфеля до значения 0.8, не превышает 0.25 К. Из рисунка видно, что температура на муфеле и эквивалентная температура различны. Следовательно, в этом случае недопустимо применение обычно используемой упрощенной формулы радиационного теплообмена:

$$q(M) = \sigma \cdot \varepsilon \cdot (T^4 - T_{amb}^4), \quad (5)$$

здесь T_{amb} – температура на муфеле в точке M' , противоположной точке M на стенке ампулы (см. рис. 1).

Это связано с тем, что при расчете без использования угловых коэффициентов не учитывается влияние верхнего торца.

На рис. 5. показаны рассчитанные распределения температур в «холодной» зоне.

Разница между температурами на стенке

ампулы, рассчитанными аналитически и численно, не превышает 1 К.

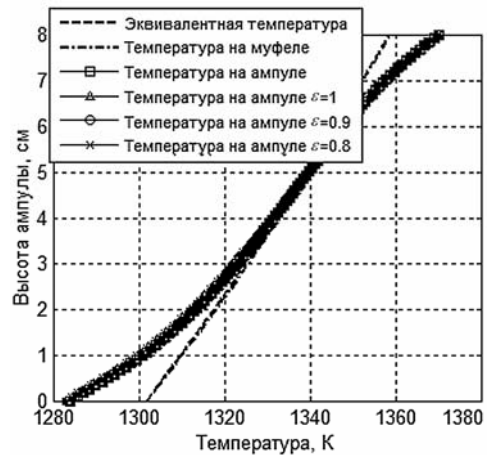


Рис. 5. Распределения температур на боковой стенке ампулы и на муфеле в «холодной» зоне ($z_{h0}=36\text{см}$).

Как видно из рис. 5, температура на муфеле и эквивалентная температура практически совпадают и потому в данном случае возможно применение упрощенной формулы радиационного теплообмена, вероятно, вследствие того, что ампула находится в «холодной» зоне на достаточном удалении от верхнего торца и его влияние незначительно.

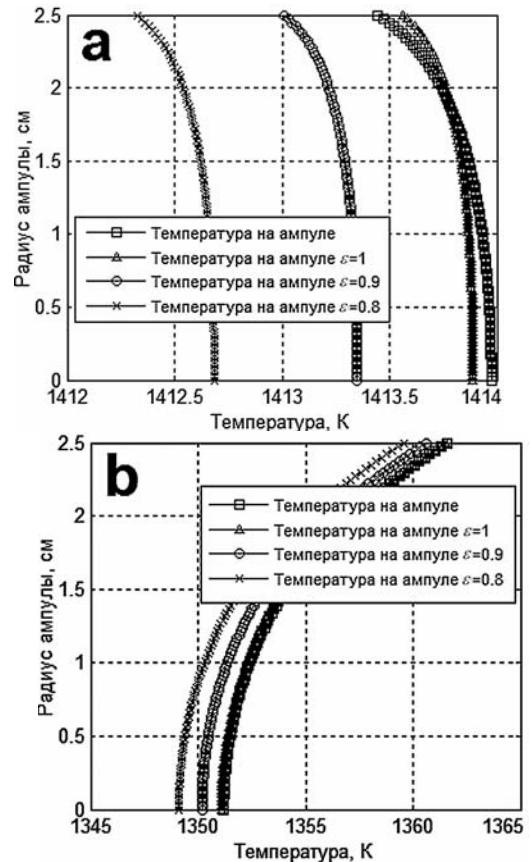


Рис. 6. Распределения температур в «горячей» зоне: а) на верхней стенке ампулы; б) на нижней стенке ампулы.

На рис. 6 показаны рассчитанные распределения температур в «горячей» зоне на верх-

ней и нижней стенках ампулы при разных ε .

Разница между температурами на стенке ампулы, рассчитанными аналитически и численно, не превышает 1.3 К в случае верхней стенки и 2 К – в случае нижней. Эквивалентная температура для верхней стенки ампулы (рис. 6а) превышает на ~3 К температуру на верхнем торце муфеля, которую задавали постоянной и равной 1417 К, по-видимому, за счет влияния более высокой температуры на боковой стенке муфеля (см. рис. 1). Эквивалентная температура

для нижней стенки ампулы (рис. 6б) существенно выше температуры на нижнем торце муфеля, равной 1073 К, поскольку расстояние от нижнего торца муфеля до ампулы равно $z_{h0}=47$ см и велико влияние более нагретой боковой стенки муфеля.

Аналогичные результаты получены для температур на торцах ампулы в «холодной» зоне (рис. 7). При этом погрешность при изменении ε в пределах $[0.8; 1]$ на верхнем торце не превышает 0.1 К и 1.25 К – на нижнем.

