MOCVD 反应器中流场和热场的数值研究

钟树泉, 任晓敏, 黄永清, 王琦, 黄辉

北京邮电大学光通信与光波导教育部重点实验室, 北京 100876

E-mail: shuqzhong@gmail.com

2009-03-02 收稿, 2009-08-11 接受

国家重点基础研究发展计划(编号: 2003CB314901)、教育部长江学者和创新团队发展计划(编号: IRT0609)、国家高技术研究发展计划(编号: 2006AA03Z416, 2007AA03Z418)、国家自然科学基金(批准号: 10875018, 10773002, 60576018)、国家自然科学基金重点项目(批准号: 90601002)和高等学校学科创新引智计划(编号: B07005)资助

摘要 利用二维动力学模型, 通过变化 MOCVD (metal organic chemical vapor deposition) 反应器的进气流量、操作压力、衬底温度、基座旋转等几个重要工艺控制参数, 计算了反应器内部均匀的流场和热场分布的形态变化, 描述了输运过程中产生的多种流动现象, 并给出了相应的分析与说明. 在此基础上, 通过微扰反应器的进气量, 计算并图形化了质量输运过程的瞬态行为, 分析了延迟时间、驰豫振荡、自脉动振荡等瞬态现象产生的原因, 为高品质外延生长工艺的设计与实施, 提供了有益的解决途径.

关键词

晶体外延生长
MOCVD 反应器
输运过程
热流场

MOCVD 是由美国的 Manasevit 等人^[1]于 1968 年首先提出的批量制备化合物半导体材料的技术. 目前, 该设备所生产的微电子、光电子材料和器件, 已成为提高国防武器与指挥系统性能的关键技术, 且成为高速光通信、3G 移动通信、宽带卫星通信、高效太阳能电池、宇宙深层空间探测技术之基石^[2~6].

在 MOCVD 反应器中外延异质结构的材料时, 用来生长晶体的各组份和掺杂剂, 都是以气态方式进入反应器的; 该系统通过周期性地切换各种反应气体控制其流入量, 在衬底上外延出特定组份、特定厚度、特定导电类型、特定电学和光学性能的晶体材料. 然而, 周期性地切换控制前驱物进入反应器, 到衬底上方的反应物形成稳定的流动状态, 存在着许多瞬态过程. 特别是基于量子点、量子线、量子阱超晶格等纳米材料的制备时, 其外延生长过程更为复杂, 瞬态现象更是随处可见.

自 1980 以来, 国内外科技人员利用水力学实验、光学测量^[7~9]和数值计算^[10~20]等方法, 对 MOCVD 反

应器内部极端复杂的质量输运过程进行了大量的研究, 取得了许多有价值的成果, 并且在 1990 年左右, 形成研究的第一个高潮. 随后, 其研究工作呈现持续增长的态势; 近几年来, 这一课题发表的研究成果颇多, 并形成该领域研究的第二个高潮. 但是, 以上研究内容还主要集中于稳态方面, 侧重于新材料的创新、新结构的开发以及新型器件的制备. 对于有价值的瞬态特性的研究, 在国际上还鲜见报道; 而瞬态行为是客观存在的现象, 它对化合物半导体材料纳米级多层结构的外延生长, 是不容忽视的要素.

本文以英国 THOMAS SWAN 公司 3×2" CCS LP-MOCVD 设备为研究对象, 首先从 MOCVD 反应器的稳态研究出发, 大范围变化工艺参数, 考察其流体力学特征, 并提取设备工艺参数进行优化计算, 得出了反应器中热流场稳态分布变化的规律. 基于以上计算与分析, 通过微扰反应器的进气量, 进一步考察反应器内气体流动的瞬态行为, 计算得到了一些有价值的新成果, 从宏观上较全面地把握了反应器

引用格式: 钟树泉, 任晓敏, 黄永清, 等. MOCVD 反应器中流场和热场的数值研究. 科学通报, 2009, 54: 3270~3277

Zhong S Q, Ren X M, Huang Y Q, et al. Numerical studies on flow and thermal fields in MOCVD reactor. Chinese Sci Bull, 2009, 54, doi: 10.1007/s11434-009-0590-8

<https://engine.scichina.com/doi/10.1360/csb2009-54-21-3270>

内部流体力学的输运特征.

