

GaN-MOCVD 设备反应室流场的 CFD 数值仿真*

刘 奕 陈海昕 符 松

(清华大学工程力学系, 北京 100084)

摘要: 采用计算流体力学方法对生长半导体材料 GaN 的重要设备 MOCVD(金属有机物化学气相沉积)反应室中的流场结构进行了三维数值仿真. 数值模拟采用基于非交错网格系统的 SIMPLE 算法, 用有限体积方法对控制方程进行离散, 并采用改进的压力-速度耦合方法进行求解. 数值仿真给出了具有复杂几何结构和运动方式的 GaN-MOCVD 反应室中的流场结构, 研究了改变几何尺寸和运行参数对 MOCVD 反应室流场结构的影响, 对正在试制开发中的 MOCVD 设备的几何结构的改进和运行参数的优化提出了指导性建议.

关键词: CFD; GaN; MOCVD; 数值仿真

PACC: 4700; 7360F

中图分类号: O35

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2004)12-1639-08

1 引言

GaN 是一种重要的 III-V 族化合物半导体材料, 它具有极其优良的光学、电学、热力学特性^[1,2]: 禁带宽度宽(3.4eV), 能在波长 370nm 处有效发光, 通过掺杂, 可以产生红色直至紫色的可见光; 电导率和热导率高; 硬度高(接近蓝宝石); 分解温度高(1000℃以上); 化学稳定性好(几乎不被任何酸腐蚀). 由于上述特性, GaN 材料在高温大功率微电子器件、蓝绿和紫色发光器件、信息显示存储和读取、耐磨光学仪器、LED 产业等领域有着广阔的应用前景. 因此 GaN 制备和器件开发已经成为世界范围的研究热点^[3,4].

GaN 材料外延生长的方法^[5]主要有气相外延(HVPE)、分子束外延(GSMBE)、金属有机物化学气相沉积(MOCVD)三种. 其中, MOCVD 是当今最先进、最重要的 GaN 材料和器件大批量制备技术之一, 其基本原理是将气态的金属有机物三甲基镓(TMGa)稀释于输运气流中注入反应室内. 在被加热的高温基座上的载片表面, TMGa 和 NH₃ 发生反应, 沉积形成厚度从几纳米到几微米的晶体定向生长层薄膜. MOCVD 技术面临的最大挑战在于如何

精确控制大面积载片表面上沉积层的厚度均匀性和组分一致性, 保证产品的重复性以及如何在复杂的大批量生产环境下获得较高的生产效率. 为了抑制生长 GaN 的反应物 TMGa 与 NH₃ 的寄生反应, 反应物一般都是在进入反应室后才开始混合^[6], 这就使反应室内的流动存在强烈的剪切与混合. 反应物气体的混合、加热以及在气体与壁面形成的附面层中发生化学反应和沉积, 这些过程均涉及大量复杂的流体力学机理和现象. 此外, 对于化学反应和薄膜沉积而言, 由 Arrhenius 定律可知, 化学反应速率随温度升高呈指数倍增大. 对于低温生产条件而言, 化学反应速率较慢, 晶体薄膜层的均匀性主要依赖于基座温度的均匀, GaAs 的生产就是此例. 然而, 对于高温生产条件的 GaN 而言, 化学反应速率极快, 晶体薄膜的生长和均匀程度更多地依赖于反应物的输运, 也即依赖于流动条件. 因此, 研究反应室内的热浮力效应、旋涡、混合这些流体力学现象的发生机理及其对 MOCVD 设备运行状况和产物生成的影响, 提出改善流场条件的控制手段, 对于 GaN-MOCVD 设备反应室的结构设计和优化运行都是非常关键的.

国际上, 计算流体力学(CFD)仿真已经成为开发 MOCVD 设备必不可少的辅助手段. 世界上几乎

* 国家自然科学基金(批准号: 10232020), 国家重点基础研究专项经费(批准号: 2001CB409600), 国家高技术研究发展计划(批准号: 2002AA311240)资助项目

2003-12-09 收到, 2004-04-27 定稿

©2004 中国电子学会

所有的半导体设备厂商,都拥有自己专门的 CFD 数值仿真部门,在研究、理解和改进反应室设计,缩短设计周期,降低设计费用等方面发挥着巨大的作用.多种复杂结构的新型 MOCVD 设备的开发都是在 CFD 数值仿真的结果上进行的.三维 MOCVD 反应室真实流场的模拟已经受到研究者日益广泛的关注^[7-9].具有专利技术的紧凑喷淋式 MOCVD 设备的开发和改进就是 CFD 仿真在这一领域的成功范例^[10].