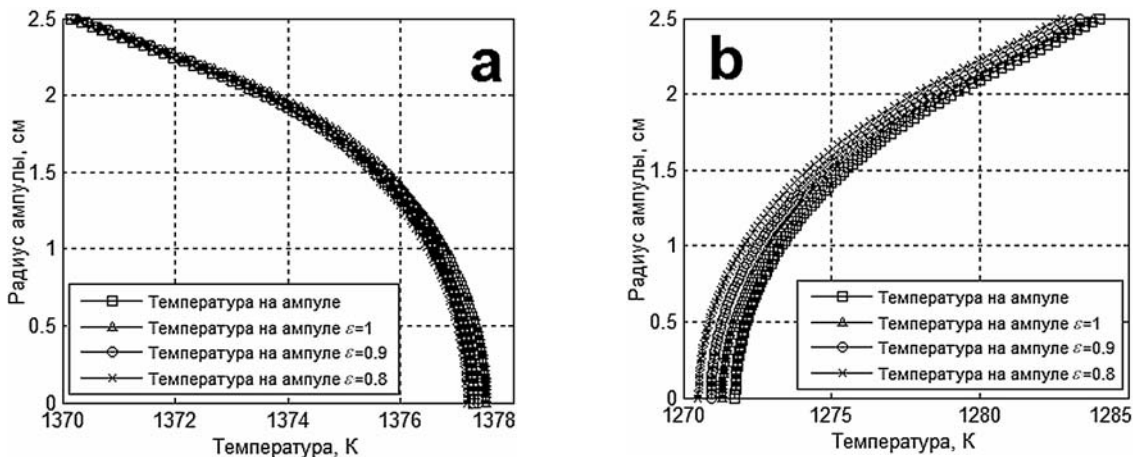


Рис. 7. Распределения температур в «холодной» зоне: а) на верхней стенке ампулы; б) на нижней стенке ампулы.

Заключение

Предлагаемый нами алгоритм расчета радиационного теплообмена в процессе ВНК учитывает влияние угловых коэффициентов, обладает достаточной вычислительной простотой – вместо решения сложного интегрального уравнения радиационного теплообмена (2) расчет осуществляется по формулам (3) и (4) и дает незначительную погрешность в интервале $\varepsilon \in [0.8; 1]$ в сравне-

нии с расчетами в среде Comsol Multiphysics 3.5, решающей численно интегральное уравнение (2). Экономия вычислительных ресурсов и машинного времени позволит моделировать процесс ВНК во всей его сложности, учитывая движение расплава, движение межфазной границы кристалл/расплав, диффузионные процессы распределения примесей и реальный теплообмен с учетом конкретных технологических особенностей установки.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Датчики ионизирующего излучения на основе кристаллов CdTe и $Cd_{1-x}Zn_xTe$ / А. Д. Скачкова [и др.] // XXIX Сажинские чтения. – 2010. – С. 11–22.
2. Numeric simulation of vertical Bridgman growth of $Cd_{1-x}Zn_xTe$ melts / V. M. Lakeenkov, V. B. Ufimtsev, N. I. Shmatov, Y. F. Schelkin // J. of Crystal Growth. – 1999. – Vol. 197. – P. 443–448.
3. Interface shape control using localized heating during Bridgman growth / M. P. Volz [et al.] // J. of Crystal Growth. – 2009. – Vol. 311, № 8. – P. 2321–2326.
4. Гвелесиани, Л. А. Модель процесса вертикальной направленной кристаллизации монокристаллов $Cd_{1-x}Zn_xTe$ / Л. А. Гвелесиани // Вестник МИТХТ. – 2010. – Т. 5, № 2. – С. 18–22.
5. Мешков, Е. И. Алгоритмы расчета и формирования матриц геометрических и обобщенных угловых коэффициентов излучения для рабочего пространства вращающейся печи / Е. И. Мешков, Т. Е. Герасименко, М. А. Ковалева // Изв. ВУЗов. Цветная металлургия. – 2009. – № 5. – С. 55–60.
6. Оценка динамики температурного поля в рабочем объеме вертикальной установки Бриджмена при продольно-осевом перемещении ростового контейнера в процессе выращивания кристаллов / М. М. Филиппов [и др.] // Известия Томского политехнического университета. – 2009. – Т. 315, № 2. – С. 104–109.
7. Алгоритм оценки мощностей нагревательных элементов в многозонной установке для выращивания кристаллов по Бриджмену / М. М. Филиппов [и др.] // Известия Томского политехнического университета. – 2009. – Т. 315, № 2. – С. 110–112.
8. Cerny, R. Computational modeling of CdZnTe crystal growth from the melt / R. Cerny, A. Kalbac, P. Prikryl // Computational Materials Science. – 2000. – Vol. 17. – P.34–60.
9. Официальный сайт COMSOL Multiphysics [Электронный ресурс]. – режим доступа : <http://www.comsol.com/products/multiphysics/>. – 20.04.2010.