

壁面特性对径向三重流 MOCVD 反应器 壁面温度分布的影响*

刘 勇 聂宇宏[†] 姚寿广

(江苏科技大学机械与动力工程学院, 镇江 212003)

摘要: 分别采用透明体模型、黑体模型、灰体模型、三谱带漫反射模型、三谱带镜反射模型和二谱带模型对石英壁面的辐射特性进行模拟,并结合求解辐射传递方程的谱带区域法模型,计算了不同壁面特性下径向三重流 MOCVD 反应器的壁面温度分布.结果表明,不同的壁面特性模型对 MOCVD 壁面温度的分布有较大影响,其中壁面发射率的影响最大,而透射率的影响较小;在反应器的不同部位,壁面特性模型对温度分布影响的规律不同.

关键词: MOCVD; 石英; 辐射特性; 壁面温度; 影响

PACC: 8115H; 4440

中图分类号: TN304.054

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2007)06-0913-05

1 引言

氮化物半导体材料主要是在金属有机化学气相沉积(MOCVD)反应器内生成的,GaN 就是其中的代表.GaN 在 MOCVD 内的生长温度在 1300K 左右,而最佳的生长温度为 $1300 \pm 20\text{K}$.在最佳生长温度附近对 GaN 的物理和化学形态的研究引起了研究者的广泛关注.自上世纪 80 年代以来,国外科研人员利用计算机数值模拟和光学测量等方法,对 MOCVD 反应器内部流场、温场、浓度场的分布与外部参数的关系进行了大量的研究,获得了反应器内部输运过程的初步图像^[1~4].但迄今为止,在数值计算中常采用等温与绝热模型,也就是均不考虑辐射换热的影响.但在 MOCVD 反应器内,壁面温度对于确定气体流动和化学反应起着重要的作用,所以壁面温度的准确模拟是获得准确温度分布的重要因素之一.研究表明,壁面热辐射的边界条件对反应器内温度场和速度场产生很大影响^[5].国内外已有研究者注意到了辐射对 MOCVD 反应器内流动及温度分布的影响^[6~9],但研究多是对于较为简单的水平式 MOCVD 反应器进行的.

石英被广泛用于 MOCVD 反应器的壁面,石英壁对辐射的发射和吸收具有选择性,对辐射能的反射是镜面反射,为了准确计算 MOCVD 反应器内的温度分布,就必须考虑石英壁复杂的壁面特性.本文首先分析了描述石英壁面辐射特性的各种模型,并

将这些模型与壁面间的辐射换热模型相结合,计算了在不同壁面特性下,径向三重流 MOCVD 反应器的壁面温度分布,为进一步更为准确地模拟 MOCVD 反应器内的温度、流动、浓度等的分布提供依据.

2 石英壁辐射特性模型

石英的辐射特性为吸收和发射的光谱性以及镜面反射,不同温度下石英壁的辐射特性如图 1 所示^[8].从图中可以看到,随温度的升高,石英壁的吸收点前移,也就是 $3 \sim 5\mu\text{m}$ 带内的吸收加强,但变化量较小.

到目前为止,主要有四种类型的石英壁面辐射特性模型用于 MOCVD 反应器内的辐射换热计算^[9],即黑体模型、灰体模型、透明体模型以及谱带模型.黑体模型将石英壁面视为黑体,其吸收率 α 与发射率(黑度) ϵ 均为 1,即 $\epsilon = \alpha = 1$;灰体模型将石英壁面视为灰体,其吸收率与发射率为一定值,如 $\epsilon = \alpha = 0.5$;透明体模型将石英壁视为透明体,即 $\epsilon = \alpha = 0$.由图 1 可知,由于石英壁对辐射的吸收和发射是随光谱而变的,上述三种模型均不能正确地模拟石英壁的辐射特性,较为准确的模型应该是谱带模型.