国内对于 MOCVD 设备数值仿真的研究近年来也一直呈升温趋势,开展了大量对 MOCVD 反应室的二维数值仿真研究,如对卧式反应室内的涡旋分布的模拟^[11],对 MOCVD 过程中回流现象的数值研究^[12],对不同几何结构和运行参数的 MOCVD 反应室内的流场的数值模拟^[13,14]等.但随着 MOCVD 设备的不断进步,反应室几何形状和内部流场日趋复杂,例如当前普遍采用的行星式结构,载片在随基座公转的同时自转,反应室内的流场结构非常复杂,简单的二维模拟已经不能满足具有复杂几何形状和运动方式的现代 MOCVD 设备的仿真要求.基于此,国家已决定在光电子领域 863 项目中将 MOCVD 设备的制造和 CFD 数值仿真系统的研究进行捆绑开发.本文工作即是以现有模型设计为背景,对某 MOCVD 反应室的三维流场进行数值仿真研究.

2 数值方法

2.1 MOCVD 反应室的流体力学特征

MOCVD 反应室内的流动具有如下流体力学特征:反应室内气流速度很低, Reynolds 数较低(1~100),流动主要呈现层流状态;除某些超低压反应室外,气体基本适用连续流体假设^[14-16];MO 源气流占载体气流的比例大约为 1% 的量级,可以认为 MO 源组分的变化不致影响载体气流的流动和传热.

从计算流体力学的角度看,反应室内的流动具有如下特征:

(1) 热浮力效应明显.对反应室内与流动相互耦合的热环境的准确预测是反应室模拟的关键.为保证沉积反应集中发生在载片上而不是反应室其他壁面上,以减少反应物的消耗和对反应室的污染,其他

壁面的温度必须控制在较低的水平.这使得反应室内存在很大的温度梯度,热浮力效应十分强烈,对于流动稳定性、旋涡生成等有重要影响.

(2) 流动条件复杂.为改善晶体生长的均匀性,现代 MOCVD 反应室常采用旋转基座设计,多个载片被放置在旋转的基座上,类似行星运动,每一载片在随基座公转的同时也在进行自转.更为复杂的反应室甚至包含多重的公转/自转运动.这些对 CFD 模拟提出了网格生成、运动边界、坐标转换等一系列难题.

2.2 CFD 仿真的控制方程

为了适应复杂几何边界的流动条件,数值仿真采用一般曲线坐标系 x_i ($i=1, 2, 3$).但速度分量仍采用笛卡儿坐标系下的分量形式.计算采用基于非交错网格系统的 SIMPLE 算法,并采用有限体积方法进行离散,所有求解量均存储于各网格单元中心点,如图 1 所示,有限单元体积的中心记为 P,其左、右、上、下四周相邻体积的中心分别记为 W, E, N, S.由于 SIMPLE 算法采用压力-速度分离式求解法,非交错网格的使用会引起非物理的压力波动,本文采用了 Rhie & Chow^[17]提出的改进的压力-速度耦合方法,有效地解决了这一问题.

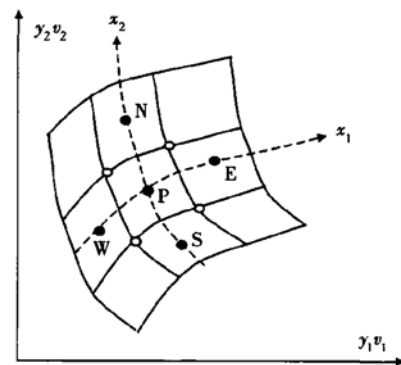


图 1 计算网格示意图

Fig. 1 Schematic diagram of the meshes

MOCVD 反应室内的流动为不可压、层流定常流动,其三维控制方程为:

连续性方程:

