

SiC 晶体生长中流场的优化设计

颜君毅 陈启生 姜燕妮 李 炜

(中国科学院力学研究所国家微重力实验室, 北京 100190)

摘 要 物理气相输运法 (PVT) 是实验室最为常见的碳化硅 (SiC) 大块单晶生长方法。本文在碳化硅晶体生长模型化研究中, 针对碳化硅单晶 PVT 生长过程中的传热传质等现象引入了对流传热中的场协同原理, 利用这一原理对生长室内的流场温度场进行了优化, 并对改良前后分别进行了数值模拟, 研究了该原理对晶体生长的影响。实验室碳化硅单晶的生长成功率从优化设计前的 30% 提高到 90%。

关键词 碳化硅晶体; PVT 法; 场协同; 浓度场; 流场

中图分类号: TK124 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-231X(2011)02-0308-04

OPTIMIZATION OF THE FLOW FIELD IN SiC CRYSTAL GROWTH

YAN Jun-Yi CHEN Qi-Sheng JIANG Yan-Ni LI Wei

(National Microgravity Laboratory, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences,
15 Bei Si Huan Xi Road, Beijing 100190, China)

Abstract SiC crystal is usually got by physical vapor transport (PVT) method in the lab. In this paper, a field-coordination theory was involved to optimize the SiC PVT growth system. We changed the parameters in the graphite crucible and calculated the flow field as well as species concentration field before and after optimization, using a finite volume-based software package developed by ourselves. We improved the design by analyzing the numerical results and the success ratio of SiC PVT experiment had increased from 30% to 90%.

Key words SiC crystal; PVT; field-coordination theory; concentration field; flow field

0 引 言

碳化硅 (SiC) 是继硅和砷化镓之后发展起来的第三代半导体材料, 它具有导热性好、耐高温、耐强辐射等许多优点。碳化硅大块单晶一般通过物理气相输运法 (PVT) 在 2000 摄氏度以上的高温下生长, 该生长过程涉及到诸如电磁感应、化学反应及传热传质等现象。针对这些问题进行的模型化研究可以指导碳化硅晶体生长系统的优化设计。

1 SiC 晶体生长模型

SiC 晶体物理气相输运法生长的原理如图 1 所示, SiC 原料放置于图中坩埚底部, SiC 籽晶粘附在生长室上端坩埚盖子的下表面上。通过感应加热, 坩埚温度达到 2400 K 以上, 引起 SiC 原料的分解和升华。SiC 气体组分自下而上输运到籽晶表面低温区沉积形成 SiC 单晶。Chen 等^[1] 发展了 SiC 晶体生长动力学模型, 指出了 SiC 气体组分的输运是由 Fick 扩散作用和固体物质膨胀性升华所产生的 Stefan 对流这两种机制共同支配, SiC 晶体的生长速率与

生长界面 SiC 气体的过饱和度成正比。Lu 等^[2] 和 Chen 等^[3] 在此基础上计算了生长室内的温度场、流场以及 SiC 晶体的生长速率等, 并比较了它们在不同压力、不同加热功率下的变化情况。本文基于 Navier-Stokes 方程建立了生长室内的二维传质模型:

$$\nabla \cdot (\bar{\rho} \mathbf{v}) = 0$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \mathbf{u} \mathbf{v}) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \nabla^2 \mathbf{u}$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} v}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} v \mathbf{v}) = -\frac{\partial p}{\partial r} + \mu \nabla^2 \mathbf{v} - \mu \frac{v}{r^2}$$

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \nabla \cdot (c_A \mathbf{v}) = D_{AB} \nabla^2 c_A$$

其中组分 A, B 分别表示反应气体及惰性气体 (Ar), $D_{AB} = D_0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^n \left(\frac{p_0}{p} \right)$, 在边界条件中本文引入描述晶体生长动力学的赫兹-努森方程, 给出出口与入口流量边界条件。

收稿日期: 2010-01-20; 修订日期: 2011-01-15

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (No.50890182)

作者简介: 颜君毅 (1982-), 男, 湖南桃江人, 博士研究生, 主要从事计算流体力学及晶体生长模型化研究。

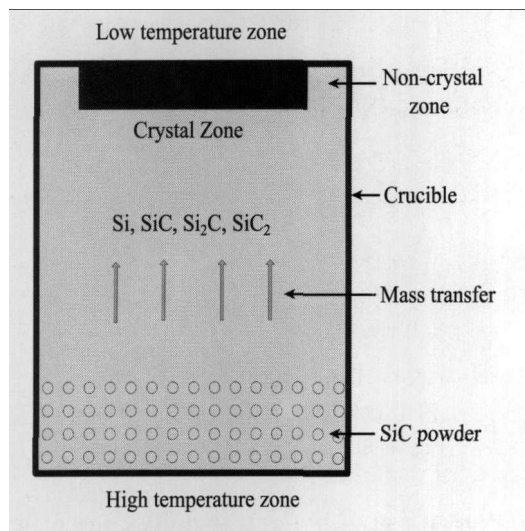


图 1 SiC 晶体生长示意图

Fig. 1 Physical model of PVT SiC crystal growth

在籽晶表面,

$$\left(uc_A - D_{AB} \frac{\partial c_A}{\partial x}\right) \Big|_{x=L} = \chi_A [p_A(L) - p_A^*(L)]$$