谱带模型分为二谱带模型和三谱带模型.二谱带模型认为^[6],在 $3 \sim 5\mu\text{m}$ 波长范围内,石英的透射率由 0.94 迅速地降为 0,所以,将石英的光谱吸收特性分为两个带,当 $\lambda \leq 4\mu\text{m}$ 时, $\epsilon = \alpha = 0$,透射率 τ

* 江苏省教育厅高校自然科学指导性计划基金资助项目(批准号:03KJD140022)

[†] 通信作者,Email: nicyh2003@yahoo.com.cn

2006-11-23 收到,2007-01-04 定稿

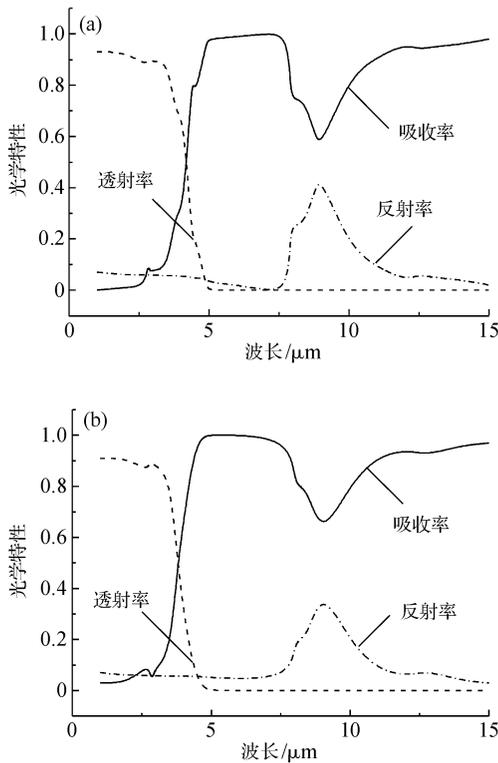


图1 不同温度下石英壁的光学特性(壁厚=2mm) (a) $T = 293\text{K}$; (b) $T = 1073\text{K}$

Fig.1 Optical properties of quartz wall under different temperatures (thickness = 2mm) (a) $T = 293\text{K}$; (b) $T = 1073\text{K}$

$= 0.94$, 反射率 $r = 0.06$; 当 $\lambda > 4\mu\text{m}$ 时, $\epsilon = \alpha = 0.94$, $\tau = 0$, $r = 0.06$ 。

根据图1,三谱带模型认为,石英壁对辐射的吸收主要有三个谱带,各带的辐射特性列于表1^[6]。

石英对投入其上的辐射是镜面反射的,但在封闭空间内,通常产生广泛的多向反射,这样,每一反射的方向就不是很重要了,通常可以将石英壁的反射视为漫反射^[5]。表1同时给出了石英壁在镜反射和漫反射时各谱带的辐射特性。

3 壁面温度计算模型

MOCVD 反应器中的气体是较稀薄的,此时气体对热辐射的吸收以及自身发射的辐射可以忽略。在不考虑介质参与辐射的 MOCVD 反应器内,气体

表1 2mm 石英壁面的辐射特性

Table 1 Radiation properties for the 2mm quartz wall

谱带	波长/ μm	镜反射		漫反射	
		ϵ	r	ϵ	r
1	0~3.5	0.05	0.14	0.14	0.35
2	3.5~4.5	0.65	0.095	0.83	0.095
3	4.5以上	0.914	0.086	0.914	0.086

稀薄,流速较慢,与气体传导和对流换热相比,壁面获得的热流量主要是表面间辐射换热^[5],而反应器的外壁面通过对流和辐射向外界放热,这样,壁面的热平衡方程即为

$$h(T_a - T) + q_{\text{net},k} = 0 \quad (1)$$

式中 h 为表面换热系数; T 为壁面温度; T_a 为环境温度; $q_{\text{net},k}$ 为第 k 微元表面的净辐射热流密度。

为了与求解反应器内部输运过程的数值模拟相耦合,将反应器的壁面划分为 k 个网格,每一个网格称作一个微元。反应器的壁面一般较薄,可以不考虑内、外壁面因温度不同而引起的辐射特性变化,则第 k 个微元壁面的净辐射热流密度可以简写为^[11]

$$q_{\text{net},k} = \epsilon_k (q_{i,k}^{\text{in}} - 2\sigma T_k^4 + \sigma T_a^4) \quad (2)$$