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial x_j} = 0 \quad (1)$$

动量方程:

$$\frac{\partial \rho u_i u_i}{\partial x_j} = - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] + \rho g_i \quad (2)$$

组分方程:

$$\frac{\partial \rho Y_s u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\mu}{Sc} \times \frac{\partial Y_s}{\partial x_j} \right] \quad (3)$$

能量方程:

$$\frac{\partial \rho c_p T u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\mu c_p}{Pr} \times \frac{\partial T}{\partial x_j} \right] \quad (4)$$

状态方程:

$$\rho = \frac{p_b}{RT \sum Y_s / M_s} \quad (5)$$

其中 μ 为分子粘性; p_b 为环境压力, $p_b = 1.0135 \times 10^5 \text{ Pa}$; M_s 为 s 组分的摩尔质量; Y_s 为 s 组分的质量分数; R 为通用气体常数; 施密特数 Sc 和普朗特数 Pr 在计算中取值为 $Sc = Pr = 0.70$.

2.3 数值模拟的边界条件

不可压流动控制方程的椭圆型性质要求数值计算给出计算域的所有边界条件, 具体地, 对于进口、出口、对称面、固壁分别给出如下边界条件:

进口: 采用 Dirichlet 边界条件, 即给定所有待求解量的数值. 压力由内场外插获得.

出口: 采用 Von Neumann 边界条件, 即 $\partial \phi / \partial n = 0$, n 为出口界面法向分量. 采用进出口总量修正法进行计算加速及速度修正.

对称面: 垂直于对称面的速度分量为 0, 其余变量 $\partial \phi / \partial n = 0$, n 为对称面的法向分量.

固壁: 采用无滑移边界条件.

3 行星式 MOCVD 反应室的数值仿真

本文模拟的行星式 MOCVD 反应室基本结构如图 2 所示. 入流气体分别从同轴圆管组成的三层通道进入反应器, 内层通 H_2 携带 MO 源, 中层通 NH_3 , 外层通 N_2 . 三层套管出口为扩张形, 出口与基座表面的间距记为 DL , 为方便表述下文中将其简称为间距. 基座附有三个圆形载片并采用加热设备加温.

3.1 设备几何形状对流场结构的影响

反应室的几何形状对流场结构有重要影响, 几何参数的确定是反应室设计的重要前提. 本文数值模拟研究的反应室是中国科学院半导体研究所提供的初步设计方案, 该方案中间距 DL 是关键几何

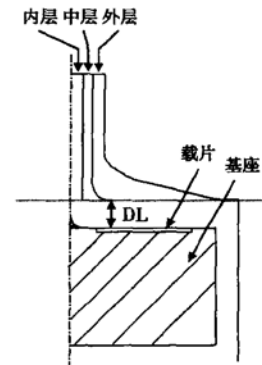


图 2 MOCVD 设备结构示意图

Fig. 2 Schematic diagram of MOCVD reactor

参数, 因此本文的第一步模拟工作主要针对几何结构进行, 考察间距 DL 对流场结构的影响趋势, 分析优化方向.

生长 GaN 材料的典型条件如下^[2]:

NH_3 : 3L/min;

TMGa: 20 $\mu\text{mol}/\text{min}$, $V/\text{III} = 6500$;

N_2 : 3~4L/min;

H_2 : < 1L/min.

数值模拟采用该条件作为计算参数, 即内层流量 1.0L/min; 中层流量 3.0L/min; 外层流量 3.0L/min. 图 3 给出了调整间距的模拟结果. 由图 3 可以看出, 在相同的入流条件下, 间距 DL 较小的结构下反应室的流场形态明显好于间距大的情况. 在图 3 (a) 中, 流场中卷起的涡尺寸较小, 载片表面附近的流场流线比较平稳均匀, 这样的流动条件有利于提高反应物沉积的均匀性. 随着间距的增大, 如图 3 (b) 和 (c) 所示, 流场结构明显趋向复杂, 反应室内涡团尺寸增大, 涡旋作用使载片表面流线明显上扬, 对沉积质量将产生负面影响. 因此, 在一定范围内缩小间距将有利于提高沉积质量.