1 数学物理模型及计算条件

1.1 MOCVD 反应器几何结构

如图 1 所示, MOCVD 反应器为圆柱腔结构, 几何尺寸为基座半径 $R=70\text{ mm}$, 顶部 Showerhead 与基座的距离(反应器的高度) $h=10\text{ mm}$, 腔体高度 $H=300\text{ mm}$, 尾气流道的宽度 $D=12\text{ mm}$. Showerhead 为气体分布器, 它是开有很多小孔的一块平板, 每平方英寸约有 100 个小孔, 其大小和基座相当, 以确保气孔完全覆盖整个基座; 另外, Showerhead 可被冷却水控温在 $50\sim 60^\circ\text{C}$. Showerhead 采用如此复杂结构之目的, 是为了防止 III、V 族源的预混反应. 基座是由石墨材料制成, 衬底可放置在基座上的凹槽中; 基座具有加热功能, 可使衬底升温至 1250 K ; 在材料生长的时候, 基座连同其上的衬底是旋转的, 转速为 $0\sim 800\text{ r/min}$. 反应器的内外侧壁皆为石英材料, 外侧壁用冷却水制冷, 以保证其温度接近室温.

图 1 垂直式 MOCVD 反应器简图

1.2 数学物理模型

MOCVD 反应器的载气一般为 H_2 , 它携带 III 族 MO 源和 V 族源从 Showerhead 的小孔, 均匀喷入反应器; 混合气体流经被适当加热的衬底后, 发生化学反应并产生单体分子; 这些单体分子将会碰撞、凝聚、结晶、生长而成为分子团粒子, 最终在衬底表面上形成异质结构薄层材料. 流体中未沉积在衬底的分子团, 将随反应物、副产物及载气, 经过侧壁尾气流道离开反应器, 经尾气处理系统后排放.

由于半导体材料的外延生长工艺, 通常发生在 $700\sim 1200\text{ K}$, $6.66\sim 101.3\text{ kPa}$ 条件下, 反应器内部气体流动速度很低, 可以认为是不可压、连续、理想流

体; 其流体力学特征满足质量、动量、能量和组分守恒等方程, 可由一组微分方程表示为:

$$\text{质量守恒方程: } \frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (1)$$

$$\text{动量守恒方程: } \rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{f}, \quad (2)$$

$$\text{能量守恒方程: } \rho \frac{dE}{dt} = -p \nabla \cdot \mathbf{u} - \nabla \cdot \mathbf{q} + \boldsymbol{\tau} \otimes \nabla \mathbf{u} + Q, \quad (3)$$

$$\text{组分守恒方程: } \frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_i) = -\nabla \cdot \mathbf{J}_i + S_i, \quad (4)$$

$$\text{理想气体状态方程: } p = \rho RT / M_\mu, \quad (5)$$

$$\text{理想气体内能公式: } dE = C_v dT, \quad (6)$$

$$\text{傅里叶热传导公式: } \mathbf{q} = -K \nabla T, \quad (7)$$

式中 ρ 为流体密度, $\mathbf{u}$ 为流体流速矢量, t 为时间; $\mathbf{f}$ 为单位质量力, p 是流体压力, $\boldsymbol{\tau}$ 是切应力张量; E 为单位质量流体所具内能; Q 为单位体积流体热量的增量, $\mathbf{q}$ 为热通量向量, $\otimes$ 表示两个并矢张量的缩并; 第 i 种物质的质量分数 Y_i , 扩散通量矢量 $\mathbf{J}_i$, 化学反应在单位体积内产生的质量速率 S_i ; T 为绝对温度, R 为气体常数, M_μ 为载气的分子量; C_v 为定容比热容; K 为热导率.

1.3 数值计算方法与计算条件

MOCVD 反应器内部气体的流动, 不仅存在由重力、密度差、压差引起的自然对流, 以及基座旋转引起的强制对流; 而且还存在温度梯度引起的动量、热量、质量传递等现象. 因此, 在不影响主要结论的前提下, 我们作如下假设:

(i) 鉴于半导体材料的生长, 是在质量输运控制下的连续稳态过程, 故稳态计算时可忽略时间项.

(ii) III-V 族源占载气的比例不足 1%, 可忽略其化学反应所产生的影响; 混合气体的物化性质由 H_2 决定. 由于 H_2 对于热辐射是透明的, 可忽略其热辐射效应.