式中 σ 为 Stefan-Boltzmann 常数; $q_{i,k}^{\text{in}}$ 为第 k 微元表面在 MOCVD 反应器内部所得到的净辐射热流密度,用区域法中辐射全交换面积的概念,可以准确而方便地将 $q_{i,k}^{\text{in}}$ 表达出来。

区域法(zone method,也译作段法)是将非等温的封闭空间,划分为若干个基本上可认为是等温的气体段和边界表面段,并分别列出每一段的能量平衡方程,所有的段能量平衡方程联立组成段能量平衡方程组,其矩阵形式为

$$\mathbf{AT} + \mathbf{BT} + \mathbf{C} = 0 \quad (3)$$

式中 T 为待求的温度向量;系数矩阵 \mathbf{A} 由各段间辐射全交换面确定,也就是(2)式中的 $q_{i,k}^{\text{in}}$;系数矩阵 \mathbf{B} 由气体段与相邻表面段间的对流换热系数确定,列向量 \mathbf{C} 为常数项。

采用谱带模型描述石英壁的辐射特性时,整个辐射光谱被分为 n 个谱带(对于本文所采用的模型, $n=2$ 或 3),对于每一谱带,很容易得到(2)式,每一谱带 n 下第 k 个微元壁面的净辐射热流密度即为

$$q_{\text{net},k,n} = \epsilon_{k,n} (q_{i,k,n}^{\text{in}} - 2\sigma T_{k,n}^4 + \sigma T_{a,n}^4) \quad (4)$$

而总的净辐射热流量为各谱带热流量的和

$$q_{\text{net},k} = \sum F_n(\lambda_{\min}, \lambda_{\max}) q_{\text{net},k,n} \quad (5)$$

式中 $F_n(\lambda_{\min}, \lambda_{\max})$ 是黑体辐射函数^[10]。

将(5)式以及 \mathbf{B} 和 \mathbf{C} 的数据代入(3)式,就可求解壁面的温度分布,其思路可参阅文献[11]。

4 壁面特性对径向三重流 MOCVD 反应器内壁面温度分布的影响

4.1 径向三重流 MOCVD 结构及计算区域

应用上述方法,计算文献[3]所示的径向三重流 MOCVD 的壁面温度,其结构如图2所示,尺寸为文献[3]中所列的标准值。该反应器是中心对称的,

可作为二维问题处理,为叙述方便,将反应器的壁面分为上壁面和侧壁面,二维计算区域的示意图如图 3 所示.

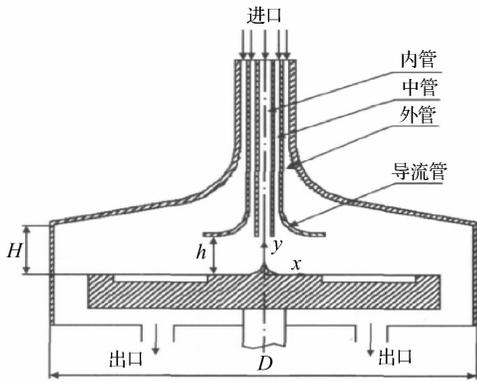


图 2 径向三重流 MOCVD 反应器示意图

Fig.2 Schematic of a radial flow MOCVD reactor with three-separate inlets

4.2 计算结果及分析

被加热的高温石墨衬底的温度取为 1300K,黑度为 0.78,上壁面和侧壁面为石英壁,处于自然对流的环境中,按大空间自然对流实验关联式^[10]计算得到平均的表面换热系数为 $h = 4.13 \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$,环境温度设为 $T_a = 300 \text{ K}$.分别对石英的壁面采用:(1)透明体模型,(2)黑体模型,(3)灰体模型($\epsilon = 0.87$),(4)三谱带漫反射模型,(5)三谱带镜反射模型,(6)二谱带模型,以下各图中的编号即为这 6 种模型的编号.壁面温度的计算结果示于图 4 和 5。

