

# MOCVD反应器的数学模型及其数值模拟

陈燕, 王贞涛, 罗惕乾

(江苏大学能源与动力工程学院, 江苏 镇江 212013)

**摘要:** 以垂直金属有机化学气相沉积 (MOCVD) 反应器沉积 GaN 为对象, 建立了反应器内部数学模型。模型中包括了流动、传热和传质方程。通过应用非结构化网格划分复杂模型, 在此基础上, 计算了反应器中流场和温度场的分布。计算结果对于分析轴向对称立式 MOCVD 反应器中热量和动量输运现象均有普遍指导意义, 为优化设计 MOCVD 反应器提供了理论依据。

**关键词:** 金属有机化学气相沉积; 数学模型; 流场; 温度场; 数值模拟

**中图分类号:** TN304

**文献标识码:** A

**文章编号:** 1005-6254(2004)04-0039-03

## 0 引言

MOCVD (Metal Organic Chemical Vapor Deposition) 即金属有机化学气相沉积, 是将稀释于载气中的金属有机化合物导入反应器中, 在被加热的衬底上进行分解、氧化或还原等反应, 生长出薄膜或外延薄层的技术。MOCVD 是由美国洛克威尔公司的 H. M. Manasevit 等在 1968 年首先提出的一种制备化合物半导体薄层单晶膜的方法。

在 MOCVD 沉积体系中, 反应器中气体分子通过定向流动、对流和扩散, 实现气态反应物或生成物的转移, 不仅决定了基体沉积速度, 而且对其沉积机理和沉积效果有显著的影响。理想的反应器内流场为: (1) 将反应气流控制为层流, 达到稳定的边界层以保证衬底各处沉积速度一致; (2) 衬底上方无任何形式的涡流或回流, 以减小气体在反应器内停留时间, 从而消除非理想产物的形成。然而 MOCVD 反应器中气体流动具有复杂与不可观察的特点, 因此, 建立反应器模拟设备使气体流动可视化, 对全面研究 MOCVD 过程的气体输运现象、优化设计和使用 MOCVD 反应器有重要意义。

本文在采用非结构化网格有限容积方法划分网格的基础上, 运用压力耦合方程的半隐式算法 (SIMPLE) 求解耦合的动量、能量及反应组分的质量输运方程, 对立式低压 MOCVD 反应器中的流场和温场进行了数值模拟的研究。该模拟结果

可以精确地描述特定条件下 MOCVD 反应器中的流动及其对沉积过程的影响, 为优化设计 MOCVD 反应器提供了理论依据。

## 1 立式 MOCVD 反应器流动数学模型的建立

轴向对称立式 MOCVD 反应器数学模型应包括连续性方程、动量守恒方程、能量守恒方程和理想气体状态方程以及反应组分的质量守恒方程。图 1 是 MOCVD 反应器的结构示意图。

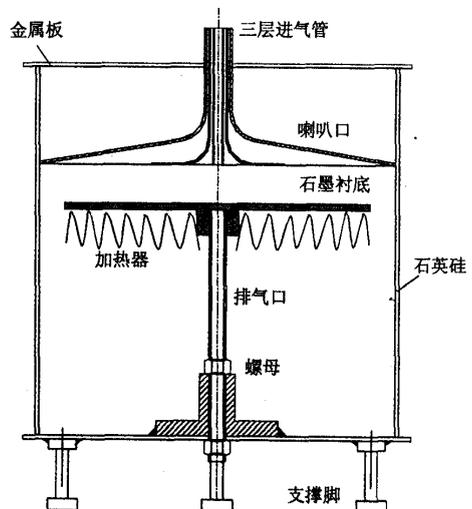


图 1 MOCVD 反应器的结构示意图

基金项目: 江苏大学高级人才基金项目(04JDG013); 江苏省高校自然科学基金项目(02KJD470002)

作者简介: 陈燕(1980-), 女, 江苏南通人, 江苏大学能源与动力工程学院硕士研究生。

在建立 MOCVD 反应室模型中,假设:流动为定常不可压缩二维层流,忽略粘滞损耗和气相对载体物性的影响,不考虑辐射传热和由于化学反应以及热扩散和粘性耗散引起的能量变化。

通过以上假设,原始的控制方程可以有很大的简化。由此根据反应器的结构,在柱坐标系中建立起模型方程:

连续性方程:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial(rv_r)}{\partial r} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0 \quad (1)$$