(iii) 由于反应器是轴对称几何结构, 边界条件也是轴对称的, 数学模型可简化为二维轴对称模型.

(iv) 流体与反应器内所有壁面的作用, 均采用无滑移边界条件.

(v) 基座和衬底的温度可视作均匀等温, 其余各壁面的温度也可认为满足等温或绝热条件.

以生长 InP 外延层为例: 载气为 H_2 , V 族源为磷烷(PH_3), III 族源为三甲基铟(TMIn), TMIn 摩尔浓度为 3×10^{-4} , V/III 的摩尔比为 70. 为了更有效地研究反应器内热流场的变化规律, 我们选择一组基准工艺条件: $h=10$ mm, $Q=10$ L/min, $P=13.3$ kPa, $\omega=0$ r/min, 气体进口为常压 300 K, Showerhead 的温度为 350 K, 基座表面温度 $t=923$ K, 内侧壁温度为绝热, 外侧壁温度为绝热, $g=9.81$ m/s², 腔体的计算高度取 $H'=30$ mm. 在求解微分方程组时, 利用了 Patankar 及 Spalding 于 1972 年所提出的 SIMPLE (semi-implicit pressure linked equation) 算法, 它属于压力修正法, 主要用于求解不可压流体. 在数值计算中, 采用有限体积方法 FVM (finite volume method), 对单一控制体积内的物理量进行区域离散化处理. 为了适应复杂的几何边界条件, 对反应器模型不同区域进行适当的非结构网格划分设计, 再结合各边界条件进行计算, 并定义残差值为 10^{-3} 作为收敛判据. 由于流场和温度场具有轴对称性, 所以只需给出半个区域的计算结果.

2 MOCVD 反应器热流场的计算与分析

MOCVD 外延生长技术考虑的重要问题为: 较高的晶体生长速率, 均匀的组分、掺杂与厚度, 陡峭的异质界面分布, 同时各类源材料有较高的利用率. 为了实现这些目标, 需要十分清晰地了解 MOCVD 反应器内部的反应物的流动状态, 以利于在衬底附近

形成均匀的温度场和流场, 这需要很好地控制沉积表面的反应物的输运状态.

2.1 进口气体流量对热流场分布的影响

在研究 MOCVD 反应器内部流场时, 采用欧拉法的流线图, 可直观地描述其连续流体的运动形态. 如图 2(a)所示流场, 气体从垂直向下转为水平径向流动后, 流场结构较复杂, 在反应器衬底上方空间和壁面弯折处形成了几个对流涡旋. 对流涡旋的存在, 使得衬底附近的反应剂分子得不到有效的更新, 由此产生的“记忆效应”造成材料生长的不均匀现象, 即对沉积质量产生不良的影响. 而在图 2(b)和(c)中, 反应器内流场中的对流涡旋较少, 主流道中对流涡旋基本消失, 在几何中心部位的较弱涡旋及在拐角弯折处的涡旋, 对外延质量影响不大, 这样的流动条件, 较有利于晶体外延生长的均匀性. 从图 2(b)和(c)分析, 随着进气流量的增加, 当 Q 大于 10 L/min 时, 主流道中流体流动比较平稳.

由于温度对于化学反应极为重要, 所以生长大面积厚度均匀的高质量晶体材料, 依赖于合理的温度场分布状态. 如图 3(a),(b)和(c)温度场(以等温线表示, 单位: K)所示, 随着进气流量的增加, 808.4 K 的等温线由隆起逐渐转为平直, 其温度场的分布更趋均匀合理, 这将提高半导体材料生长的均匀性. 这表明适当增加进气量对主流道的温度场分布有明显的改善.

从图 2,3 所示的流场与温度场分析发现, MOCVD 合理的进气流量可以非常有效地控制温度场的分布, 并有效地抑制对流涡旋的发生.

图 2 进气流量对流场结构的影响
(a) $Q=8$ L/min; (b) $Q=10$ L/min; (c) $Q=15$ L/min

图 3 进气流量对温度场分布的影响
(a) $Q=8$ L/min; (b) $Q=10$ L/min; (c) $Q=15$ L/min

2.2 操作压力对热流场分布的影响

图 4(a), (b)和(c)是在其他条件不变时, 操作压力分别为 101.3, 13.3 和 6.66 kPa 时流场分布变化图. 可以发现随着压力的逐渐减小, 使得对流涡旋的强度也逐渐减少, 直到使它们最后基本消失. 图 4(a)表示在常压下的流场分布, 反应器内部流场复杂, 存在许多涡旋并被限制在主流道处, 这将导致沿着气流方向组分浓度剧烈的变化, 使沉积厚度变得不均匀, 这就是绝大多数 MOCVD 反应器采取低压操作的主要原因.