图 4 和 5 分别为用不同壁面特性模型计算得到的侧壁面和上壁面的温度分布.从图中可以看到,用不同的壁面特性模型,所得的温度分布不同,透明体模型和黑体模型的结果相差最大,而其余四种模型的结果比较接近,透明体模型不能用于计算 MOCVD 反应器的壁面温度分布.二谱带模型和三谱带模型的结果更为接近,这是由于在本文所模拟的反应器的温度范围内,三谱带模型中的第一个谱带(表 1 中编号为 1 的谱带)对辐射的吸收较弱,而对于文献[6]中壁面温度较高的水平反应器,三谱带模型计算所得的壁面温度与二谱带模型相比,差别较大.从图中还可以看到,编号为 4 和 5 的三谱带模型的计算结果相差很小,最大相对误差不到 0.1%,

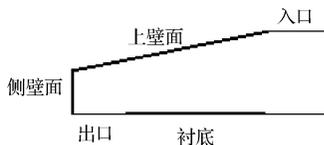


图 3 二维计算区域示意图

Fig.3 Schematic of simulation field

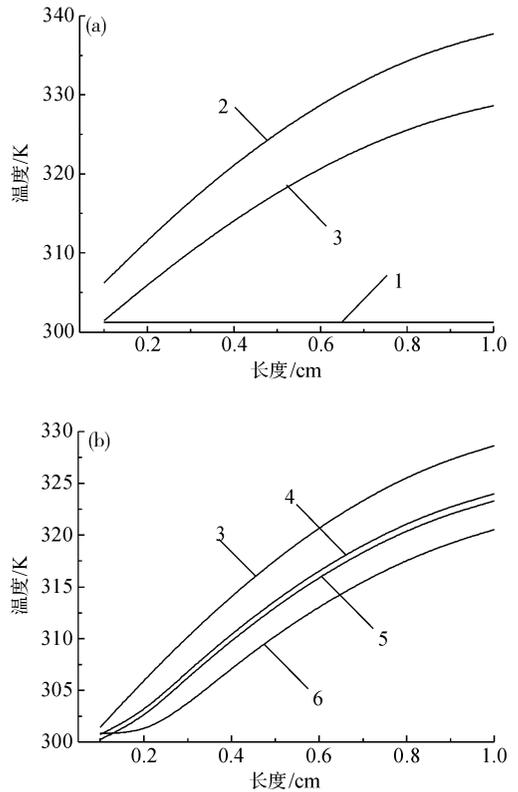


图 4 不同壁面特性下侧壁面温度分布
Fig.4 Temperature distribution of side wall

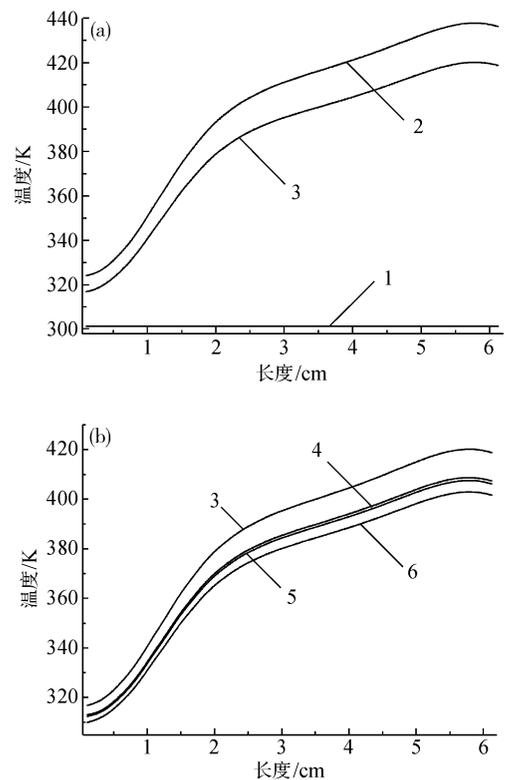


图 5 不同壁面特性下上壁面温度分布
Fig.5 Temperature distribution of top wall

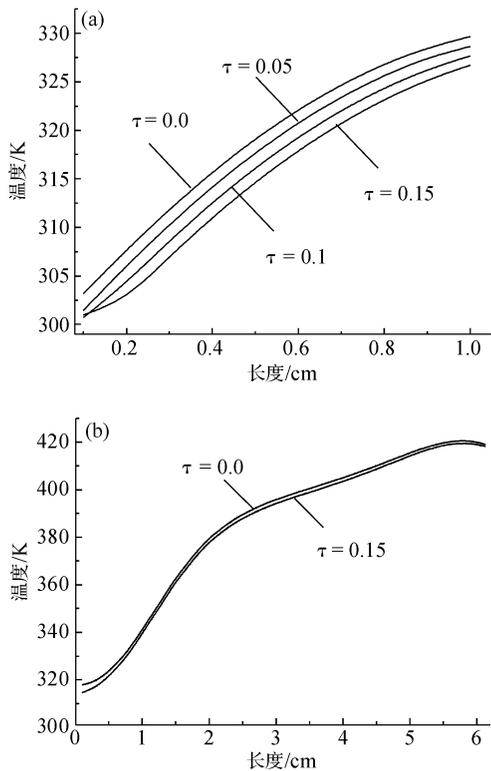


图 6 透射率对壁面温度分布的影响 (a)侧壁面;(b)上壁面