3.2 工作状态下的运行参数

入流流量、转速以及加热温度等运行参数的匹配直接影响 MOCVD 的产品质量. 研究热耦合作用下的流场结构是优化 MOCVD 运行参数的重要前提.

3.2.1 入流流量配比

根据上文计算结果, 较小的间距有利于优化流场结构, 因此, 考察入流流量配比影响的计算采用 $DL = 0.01\text{m}$ 的小间距设备尺寸. 基本计算参数为: 内层通道流量 1.0L/min, 中层通道流量 3.0L/min,

外层通道流量 3.0L/min. 图 4 给出了在保持内层和外层流量不变, 增大中层气体入流流量的计算结果. 可以看出, 中层流量的增大使涡团卷起的位置沿径向向远离圆心的位置偏移, 涡团的尺寸也明显增大. 从流体力学的角度而言, 三层套管的结构实际上在出口处形成了两个同心混合层. 混合层中流体的剪切、卷吸以及它们的耦合作用是最终形成反应室内流场结构的关键因素. 在本文的计算工况中, 中层和

外层的气体流量虽然相同, 但外层通道几何结构上的张角使外层气体流速大大降低. 相对来说, 中层通道的气流速度占主导地位. 由图 4 可以看出, 随着中层流量的增大, 对外层气体的卷吸力明显增大, 涡旋被拖曳向半径外侧方向. 同时半径外侧反应室内空间增大, 涡团的尺寸也明显增大. 较大的中层气体流量也对内层气流形成较大的卷吸, 使载片表面流线上扬.

