УДК 004.94:66.011:548.55

численное Моделирование теплового узла установки для выращивания монокристаллов теллурида кадмия методом VGF с введением аксиальных низкочастотных вибраций

*Костиков Владимир Анатольевич, н.с.1,* [*kostikov.v.a@muctr.ru*](mailto:kostikov.v.a@muctr.ru)

*Довнарович Алексей Денисович, м.н.с.1,* [*aleksejko6@gmail.com*](mailto:aleksejko6@gmail.com)

*Нефедов Олег Александрович, инженер1,* [*oa.nefedov@lassard.ru*](mailto:oa.nefedov@lassard.ru)

*Аветисов Игорь Христофорович, д.х.н., проф.1,* [*avetisov.i.k@muctr.ru*](mailto:avetisov.i.k@muctr.ru)

*1РХТУ им. Д.И. Менделеева, г. Москва.*

Аннотация: В работе выполнено численное моделирование тепловых полей в разрабатываемой высокотемпературной установке для выращивания монокристаллов теллурида кадмия диаметром 100 мм из расплава методом VGF (Vertical Gradient Freeze). Конструкция включает в себя механизм введения аксиальных низкочастотных вибраций в расплав для выравнивания фронта кристаллизации с помощью погруженного инертного тела специальной формы.

Ключевые слова: CdTe, кадмий, теллур, кристалл, расплав, VGF, вибрация, моделирование, CFD, конвекция, излучение.

Введение

На сегодняшний день теллурид кадмия и его твердые растворы CdxZn1-xTe являются лучшими материалами для создания детекторов рентгеновского и гамма-излучения комнатной температуры [1]. Качество таких детекторов напрямую зависит от структурного совершенства и химической чистоты выращиваемого монокристалла. Метод VGF обеспечивает малый температурный градиент, что позволяет снизить концентрацию нестехиометрических дефектов, которые образуются при высокотемпературном полиморфном переходе [2]. Однако при выращивании монокристалла диаметром 100 мм методом VGF будет образовываться вогнутый в кристалл фронт кристаллизации за счет выделения теплоты кристаллизации и низкой теплопроводности растущего кристалла CdTe, что ведет к образованию сильных термических напряжений и увеличивает плотности дислокаций. Перспективным решением поставленной задачи является введение аксиальных низкочастотных вибраций с помощью инертного тела [3] для создания контролируемого течения в расплаве, которое позволяет выровнять тепловое поле и обеспечить плоский фронт кристаллизации. Также показано [4], что введение вибраций приводит к разбиению ассоциатов в расплаве, что приближает процесс роста монокристалла из расплава к росту кристаллов из паровой фазы.

Конструкция ростовой установки

Процесс выращивания монокристаллов CdTe производится в герметичной цилиндрической камере диаметром 70 см и высотой 100 см с водоохлаждаемыми стенками. Процесс роста осуществляется в атмосфере аргона (PAr= 5 атм). Тепловой узел установки спроектирован из графитовых материалов. Тигель с расплавом находится в температурном градиенте между верхним и нижним нагревателями. Для выравнивания теплового поля и компенсации потерь через теплоизоляцию в радиальном направлении используется боковой нагреватель с распределительным экраном. В процессе роста монокристалла мощность нагревателей регулируется для обеспечения плавного уменьшения температуры и обеспечения постепенного роста кристалла вверх из затравочного кристалла в носике тигля. Вибрационное воздействие производится с помощью погруженного в расплав тела из графита. В центральной части тела имеется отверстие, необходимое для создания течения необходимой конфигурации и удаления газовых пузырей. Скругление торцевых кромок тела играет определяющую роль в генерации вибрационных потоков и четко контролируется при изготовлении. Ножка тела пропускается через отверстие в крышке тигля и закрепляется на металлическом штоке, с помощью которого подводятся вибрации. Конструкция также предусматривает полное извлечение тела из расплава.

Моделирование теплового узла

Расчёт тепловых полей в установке осуществлялся с использованием пакета вычислительной гидродинамики ANSYS Fluent. Так как кристаллизация CdTe происходит при высокой температуре – 1092 °C, – то обязательным условием является учёт теплового излучения в установке, произведенный с помощью модели Discrete Ordinates. Был получен практически линейный температурный градиент 1 К/см в области с тиглем, достаточный для обеспечения плавного полиморфного перехода. Был проведен расчет введения вибраций с моделированием фронта кристаллизации при помощи Enthalpy-porosity – модели. Производился подбор геометрии тела, его положения в тигле, а также оптимальные частоты и амплитуды колебаний для обеспечения плоского фронта кристаллизации в процессе роста CdTe.

Выводы

Разработана установка для выращивания монокристаллов CdTe методом VGF и проведен ее тепловой расчет. Установлены необходимые мощности нагревателей, обеспечивающие градиент температуры в 1 К/см. Определена оптимальная форма и положение тела в тигле, а также оптимальные частота и амплитуда колебаний. Проведен расчет введения аксиальных вибраций в расплав.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках научного проекта лаборатории «Лаборатория технологий веществ электронной чистоты», проект № FSSM2022-0005

Список использованных источников

1. Prokesch, M.; Soldner, S.A.; Sundaram, A.G. CdZnTe Detectors for Gamma Spectroscopy and X-Ray Photon Counting at 250 × 106 Photons/(mm2 s). J. Appl. Phys. 2018, 124, 044503.
2. Roy, U.N.; Burger, A.; James, R.B. Growth of CdZnTe Crystals by the Traveling Heater Method. J. Cryst. Growth 2013, 379, 57–62.
3. Nefedov, O.; Dovnarovich, A.; Kostikov, V.; Mozhevitina, E.; Bocharnikov, D.; Avetissov, I. Numerical Simulation of CdTe Crystal Growth Using the Vertical Gradient Freeze Technique Assisted by Axial Low-Frequency Oscillations of the Melt. Crystals 2024, 14, 72.
4. Avetissov, I.; Kostikov, V.; Meshkov, V.; Sukhanova, E.; Grishechkin, M.; Belov, S.; Sadovskiy, a. Modeling of Axial Vibrational Control Technique for CdTe VGF Crystal Growth under Controlled Cadmium Partial Pressure. J. Cryst. Growth 2014, 385, 88–94.

NUMERICAL SIMULATION OF THE THERMAL UNIT OF AN INSTALLATION FOR CADMIUM TELLURIDE SINGLE CRYSTALS GROWTH BY VGF METHOD WITH THE INTRODUCTION OF AXIAL LOW-FREQUENCY VIBRATIONS

V.A.Kostikov, A.D.Dovnarovich, I.Ch.Avetisov

Abstract: The work performs numerical modeling of thermal fields in a high-temperature installation being developed for growing cadmium telluride single crystals with a diameter of 100 mm from a melt using the VGF (Vertical Gradient Freeze) method. The design includes a mechanism for introducing axial low-frequency vibrations into the melt to level the crystallization front using a specially shaped immersed inert disk.

Key words: CdTe, cadmium, tellurium, crystal, melt, VGF, vibration, modeling, CFD, convection, radiation.