Fig.6 Influence of transmissivity on temperature distribution of the wall (a)Side wall;(b)Top wall

这表明,将石英壁视为漫反射壁面,对计算结果几乎没有影响.与三谱带镜反射模型相比,用黑体模型计算得到的侧壁面温度的最大相对误差为 4.33%;用灰体模型计算得到的侧壁面温度的最大相对误差为 1.55%;用二谱带模型计算得到的侧壁面温度的最大相对误差为 0.9%.而对于上壁面的温度,以上这三种模型的相对误差分别为 7.1%, 2.78% 和 1.47%,这表明,不同壁面特性模型对上壁面温度分布的影响更明显.

为了进一步讨论壁面的其他辐射特性对石英壁温度分布的影响,图 6 给出了 $\epsilon = 0.87$ 时,不同壁面透射率下侧壁面和上壁面的温度分布.从图中可以看到,对于侧壁面,透射率对温度分布略有影响;而对于上壁面,透射率的变化对温度分布几乎没有影响.所以,黑度是影响壁面温度分布的主要因素.

5 结论

(1)对于本文所模拟的径向三重流 MOCVD 反应器,采用不同的石英壁面特性模型,计算所得的壁面温度分布有所不同.透明体模型不能用于计算壁面的温度分布,黑体模型的误差也较大,而其余的四种模型都可以较好地模拟壁面的温度分布.

(2)灰体模型、二谱带模型的计算结果与三谱带模型相比,相差较小,其中灰体模型的最大相对误差为 7.1%,发生在上壁面.这表明,不同的壁面特性模型对上壁面温度分布的影响更大.

(3)三谱带镜反射模型和三谱带漫反射模型的计算结果非常接近,表明在封闭空间内,通常产生广泛的多向反射,每一反射的方向就不是很重要了,可以将石英壁的反视为漫反射.

(3)透射率对壁面温度的分布几乎没有影响.