动量守恒方程:

r 方向分量:

$$\rho \left( v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} + v_z \frac{\partial v_r}{\partial z} \right) + \frac{\partial p}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \cdot \left[ \mu r \left[ \frac{4}{3} \frac{\partial v_r}{\partial r} - \frac{2}{3} \left( \frac{\partial v_z}{\partial z} + \frac{v_r}{r} \right) \right] \right] - \frac{\mu}{r} \left[ \frac{4}{3} \frac{v_r}{r} - \frac{2}{3} \left( \frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \mu \left( \frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{\partial v_r}{\partial z} \right) \right] \quad (2)$$

z 方向的分量:

$$\rho \left( v_r \frac{\partial v_z}{\partial r} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) + \frac{\partial p}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ \mu r \left( \frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{\partial v_r}{\partial z} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \mu \left[ \frac{4}{3} \frac{\partial v_z}{\partial z} - \frac{2}{3} \left( \frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{v_r}{r} \right) \right] \right] + \rho g \quad (3)$$

θ 方向的分量:

$$\rho \left( v_r \frac{\partial v_\theta}{\partial r} + \frac{v_r v_\theta}{r} + v_z \frac{\partial v_\theta}{\partial z} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \cdot \left[ \mu \left( r^2 \frac{\partial v_\theta}{\partial r} - r v_\theta \right) \right] - \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) = 0 \quad (4)$$

能量守恒方程:

$$\rho C_p \left( v_r \frac{\partial T}{\partial r} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r k \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (5)$$

理想气体状态方程:

$$\rho = \frac{p M_w}{RT} \quad (6)$$

反应组分的质量守恒方程(质量输运方程):

$$c \left( v_r \frac{\partial x_A}{\partial r} + v_z \frac{\partial x_A}{\partial z} \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ c \lambda r \left[ \frac{\partial x_A}{\partial r} + k_i \frac{\partial(\ln T)}{\partial r} \right] \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ c \lambda \left[ \frac{\partial x_A}{\partial z} + k_i \frac{\partial(\ln T)}{\partial z} \right] \right] \quad (7)$$

上述方程中,  $v_r$  和  $v_z$  分别为径向和轴向的速度分量;  $p$  为压力;  $\mu$  为载气的粘度;  $M_w$  为载气的分子量;  $R$  为理想气体常数;  $T$  为温度;  $k$  为热导

率;  $C_p$  为载气的热容;  $c = \rho/M_w$  为载气的总浓度;  $\lambda$  为源在载气中扩散系数;  $x_A$  为某一组分气体的摩尔分数;  $k_i$  为热扩散系数。

由反应器实际的沉积条件,上述方程的边界条件为:

器壁处  $v_r=0, v_\theta=0, v_z=0, T=T_w$ (器壁温度)

衬底上  $v_r=0, v_\theta=\omega r \quad 0 \leq r \leq R_s, v_z=0,$

$T=T_s$ (衬底温度),

入口处  $v_r=0, v_\theta=0, T=T_0, v_z=v_0=Q/\pi r_0^2$

(式中,  $Q$  为气体进口体积流量,  $r_0$  为气体入口半径。)

出口处  $\frac{\partial v_r}{\partial z}=0, \frac{\partial v_\theta}{\partial z}=0, \frac{\partial v_z}{\partial z}=0$

$\frac{\partial T}{\partial z}=0, \frac{\partial x_A}{\partial z}=0,$

对称中心线上  $v_r=0, \frac{\partial v_\theta}{\partial r}=0, \frac{\partial v_z}{\partial r}=0, \frac{\partial T}{\partial r}=0$

## 2 MOCVD 反应器内部流场和温场的数值模拟

对轴向对称立式的反应器,模拟反应器内部的流场和温场只需考虑轴对称的一部分。

进行 CFD 计算的前处理工作是网格的划分。网格生成是数值计算中的一个重要的前处理过程,将直接影响计算结果的精度和计算的速度。本文采用了非结构化的网格,它舍去了网格节点的结构性的限制,节点和单元的分布是任意的,因而能较好地处理边界。在进行 CFD 计算时将计算模型逆时针旋转 90°,以满足网格划分的要求。

### 2.1 不同进口流量对流场和温场分布的影响

设计的模型为三管不同直径的嵌套式三气流管路。最内层的管路通  $NH_3$ ; 用  $H_2$  作载气的  $Ga(CH_3)_3$  由中间管进入反应室,由于  $Ga(CH_3)_3$  的浓度很低,因此在模拟计算时可以忽略;最外层管路通  $N_2$ 。三种气体分别由左边三个管路进入反应室可以有效地避免预反应。不同的进口流量对应的反应器中的流线和等温线图见图 2~图 5。图中流量(8,15,12) l/min 表示内、中、外三管的流量数值。