在流量固定的条件下, 减小反应器内的压力, 使得扩散系数增加, 从而导致传质系数也增大, 这有利于反应剂分子在系统内部快速弥散, 从而减小了涡旋再循环的强度, 有利于外延大面积厚度均匀的材料. 但是在实际生长中, 并非压力越低越好, 在压力太低的情况下, 系统中气体流速过大, 大部分反应剂由泵排出, 原材料的消耗量也增加.

当其他条件不变时, 计算了 3 种操作压力的热场情况, 发现反应器内的温度场分布的变化极小, 3 种形态都与图 3(b)的区别甚微, 所以其计算图形在此没有列出. 这表明在特定的设备结构尺寸和一定的工艺条件下, 操作压力的改变对温度场分布的影响不显著.

2.3 衬底温度对热流场分布的影响

图 5(a), (b)和(c)是在其他基准条件不变时, 衬底温度 T_s 的变化对流体温度场的影响. 从 700 K 等温

线的变化, 可以看到其由平直逐渐变化为隆起直至陡直, 这表明随着基座温度的不断增高, 反应器内衬底与 Showerhead 之间的温度梯度越来越陡峭, 热浮力现象逐渐加剧.

在 MOCVD 反应器中, 对于特定的半导体材料生长而言, 沉积温度主要与所需的沉积材料有关. 从经济上考虑, 需要一个相对高的生长速率, 所设定的沉积温度要尽量高些; 然而, 较高的生长温度很容易在外延层中引起材料的晶格缺陷. 所以, 在保证适宜的反应温度下, 尽可能降低材料生长温度, 并将它限定在一个较窄的范围内, 以获取高质量的外延材料.

当其他条件不变时, 计算了 3 种衬底温度对流场分布的影响, 发现反应器内的流场分布的变化极小, 3 种形态都与图 2(b)的区别甚微, 所以其计算图形在此没有列出. 这表明在特定的设备结构尺寸和一定的工艺条件下, 衬底温度的改变对流场的影响也不显著.

2.4 转速对热流场分布的影响

MOCVD 反应器内部气体的流动, 不仅存在由重力、密度差、压差引起的自然对流, 而且还存在基座旋转引起的强制对流现象.

当其他条件不变时, 图 6 给出了基座转速为 80, 100, 120 r/min 时流场分布图. 同图 2(b)的流场分布相比, 以下各图的流型有明显的改善, 在旋转的衬底附近流线比较平直. 当转速在 120 r/min 时, 在流

图 4 不同操作压力对流场结构的影响

(a) $P=101.3$ kPa; (b) $P=13.3$ kPa; (c) $P=6.66$ kPa

图 5 不同衬底温度对温度场分布的影响

(a) $T_s=700$ K; (b) $T_s=950$ K; (c) $T_s=1200$ K

图 6 石墨舟转速对流场结构的影响

(a) $\omega=80$ r/min; (b) $\omega=100$ r/min; (c) $\omega=120$ r/min

道弯折处的旋涡增强变大,并发展至基座边缘,这种流型对薄膜生长的均匀性将造成负面影响.图6可以看出,增大基座转速,具有“轴向抽吸”作用,即能够沿轴向向下强制拉动流动的气体,使流线更贴近了衬底表面,形成平滑的滞止流,从而使气体反应物在反应器内的分布更加合理;基座旋转速度的增大使离心驱动效应增强,在“径向抽吸”的作用下,反应器内气体沿径向被排出,使基座表面流线趋向平直.所以,基座旋转的“泵浦效应”,可以极大地改进“记忆效应”产生的影响.

当其他条件不变时,计算了基座旋转对温度场分布的影响,同没有旋转情况的图3(b)比较,可以发现3种转速的图7中,808.4 K等温线明显下移变得更为平坦,这表明旋转可以有效地改进主流道的温度场分布,使基座表面温度场的分布更趋合理,这样可以保证晶体生长的化学反应在相对稳定的条件下进行,有利于材料外延的均匀性.

