

MOCVD 过程中回流现象的数值模拟

张佳文* 高鸿楷 张济康

杨 永

(中国科学院西安光学精密机械研究所 西安 710068) (西北工业大学 西安 710072)

摘要 在金属有机物化学汽相淀积过程中, 反应器中的回流现象严重影响生长层的界面陡峭性。本文从关于 MOCVD 的流体力学基本方程出发, 用二维有限差分 and 流函数涡量法求解方程, 取得了不同条件下气流场的流谱。计算结果表明, 减小反应器压强、增加运载气体流量等方法可以消除回流。本文所用的流函数-涡量法具有简单、明了, 运算速度快等优点。

PACC: 8115H, 4730, 0260

1 引言

在 MOCVD 过程中, 运载气体遇到 700℃ 左右的热石墨舟时, 容易在石墨舟的前边缘出现浮力感应的回流, 使生长层之间的界面陡峭性变坏。随着计算机的推广使用及运算速度的提高, 数值模拟在回流现象研究中占有越来越重要的地位。模拟从二维发展到三维, 模拟结果也更接近实际生长。其中数值方法的选择也十分关键。MOCVD 过程涉及到流体力学, 气相及固体表面反应动力学以及两者的耦合效应, 实际过程非常复杂, 所以目前的模型都进行了一定合理的简化。由于回流的轴线与主气流方向垂直, 所以本文采用二维模型; 由于反应剂被运载气体稀释(约 10^{-5}), 所以模型假定气体的热传导不受反应剂浓度梯度影响, 反应剂的质量传输不受温度梯度影响。本文将用有限差分和流函数涡量法求解方程。

2 数值模型

MOCVD 二维反应器如图 1 所示。反应器中二维可压缩流体的基本方程如下:^[1]

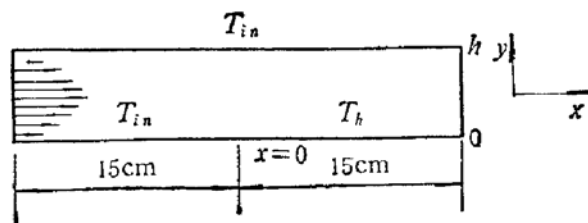


图1 二维数值模拟用反应器示意图

* 现在工作单位: 中国科学院微电子中心研究部 北京 100010

本文 1992 年 8 月 17 日收到, 修改稿 1993 年 1 月 6 日收到

连续性方程:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) = 0. \quad (1)$$

运动方程:

$$x \text{ 方向: } \rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \mu \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right], \quad (2)$$

$$y \text{ 方向: } \rho u \frac{\partial v}{\partial x} + \rho v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{\partial P}{\partial y} - \rho g + \mu \left[\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right]. \quad (3)$$

能量方程:

$$\rho u c_p \frac{\partial T}{\partial x} + \rho v c_p \frac{\partial T}{\partial y} = \kappa \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right]. \quad (4)$$

式(1)~(4)中, u, v 分别为气体的水平速度和垂直速度, P, T 分别为反应器的压强和温度, ρ, μ, c_p, κ 分别为气体的密度、动力学粘滞系数、比热和热导率。式(3)的 ρg 项为形成回流的主要因素。

基本方程的边界条件如下:

$$\text{入口处: } u = 4u_{in} \left[\frac{y}{h} - \left(\frac{y}{h} \right)^2 \right], v = 0, T = T_{in}, \quad (5)$$

$$\text{出口处: } \partial(\rho u)/\partial x = 0, v = 0, \partial T/\partial x = 0, \quad (6)$$

$$\text{石墨舟上: } u = 0, v = 0, T = T_h, \quad (7)$$

$$\text{其他器壁上: } u = 0, v = 0, T = T_{in}. \quad (8)$$

由此可知,入口处速度呈抛物线分布,出口处的速度和温度均已完全发展。以上各式中气体的物理特性均与温度有关。对于 H_2 作运载气体情形,它们的表达式如下^[2]:

$$\rho(\text{kg/m}^3) = 2.4 \times 10^{-4} P_{in}(\text{Pa})/T, \quad (9)$$

$$\mu(\text{g/cm} \cdot \text{s}) = 8.8 \times 10^{-5} \exp[0.69 \ln(T) - 0.68/T - 111/T^2 - 3.9001], \quad (10)$$

$$\kappa(\text{J/m} \cdot \text{s} \cdot \text{K}) = 0.080796 + 3.7312 \times 10^{-4} T - 7.4683 \times 10^{-4} T^2, \quad (11)$$

$$c_p(\text{J/kg} \cdot \text{K}) = 14534 - 0.4023T + 9.816 \times 10^{-4} T^2. \quad (12)$$

由此可见,只要给定了 $T_{in}, u_{in}, T_h, P_{in}, h$ 和运载气体类型这 6 个参数,则基本方程有确定的解,从而可以取得反应器中的流谱等量。