### 2.2 计算结果及结论

图 2 和图 3 是在不同的进口流量的条件下,通过模拟得到的等温线图。其中设置的衬底温度是 1 300 K,随着离衬底距离的增加,温度逐渐降低,到外壁面的温度是 300 K。流量较小的等温线

的分布较均匀,温度梯度小,温度变化比较缓慢;而流量大的等温线图主要集中在衬底附近,衬底附近温度很高,而其余的地方温度下降很快。

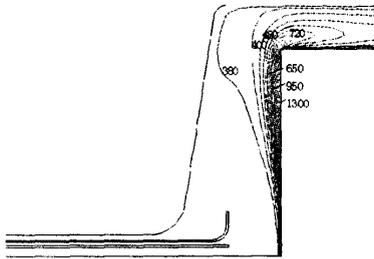


图2 流量(8,15,12) l/min 等温线

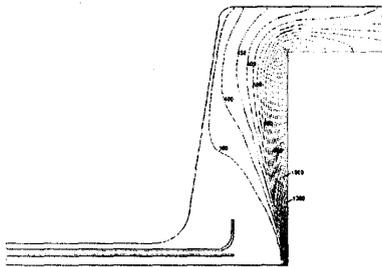


图3 流量(3,5,3) l/min 等温线

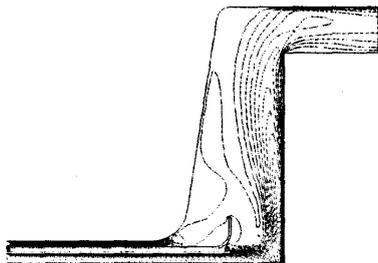


图4 流量(8,15,12) l/min 流线图

图4和图5是不同进口流量下的流线图,从图中可以看到,在进口喇叭口的地方都产生了漩

涡,流量大的产生的漩涡相对较大。漩涡产生的原因主要由于反应室内部温差引起的热对流以及反应器本身的结构。流量大的温度梯度大,从而由强热对流形成的漩涡充满整个反应室的上部空间;流量小的温度分布比较均匀,漩涡比较少,接近衬底处由于温度分布均匀,流体的流动也趋于稳定的层流。

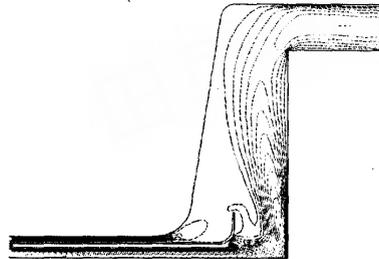


图5 流量(3,5,3) l/min 流线图

综上所述,对于不同直径的嵌套式三气流管路,各管不同的流量对应有不同的温场和流场。总体上可以看到小流量对应的流线图和等温线图都比较均匀,而大流量的对应的流场和温场则稍逊色。该数值模拟结果可以为优化设计MOCVD反应器提供理论依据。

#### 参考文献:

- [1] Chang-Yong Shin, et al. Numerical Analysis for the Growth of GaN Layer in MOCVD Reactor [J]. Crystal Growth, 2003:301-312.
- [2] Won Young Chung, et al. Modelling of Cu thin film growth by MOCVD process in a vertical reactor[J]. Crystal Growth, 1997: 691-697.
- [3] Durst F, et al. A Multigrid Solver for Fluid Flow and Mass Transfer Coupled with Grey body Surface Radiation for the Numerical Simulation of Chemical Vapor Deposition Processes [J]. Crystal Growth, 1995, 146:202-208.

## Mathematics Model and Numerical Analysis of the MOCVD Reactor

CHEN Yan, WANG Zhen-tao, LUO Ti-qian

(School of Energy Resource and Power Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang, Jiangsu 212013, China)

**Abstract:** The mathematics model of Metal organic chemical vapor deposition (MOCVD) reactor with system of GaN deposition in a vertical reactor is introduced. The model includes the fluid flow, heat and mass transfer equations. The problem is solved numerically by unstructured grid, using the upwind finite volume method for the three conservation equations. The distributions of velocity, temperature in the reactor are predicted. The numerical results presented can also be used to predict thermal conductivity and diffusion and momentum transport phenomena in axisymmetric vertical reactor. It provides the theoretic basis for optimization of MOCVD reactor.

**Key words:** MOCVD; Mathematics model; Flux field; Temperature field; Numerical simulation