参考文献

- [1] Chiu W K S, Jaluria Y, Glumac N G. Numerical simulation of chemical vapor deposition processes under variable and constant property approximations. *Numerical Heat Transfer, Part A*, 2000, 37: 113
- [2] Zuo Ran, Zhang Hong. Numerical study of convective eddy in a planet chemical vapor deposition reactor. *Journal of Engineering Thermophysics*, 2005, 26(4): 671 (in Chinese) [左然, 张红. 行星式化学气体沉积反应器内对流涡旋的数值模拟研究. *工程热物理学报*, 2005, 26(4): 671]
- [3] Zuo Ran, Zhang Hong, Liu Xianglin. Numerical study of transport phenomena in a radial flow MOCVD reactor with three-separate vertical inlets. *Chinese Journal of Semiconductors*, 2005, 26(5): 977 (in Chinese) [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. *半导体学报*, 2005, 26(5): 977]
- [4] Park K W, Pak H Y. Characteristics of three dimensional flow, heat and mass transfer in a chemical vapor deposition reactor. *Numerical Heat Transfer, Part A*, 2000, 37: 407
- [5] Chinoy P B, Kaminshi D A, Ghandi S K. Effects of thermal radiation on momentum heat and mass transfer in a horizontal chemical vapor deposition reactor. *Numerical Heat Transfer, Part A*, 1991, 19: 85
- [6] Ladinski L, Makarov Y N, Schafer M, et al. Development of advanced mathematical models for numerical calculations of radiative heat transfer in metalorganic chemical vapour deposition reactors. *J Cryst Growth*, 1995, 146: 209
- [7] Durst F, Kadinski, Schafer M. A multigrad solver for fluid flow and mass transfer coupled with grey-body surface radiation for the numerical simulation of chemical vapor deposition processes. *J Cryst Growth*, 1995, 146: 202
- [8] Hiroko A, Ohkawa K. Effect of thermal radiation and absorption in GaN-MOVPE growth modeling on temperature distribution and chemical state. *J Cryst Growth*, 2005, 276: 57
- [9] Bergunde T, Dauelsberg M, Kadinski L, et al. Process optimization of MOVPE growth by numerical modeling of transport phenomena including thermal radiation. *J Cryst Growth*, 1997, 180: 660
- [10] Yang Shiming, Tao Wenquan. *Heat transfer*. 3rd ed. Beijing: Higher Education Press, 1998 (in Chinese) [杨世铭, 陶文铨. *传热学*. 第三版. 北京: 高等教育出版社, 1998]
- [11] Nie Yuhong, Liu Yong, Yao Shouguang. Wall temperature simulation of a radial flow MOCVD reactor with three-separate vertical inlets. *Chinese Journal of Semiconductors*, 2007, 28(1): 127 (in Chinese) [聂宇宏, 刘勇, 姚寿广. 径向三重流 MOCVD 反应器壁面温度的数值模拟. *半导体学报*, 2007, 28(1): 127]

Influence of Wall Properties on Wall Temperature of a Radial Flow MOCVD Reactor with Three Separate Vertical Inlets*

Liu Yong, Nie Yuhong[†], and Yao Shouguang

(School of Mechanical & Power Engineering, Jiangsu University of Science and Technology, Zhenjiang 212003, China)

Abstract: Quartz is widely used as the wall of MOCVD reactors. We compared numerical simulations performed by six different models of the quartz emissivity, transmissivity and reflectivity. The models include the transparent-body model, a black body model, a gray body model, a three-band specular reflective model, a three-band diffusive reflective model, and a two-band model. These models are combined with the zone method to simulate wall temperature distribution in the MOCVD reactor with three separate vertical inlets. Results show that the temperature distributions of a quartz wall are largely influenced by the wall properties, in which the wall emissivity is the largest, and the wall transmissivity is the smallest. The rule of wall temperature distributions differs for different walls.

Key words: MOCVD; quartz; radiative properties; wall temperature; influence

PACC: 8115H; 4440

Article ID: 0253-4177(2007)06-0913-05

* Project supported by the Directional Foundation for Natural Science of the Higher Schools of the Department of Education of Jiangsu Province(No. 03KJD140022)

[†] Corresponding author. Email: nieyh2003@yahoo.com.cn

Received 23 November 2006, revised manuscript received 4 January 2007

©2007 Chinese Institute of Electronics