$$\left(uc_B - D_{BA} \frac{\partial c_B}{\partial x}\right) \Big|_{x=L} = 0$$

在原料表面,

$$p_A \Big|_{x=0} = p_A^*(T_{\max})$$

$$\left(uc_B - D_{BA} \frac{\partial c_B}{\partial x}\right) \Big|_{x=0} = 0$$

壁面边界条件,

$$u \Big|_{\text{wall}} = v \Big|_{\text{wall}} = 0, \quad \frac{\partial c_A}{\partial r} \Big|_{\text{wall}} = 0, \quad \frac{\partial^2 p}{\partial r^2} \Big|_{\text{wall}} = 0$$

对称轴条件,

$$\frac{\partial u}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0, \quad \frac{\partial c_A}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0$$

2 场协同原理

清华大学 Guo^[4] 对边界层型的流动进行了分析, 研究了流场和温度场在对流传热作用中的场协同现象 (field-coordination theory), 指出减小速度矢量与温度梯度之间的夹角是加强对流换热的有效措施, 反之增大速度矢量与温度梯度之间的夹角可弱化该对流传热作用。同理, 包括对流传质等在内的许多物理化学现象, 当其处在各种不同场力的共同作用下时, 若调整这些作用场的方向趋于一致, 则可强化传递作用; 若夹角增大, 则该传递被削弱。

在 SiC 晶体生长中, 为了得到更好的生长效果, 在图 1 晶体区, 传质应该得到加强, 而传热作用应该相对抑制; 反之, 在非晶体区, 传质作用应该减弱,

而传热得到加强。所以根据场协同理论: 在晶体区, 速度矢量 \vec{u} 和浓度梯度 ∇c 夹角应该尽量小, 速度矢量 \vec{u} 和温度梯度 ∇T 夹角应该尽量大; 在非晶体区, 速度矢量 \vec{u} 和浓度梯度 ∇c 夹角应该尽量大, 速度矢量 \vec{u} 和温度梯度 ∇T 夹角应该尽量小。

3 数值模拟优化

本文利用我们发展的基于有限体积方法的计算软件包 (FLUTRAPP) 求解二维组分输运方程与生长动力学方程, 得到并研究了感应频率为 8 kHz, 电流大小为 1400 A 时坩埚内部优化前后的流动情况和组分浓度分布。

图 2 为优化前生长室内的速度场及浓度场, 由图 2 可以看出无论在晶体区还是非晶体区, 速度矢量 \vec{u} 和浓度梯度 ∇c 方向都趋于一致, 晶体生长在这两个区域都比较快。