总之,在不改变其它基准条件下,通过对图6,7的综合分析,发现基座转速约为100 r/min时,不仅可以获得稳定平直的流场分布,即可较彻底地消除“记忆效应”,增强传质效果即新鲜反应剂的更新和反应产物的排出,而且也有利于改善温度场分布的均匀性.所以,当前绝大多数先进的MOCVD设备,都采用旋转基座的方式,以提高沉积材料生长的均匀性.

2.5 工艺参数优化条件下的热流场分布

通过对MOCVD反应器各关键参数进行数值运算,发现该设备的工艺条件如果维持在:进气量为 $10\sim 15\text{ L min}^{-1}$ 、操作压力为6.66~26.7 kPa、衬底温度为880~1000 K、转速为90~110 r/min的区间内,均能保持比较均匀的流场和温度场分布.

针对本文研究的生长设备与材料,我们选取一组适宜的工艺参数:即反应器的进气量为 12.5 L min^{-1} 、操作压力为13.3 kPa、衬底温度为900 K、转速为 105 r min^{-1} 、内侧壁温度取为800 K、外侧壁温度为350 K,优化计算了反应器内部热流场的分布状况.

从图8(a)的流场分析,可以看到在反应器内流场的分布比较均匀,只是在流道的弯折处存在对流涡旋,它对材料的外延质量影响不是很大;此类流型的产生,是源于在轴向方向不断连续的进气流,有效压制了前一时刻喷入反应器内的气流径向方向流动,使之不能产生对流涡旋流动.

从图8(b)的温度场分析,可以看到在反应器基座上方等温线分布比较平直,这说明通过合理调节MOCVD反应器的重要工艺参数,既可充分保证流体流型的优良状态,又使温度场的分布得到了比较有效的改善,其结果十分有助于外延生长高质量的晶体材料.

图 7 石墨舟转速对温度场分布的影响

(a) $\omega=80$ r/min; (b) $\omega=100$ r/min; (c) $\omega=120$ r/min

图8 工艺参数优化条件下的热流场分布

2.6 反应器中热流场瞬态行为的计算与分析

通过对 MOCVD 反应器重要工艺控制参数进行优化计算,得到了稳态条件下优化的热流场分布,其结果是进行瞬态行为研究的基础,同时也可以将其其他影响因素降至最低,这样才能凸显瞬态现象.由于瞬态行为的强度比较微弱、持续的时间也较短,任何物理测量技术都会对热流场的固有形态形成微扰,使其偏离原位而失真.然而,这正是 CFD (computational fluid dynamic)数值计算方法的优势所在,它可以充分揭示反应器内部流动过程中存在的瞬态现象与规律.

为了便于计算 MOCVD 反应器内部流体的瞬态流动特征,选择反应器内 A(0.075, 0.020), B(0.070, 0.008), C(0.015, 0.008)三点(如图 8(b)所示),作为考察其热流场稳定与否的图形化观测点. A 点着重观测尾气流动情况, B 点透视基座边缘处衬底上方的流动状态, C 点专注基座中部附近衬底上方的流动行为,通过对各点的数值计算揭示其内部流体流动的规律.具体操作是,在保持其他优化工艺参数不变的情况下,对进气量进行阶跃微扰,即 Q 从 12.5 L/min 增加为 13.2 L/min 时,求解二维含时动力学方程组,计算了 MOCVD 热流场瞬态行为特征,得到了直观、清晰的结果.

微扰进气量对反应器内 A 点流场分布的影响,可见图 9(a)所示:初期流场的弛豫振荡剧烈,后依次递减;经过约 24 s 的时间后,气体的流动进入较稳定的自脉动振荡阶段.由于存在随机湍流的作用,自脉动的周期性受到一定程度的干扰.

由图 9(b)可见:微扰进气量对反应器内温度场分布的影响,同流场响应行为不同的是,温度场有明显的延迟时间,经过约 38 s 后,温度的变化逐渐进入较稳定的状态,亦进入自脉动阶段.温度场与流场的瞬态行为有别,流场对微扰量的响应直接快捷,而温度场则存在一定的延迟时间,且弛豫振荡的时

间短、自脉动振荡周期幅度较大等特点.这是由于反应器系统内部,流体的流动存在着随机脉动流、随机热对流等因素,所以造成温度场的自脉动现象比较剧烈.同时,因为温度场的变化直接受气体流型的支配与影响较大,而且热系统主要依靠热对流的形式传递能量,故温度场的响应变化存在着一定的延迟时间.

