

2aB12

VGF 法を用いた CdZnTe 結晶成長に関する数値解析

Numerical Simulation of Crystal Growth of CdZnTe by the VGF method

静大・工 岡野泰則・川口幸真・近藤宏樹
 Department of Materials Science & Chemical Engineering, Shizuoka University,
 Yasunori Okano, Yukimasa Kawaguchi, Hiroki Kondo

The growth of CdZnTe crystals by the Vertical Gradient Freezing method was simulated numerically in order to optimize the growth process for high quality crystals. In the simulation, the solid/liquid interface position was determined by the heat and mass balance equations along with the phase diagram. It was found that the zinc segregation in the crystal could be controlled by the convection control due to the steady crucible rotation and ACRT.

【Introduction】 $Cd_{1-x}Zn_xTe$ は $x=0.1$ の時、極めて放射線阻止能が向上し、かつ高抵抗化することより、半導体放射線検出器用材料としての期待が高まっている。CdZnTe の作製には、垂直温度勾配凝固(VGF)法や垂直ブリッジマン(VB)法などが用いられるが、多結晶化及び、転移、双晶が発生しやすいのに加え、Zn の偏析によるマクロな濃度不均一が生じるなど、高品質な結晶を作製するのは非常に困難である。そこで本研究ではより均質な結晶が得られる条件を探索するため、垂直温度勾配凝固(VGF)法を模擬した数値解析を行い、結晶内 Zn 濃度分布に及ぼす定常るつぼ回転及び非定常るつぼ回転(ACRT)の影響について検討した。

【Numerical method】 二次元軸対象を仮定したエネルギー方程式、渦度・流関数表示の Navier-Stokes 式及び拡散方程式を境界固定法により座標変換を施し、これらの式を有限差分法により離散化し、SOR 法を用いて解析を行った。固液界面位置及び形状の決定には、 $Te=0.5$ に固定した擬似二元固液相図[2]を用い濃度と温度のバランス式を連立して決定した。尚、るつぼ上部は黒体(1373K)として輻射を考慮し、るつぼ側面の縦方向温度勾配は 1.45K/mm、温度降下速度は 0.6K/hr[1]とした。ZnTe の偏析係数は擬似二元固液相図より 1.75 とした。物性値は融液及び結晶部分には $Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te$ [3]、るつぼには SiO_2 の値を用いた[4]。

【Results and Discussion】 Fig.1 に回転無し(a)、るつぼに 3rpm の定常回転を加えた時(b)、非定常るつぼ回転 ACRT を加えた時(c)の結晶成長 1000 分後における解析結果を示す。(a)と(b)の比較から、定常るつぼ回転を加えることにより自然対流が抑制されることが分かる。一方(a)と(c)の比較から、ACRT により融液内の対流が強まることが分かる。またるつぼ回転は固体内濃度分布に多大な影響を及ぼすことが示された。Fig.2 に 1000 分後の中心軸上の結晶内濃度分布を示す。この図より、定常るつぼ回転及び ACRT を加えると軸方向の固体内濃度分布が改善され、より多くの部分で望まれる Zn 濃度 0.1 が得られることが分かる。これは定常るつぼ回転及び ACRT を加えることにより対流のモードが変化し、それに伴い融液内の Zn 濃度輸送機構の変化が起こり、固液界面への Zn 濃度の供給量が増えたためと考えられる。またこの時の固液界面形状を Fig.3 に示す。るつぼ回転の有無により固液界面形状が変化することが示された。

【Reference】

- [1] Y. Okano et al., "Experimental and Numerical Study of the VGF Growth of CdTe Crystal", J. Crystal Growth, in press.
- [2] J. Steininger et al., J. Electrochem. Soc. 117 (1970) 1305-1309.
- [3] A. Yeckel, F.P. Doty and J.J. Derby, J. Crystal Growth, 203 (1999) 87.
- [4] C. Martinez-Tomas, V. Munoz, J. Crvstal Growth, 222 (2001) 435.

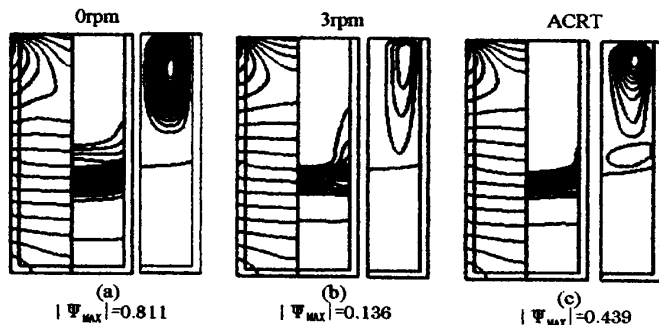


Fig.1 Effect of crucible rotation on temperature (left half in left column) and concentration (right half in left column) distributions, and stream function (melt zone in right column) at $t=1000$ min. (a) no rotation, (b) 3rpm, (c) ACRT. $\Delta T=5$ [K], $\Delta C_i=0.0005$, $\Delta C_s=0.002$, $\Delta \Psi=0.05$.

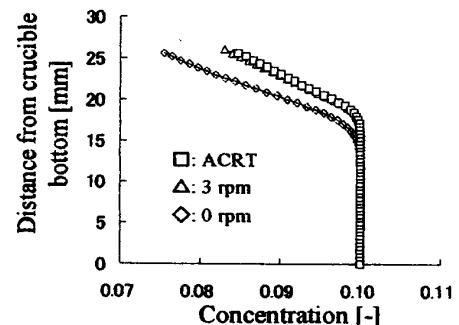


Fig.2 Axial concentration distributions of ZnTe in the crystal along the center axis at $t=1000$ min.

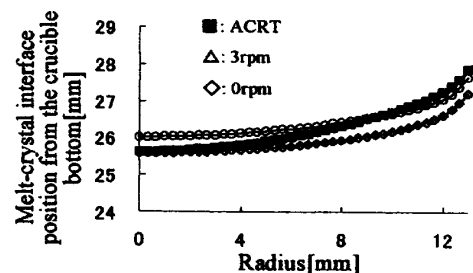


Fig.3 Effect of crucible rotation on interface shape at $t=1000$ min.