3 数值方法

本文采用流函数-涡量法解方程。流体力学中的流函数 $\phi(x, y)$ 是使得:

$$u = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \phi}{\partial y}, \quad v = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (13)$$

的量。 ϕ 为常数的曲线代表一条流线,流线上某点的切线方向就是该点的速度方向。另外,流体力学中涡量 ω 的表达式为:

$$\omega = \partial v / \partial x - \partial u / \partial y. \quad (14)$$

它是描述流体质量是否有旋转的一个量。

将式(13)代入式(14)并展开可得流函数方程:

$$\left(-\frac{\partial \rho}{\partial x} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial \rho}{\partial y} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial y}\right) / \rho^2 + \frac{1}{\rho} \nabla^2 \phi + \omega = 0. \quad (15)$$

将式(2)、(3)分别对 y, x 求导, 将结果相减, 并利用式(14), 可得涡量的传输-扩散方程:

$$\rho \left(u \frac{\partial \omega}{\partial x} + v \frac{\partial \omega}{\partial y} \right) - RD - \mu \nabla^2 \omega = 0, \quad (16)$$

其中

$$RD = u \left(\frac{\partial \rho}{\partial y} \cdot \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial \rho}{\partial x} \cdot \frac{\partial u}{\partial y} \right) + v \left(\frac{\partial \rho}{\partial y} \cdot \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial \rho}{\partial x} \cdot \frac{\partial v}{\partial y} \right) + g \frac{\partial \rho}{\partial x}. \quad (17)$$

将式(5)~(8)代入式(13)、(14)中, 可以得到式(15)和(16)的边界条件:

$$\begin{aligned} \text{入口处:} \quad \phi &= \int_0^y \rho_{in} u dy = 4u_{in} \rho_{in} \int_0^y \left[\frac{y}{h} - \left(\frac{y}{h} \right)^2 \right] dy, \\ \partial \omega / \partial x &= 0. \end{aligned} \quad (18)$$

$$\text{出口处:} \quad \partial \phi / \partial x = 0, \quad \partial \omega / \partial x = 0. \quad (19)$$

$$\text{底壁:} \quad \phi = 0, \quad \omega = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2}. \quad (20)$$

$$\text{顶壁:} \quad \phi = \int_0^h \rho_{in} u dy = \text{const}, \quad \omega = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2}. \quad (21)$$

解基本方程时, 依次求解式(4)、(16)和(15), 得到温度, 涡量和流函数, 得到气流场的流谱。用有限差分法建立差分格式, 用松弛迭代法 (SOR) 求出其差分解。计算时 x 方向和 y 方向上分别取 51 和 27 个均匀网格点。在 286 上运算, 每次结果需 25 分钟。

4 计算结果及分析

图 2 给出了反应器温度 $T = 1023\text{K}$, 流速 $v = 4.2\text{cm/s}$, 高度 $h = 4\text{cm}$ 条件下变化压强对回流的影响。

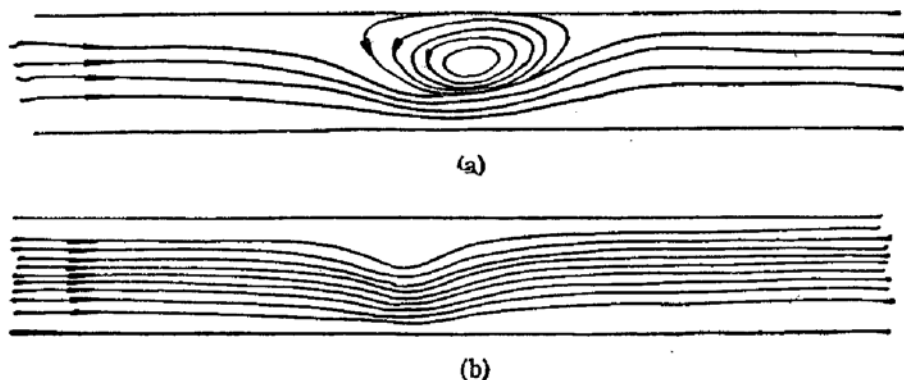


图 2 变化反应器压强时的流谱

(a) 压强 $P = 0.50\text{atm}$ (b) 压强 $P = 0.10\text{atm}$

图 2(a) 为压强 $P = 0.50\text{atm}$ 的流谱, 图 2(b) 为压强 $P = 0.10\text{atm}$ 的流谱。从图中可知, 反应器压强较大时, 回流在石墨舟前边缘产生, 随着压强减小, 回流区消失。图 3

给出了 $T = 1023\text{K}$, 压强 $P = 1\text{atm}$, $h = 4\text{cm}$ 条件下变化气体流速的计算结果. 图 3(a) 为流速 $v = 3\text{cm/s}$ 时的流谱; 图 3(b) 为流速 $v = 14\text{cm/s}$ 时的流谱. 可见, 增加运载气体流速可减小回流, 直至消失.