微扰进气量对反应器内 B 点流场分布的影响,可见图 10(a)所示:初期流场的弛豫振荡也较剧烈,经过约 25 s 的时间后,气体的流动进入较稳定的自脉动振荡阶段.由图 10(b)可见:微扰进气量对反应器内温度场分布的影响,计算发现其温度场也存在明显的延迟时间,经过约 20 s 后,温度的变化逐渐进入较稳定的状态,亦进入自脉动阶段.由于 B 点附近的流线最为密集,流体内质点的相互作用最为强烈;故同图 9(a)相比, B 点流场受到干扰的程度较为剧烈,其自脉动的周期性因此更为不规则;基于同样原因,同图 9(b)相比, B 点温度场存在的延迟时间与弛豫振荡的时间较短,其自脉动振荡周期幅度受到极大地抑制.

微扰进气量对反应器内 C 点流场分布的影响,可见图 11(a)所示:初期流场的弛豫振荡幅度较轻,经过约 20 s 的时间后,气体的流动进入较稳定的自脉动振荡阶段.由图 11(b)可见:微扰进气量对反应器内温度场分布的影响,经过约 40 s 的延迟时间后,温度场的变化进入较稳定的状态,即进入自脉动阶段.

由于 C 点附近的流线较为稀疏,流体内质点的相互作用与干扰程度不太强烈,故同图 9(a),图 10(a)相比,其自脉动的周期性较明显;基于同样原因, C 点温度场对系统进气流量变化的反馈速度较慢,热对流传递能量的能力也较弱,所以其温度场的延迟时间更长,自脉动振荡周期的幅度也较弱.

图 9 A 点热流场瞬态特征图

图 10 B 点热流场瞬态特征图

图 11 C 点热流场瞬态特征图

从衬底上方流体运动的瞬态行为分析, 可以发现流场自脉动振荡的积极意义是: 可以增强衬底表面的传质效果, 有利于新鲜反应物向衬底方向的扩散, 从而增加了晶体生长的速度; 当然, 自脉动振荡现象也存在消极作用, 即对晶体材料外延层间的均匀性、各界面间的陡峭分布, 以及批量制备晶体材料的一致性等方面, 存在不利的影响。

由于 MOCVD 生长设备具有规模大、成本低、性能可靠等特点, 它已经成为商业上制备化合物半导体材料的首选设备。然而, MOCVD 反应器内部气体实际流动现象十分复杂, 既包含了复杂的随机脉动流动, 以及由随机因素引发的不确定热流场的不

规则变化; 同时, 包含了传热、传质和化学反应, 以及它们之间的相互耦合作用。所以, 使用 MOCVD 设备, 外延生长出原子级陡峭异质界面的难度比较大。

随着半导体材料与器件的功能越来越强大, 应用的领域越来越广阔; 特别是近年来, 基于量子点、量子线、量子阱超晶格等高端的纳米材料与器件的出现, 加上横向外延技术、低温缓冲层技术、组分渐变缓冲层技术, 以及光电系统集成等复杂技术的综合运用, 就要求商业级的 MOCVD 设备生长出更高质量的异质结构材料, 即在衬底上方外延出特定图形、特定组分、特定厚度、特定导电类型、特定电学和光学性能的晶体材料, 这就需严格控制 MOCVD 设

备的工艺生长条件,其中较重要的是,要对瞬态现象加以足够的重视与研究,严密地设计与控制周期性地切换前驱物进入反应器,尽快使反应物在衬底上方形成稳定的流动状态,只有这样才可能较有效地得到原子级陡峭的异质界面分布。所以,瞬态现象的研究,为解决上述问题与难点,以及实现材料批量生长的可重复性等外延特征与规律,有着非常重要的意义。总之,通过运用CFD数值计算技术,同时采用微扰进气量分析法,可以直观剖析反应器内部流体流动的瞬态行为,这对研究反应器内流体因组分切换时产生的延迟时间、弛豫振荡和自脉动振荡