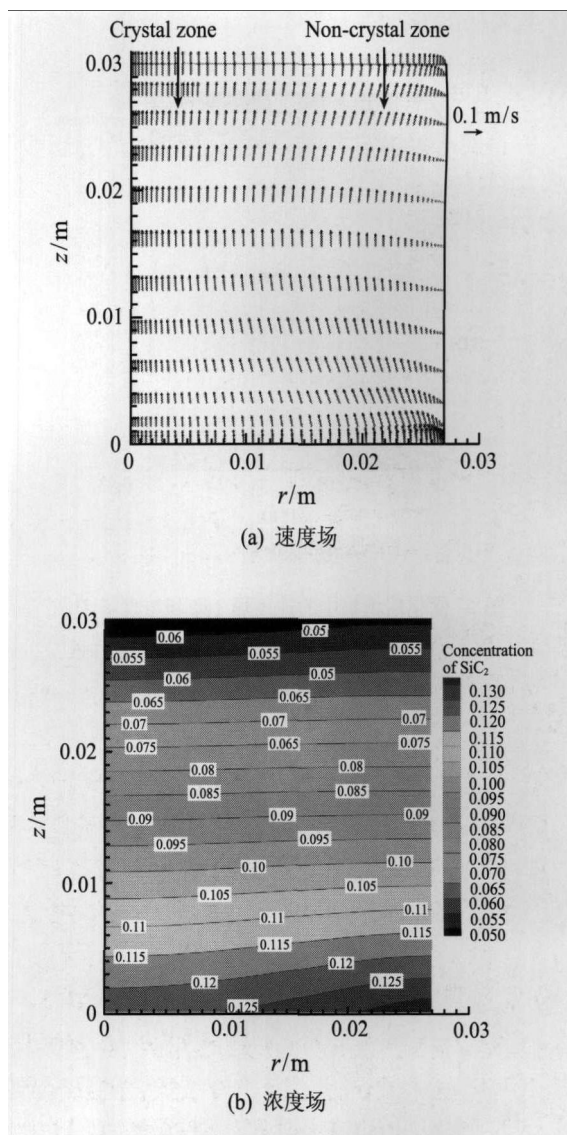


图 2 优化前坩埚中的速度场和浓度场

Fig. 2 Flow field and concentration field before optimization

图 3 为改变坩埚内部参数设计以后生长室内的速度场及浓度场, 在非晶体区, 速度矢量 \vec{u} 和浓度梯度 ∇c 夹角显著变大且速度明显变小, 这个区域的 SiC 晶体生长速度将得到有效抑制。通过优化设

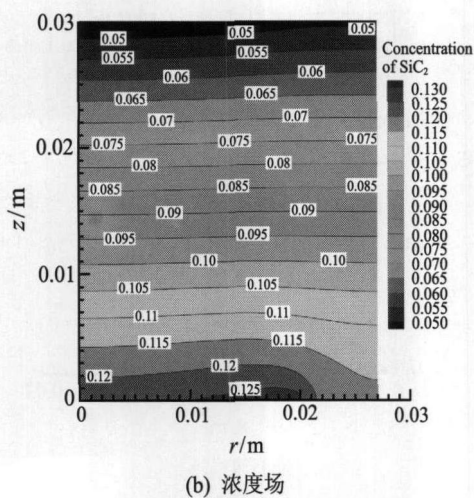
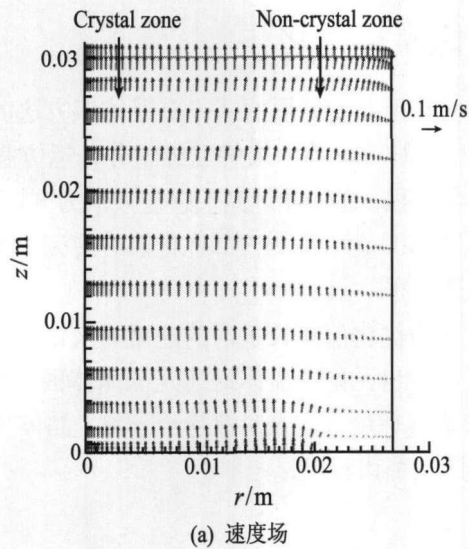


图 3 优化后坩埚中的速度场 (a) 和浓度场 (b)

Fig. 3 (a) Flow field and (b) concentration field after optimization

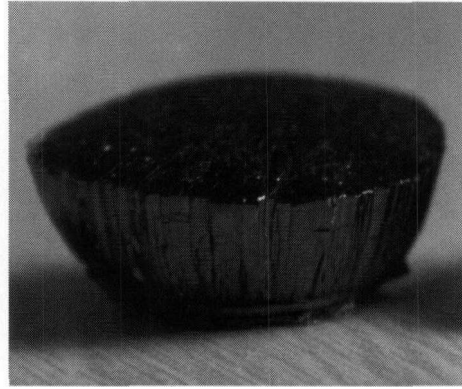


图 4 优化后实验室生长的 SiC 单晶

Fig. 4 SiC crystal after optimization

计, SiC 晶体生长的成功率从优化前的 30% 以下提高到 90% 左右。图 4 为优化设计后实验室生长得到的 SiC 单晶。

4 结 论

在 SiC 晶体 PVT 生长中, 引入了场协同原理, 通过调节石墨坩埚内部参数设计, 对生长室内的流场浓度场等进行了优化, 在非晶体区显著降低了 SiC 晶体生长的速度, 抑制了多晶的生长。在该理论的指导下, 实验室 SiC 单晶的生长成功率大幅度提高。

参 考 文 献

- [1] CHEN Q S, ZHANG H, Prasad V. Heat Transfer and Kinetics of Bulk Growth of Silicon Carbide [J]. Journal of Crystal Growth, 2001, 230: 239-246
- [2] LU Jing, ZHANG Zibing, CHEN Qisheng, Numerical Simulation of the Flow Field and Concentration Distribution in the Bulk Growth of Silicon Carbide Crystals [J]. Journal of Crystal Growth, 2006, 292: 519-522
- [3] CHEN Q S, YAN J Y, Prasad V. Application of Flow-kinetics Model to the PVT Growth of SiC Crystals [J]. Journal of Crystal Growth, 2007, 303: 357-361
- [4] GUO Zengyuan. Mechanism and Control of Convective Heat Transfer-Coordination of Velocity and Heat Flow Fields [J]. Chinese Science Bulletin, 2001, 46(7): 596-599