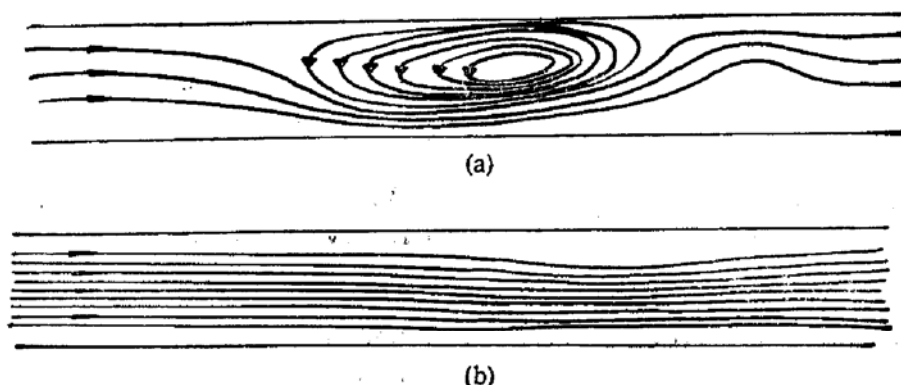


图 3 变化气体流速时的流谱

(a) 流速 $V = 3\text{cm/s}$ (b) 流速 $V = 14\text{cm/s}$

为了定量地寻求回流消除条件, 将方程(3)化为无量纲形式:

$$\rho' u' \frac{\partial v'}{\partial x'} + \rho' v' \frac{\partial v'}{\partial y'} = \frac{1}{R_s} \left[\mu' \left(\frac{\partial^2 v'}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2 v'}{\partial y'^2} \right) \right] + \frac{\partial P'}{\partial y'} - \frac{G_r}{R_s^2} (\rho' - \rho'_{in}). \quad (22)$$

其中 R_s, G_r 为流体力学中的两个无量纲参数. 上式左边为惯性力项, 右边第一项为粘性力项, 左边最后一项为浮力项. 由上式可知, 当 R_s 较小时, 惯性力对回流的影响可忽略, 回流由 G_r/R_s 标志; 当 R_s 较大时, 粘性力对回流的影响可以忽略, 回流由 G_r/R_s^2 标志. 将由 G_r 和 R_s 标志的回流结果绘于图 4 中, 可见, 当 $R_s < 4$ 时, 回流消除的条件是 $G_r/R_s < 140$; 当 $8 < R_s < 10$ 时, 回流则以 G_r/R_s^2 为标志.

5 结论

本文用流函数-涡量的数值方法研究了 MOCVD 过程中的回流现象, 取得了与 Visser 等人^[3]完全一致的计算结果. 本文所用方法简单可靠, 运算速度比 Visser 等人的快一倍. 计算结果表明, 减小反应器压强、增大气体流速均可消除回流.

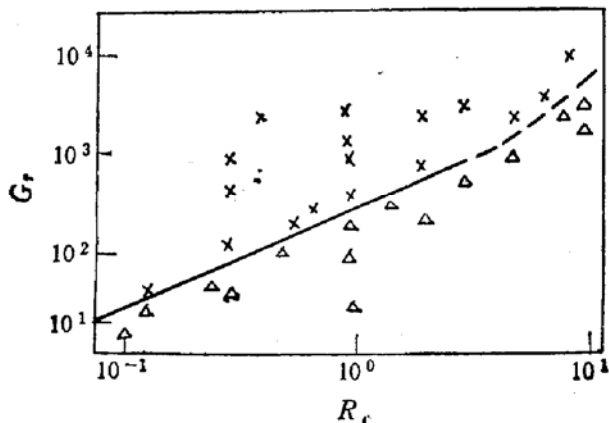


图 4 回流与无量纲数 R_s, G_r 的关系

×有回流 Δ无回流

参 考 文 献

- [1] 吴望一等, 流体力学, 北京大学出版社, 1988.
- [2] Percy B. Chinoy *et al.*, J. Electronic Materials, 1988, 17 (6): 493—498.
- [3] P. Visser *et al.*, J. Crystal Growth, 1989, 94: 929—946.

Numerical Simulation of Return Flow in MOCVD Reactor

Zhang Jiawen, Gao Hongkai and Zhang Jikang

(Institute of Optics and Precision Mechanics, the Chinese Academy of Sciences, Xi'an 710068)

Yang Yong

(North-West Polytechnical University, X 'an 710072)

Abstract In a MOCVD reactor, very pronounced return flow may develop due to sudden heating of cold gas, which impairs the abruptness of junction. The Numerical calculations on gas flow are performed based on the differential equations for the conservation of mass, energy and momentum using stream functionvortex method. The results show that the occurrence of return flows can be eliminated by increasing gas flow and decreasing reactor pressure.

PACC: 8115H 4730, 0260