等随机现象大有益处。

3 结论

本文对 MOCVD 设备的重要工艺参数进行了较为详细的研究,从如何获得较佳的热流场的分布出发,在此基础上考察了反应器的瞬态行为变化,分析了瞬态现象产生和变化的原因,其结论将有助于深化理解 MOCVD 反应器中流体的输运过程与工艺参数的内在关系,这对提高外延层的均匀性、界面的陡峭性和生长的可重复性有较积极意义,为难度较大的“异系异质兼容”等复杂外延生长技术,奠定了坚实的研究基础。

参考文献

- 1 Manasevit H M. Single-crystal gallium arsenide on insulating substrates. *Appl Phys Lett*, 1968, 12: 156—159[doi]
- 2 Dupuis R D. Metalorganic chemical vapor deposition of III - V semiconductors. *Science*, 1984, 226: 623—629[doi]
- 3 Ponce F A, Bour D P. Nitride-based semiconductors for blue and green light-emitting devices. *Nature*, 1997, 386: 351—359[doi]
- 4 Kuykendall T, Ulrich P, Ulrich P, et al. Complete composition tunability of InGaN nanowires using a combinatorial approach. *Nat Mater*, 2007, 6: 951—956[doi]
- 5 Hostein R, Michon A, Beaudoin G, et al. Time-resolved characterization of InAsP/InP quantum dots emitting in the C-band telecommunication window. *Appl Phys Lett*, 2008, 93: 073106[doi]
- 6 Wang X L, Wang C M, Hu G X, et al. Growth and characterization of 0.8- μm gate length AlGaIn/GaN HEMTs on sapphire substrates. *Sci China Ser F-Inf Sci*, 2005, 48: 808—814[doi]
- 7 Wang C A, Groves S H, Palmateer S C. Flow visualization studies for optimization of OMVPE reactor design. *J Cryst Growth*, 1986, 77: 136—143[doi]
- 8 Stock L, Richter W. Vertical versus horizontal reactor: An optical study of the gas phase in a MOCVD reactor. *J Cryst Growth*, 1986, 77: 144—150[doi]
- 9 Nami Z, Erbil A, May G S. Reactor design considerations for MOCVD growth of thin films. *IEEE Trans Semicond Manuf*, 1997, 10: 295—306[doi]
- 10 陈俊, 张书明, 张宝顺, 等. 缓冲层生长压力对 MOCVD GaN 性能的影响. *中国科学 E 辑: 技术科学*, 2004, 34: 58—63
- 11 徐现刚, 崔得良, 唐喆, 等. InGaAs/InP 异质结界面层的应变研究. *中国科学 A 辑*, 2001, 31: 817—822
- 12 张佳文, 高鸿楷, 张济康, 等. MOCVD 过程中回流现象的数值模拟. *半导体学报*, 1994, 15: 268—272
- 13 左然, 张红, 刘祥林. 径向三重流 MOCVD 反应器输运过程的数值模拟研究. *半导体学报*, 2005, 26: 977—982
- 14 刘奕, 陈海昕, 符松. GaN-MOCVD 设备反应室流场的 CFD 数值仿真. *半导体学报*, 2004, 25: 1639—1645
- 15 郭文平, 邵嘉平, 罗毅, 等. MOCVD 生长 GaN 材料的模拟. *半导体学报*, 2005, 26: 735—739
- 16 杨云柯, 高立华, 陈海昕, 等. 喷淋式 GaN-MOCVD 反应室的 CFD 数值仿真及优化. *力学学报*, 2007, 24: 173—178
- 17 Mitrovic B, Guray A, Quinn W. Process conditions optimization for the maximum deposition rate and uniformity in vertical rotating disc MOCVD reactors based on CFD modeling. *J Cryst Growth*, 2007, 303: 323—329[doi]
- 18 Martin C, Dauelsberg M, Protzmann H, et al. Modeling of group-III nitride MOVPE in close coupled showerhead reactor and planetary reactor. *J Cryst Growth*, 2007, 303: 318—322[doi]
- 19 钟树泉, 任晓敏, 王琦, 等. MOCVD 反应器热流场的数值模拟研究. *人工晶体学报*, 2008, 37: 1342—1348
- 20 Zhong S Q, Ren X M, Huang Y Q, et al. Analysis and simulation of process parameters for epitaxy of InP-based compound semiconductor materials. *APOC Proc SPIE*, 2008, 7135: 71353M