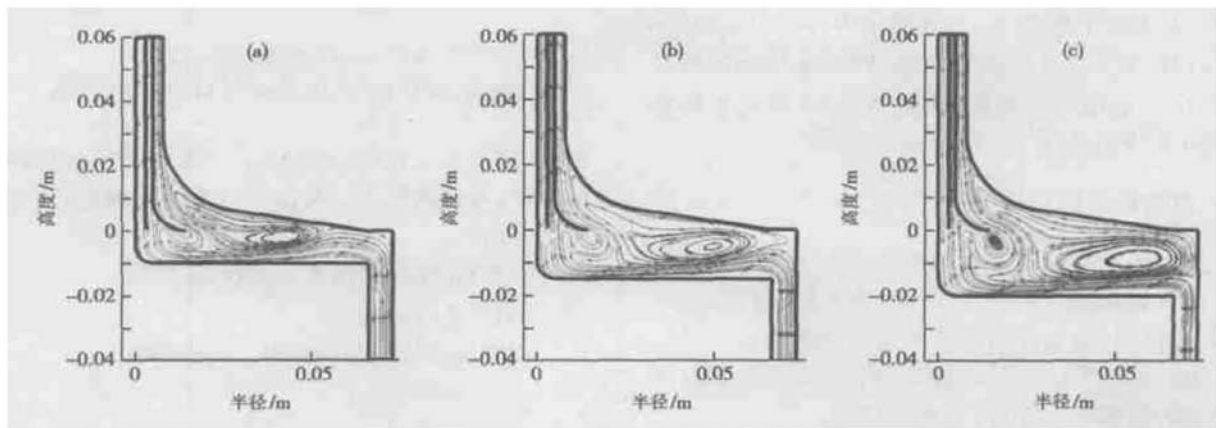


图 3 间距调整的效果对照 (a) DL= 0.010m; (b) DL= 0.015m; (c) DL= 0.020m

Fig. 3 Effect of distance DL (a) DL= 0.010m; (b) DL= 0.015m; (c) DL= 0.020m

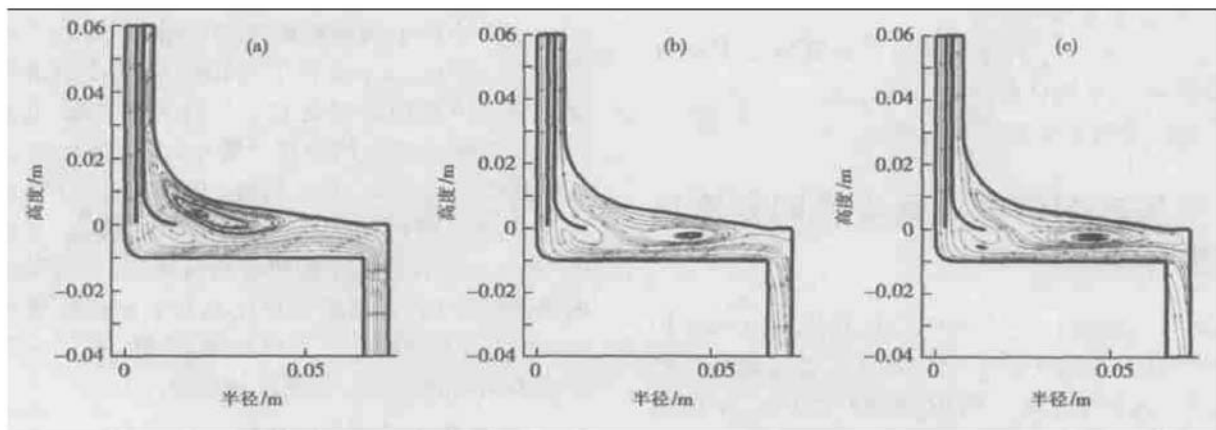


图 4 不同流量配比的效果对照(内层流量 1.0L/min, 外层流量 3.0L/min) (a) 中层流量: 2.0L/min; (b) 中层流量: 4.0L/min; (c) 中层流量: 7.0L/min

Fig. 4 Effect of inlet flux ratio (Inner inlet flux: 1.0L/min, outer inlet flux: 3.0L/min⁻¹) (a) Middle inlet flux: 2.0L/min; (b) Middle inlet flux: 4.0L/min; (c) Middle inlet flux: 7.0L/min

3.2.2 转速

高的反应气体的利用率和高度的沉积薄膜的均匀性(厚度均匀和组成均匀)是 MOCVD 设备生产的重要性能指标. 为了提高产品质量, 当前的大多数的先进 MOCVD 设备都采用旋转圆盘以及如上文所述具有公转和自转的行星式运动方式以提高沉积

薄膜的均匀性. 对于这一类的 MOCVD 设备, 在一定的工作温度下, 不同的公转和自转速度对于流场结构有重要影响. 采用数值仿真技术对运行参数进行优化可以大大降低设备调试和运行的成本.

首先考察基座旋转对流场的影响, 基本计算参数仍采用如前相同的工况: 内层通道流量

1.0L/min, 中层通道流量 3.0L/min, 外层通道流量 3.0L/min; DL= 0.01m. 图 5 给出了上述工况下基座转速分别为 20, 40 和 60r/min 的流场计算结果. 由图 5 可以看出, 首先, 在中层通道的末端, 由于几何结构上具有张角的形状, 流线在这一位置会向上折回再流出, 进入基座表面的近壁区域, 这与该设计希望外层流体沿上壁面流动形成气体保护膜的内衷相背. 其次, 外层通道的扩张形出口使流动在该处发生分离, 形成回流区涡团. 第三, 旋转产生离心力, 旋转速度的增大使离心力作用增强, 反应室内流体被沿径向朝外推出, 涡团尺寸沿径向增大, 且位置趋向半径外侧, 同时抑制了基座表面附近流体的上扬. 从图 5 可以清楚地看出, 转速的增大使基座表面流体趋向平直, 这将有利于提高沉积的均匀性.

其次, 考察载片旋转对流场的影响, 计算参数如前: 内层通道流量 1.0L/min, 中层通道流量 3.0L/min, 外层通道流量 3.0L/min; DL= 0.01m. 图 6 给出了上述工况下载片转速分别为 50, 100 和 150r/min 的流场计算结果. 由图 6 可以看出, 载片旋转会使基座表面附近的流场诱发出旋涡, 且随着载片转速的增大, 涡团沿半径和高度方向的尺寸都迅速增大. 同时在反应室的两处几何结构存在扩张形状的位置(中层和外层出口), 都诱发出较大的回流涡. 流场结构明显复杂和混乱, 对于晶体薄膜的沉积会产生严重的负面影响. 根据上文分析, 增大基座转速能够使涡团位置外移并能有效平稳流场, 因此, 对于载片转速较高的情况应选取相应较大的基座转速, 以达到平稳流场的效果.

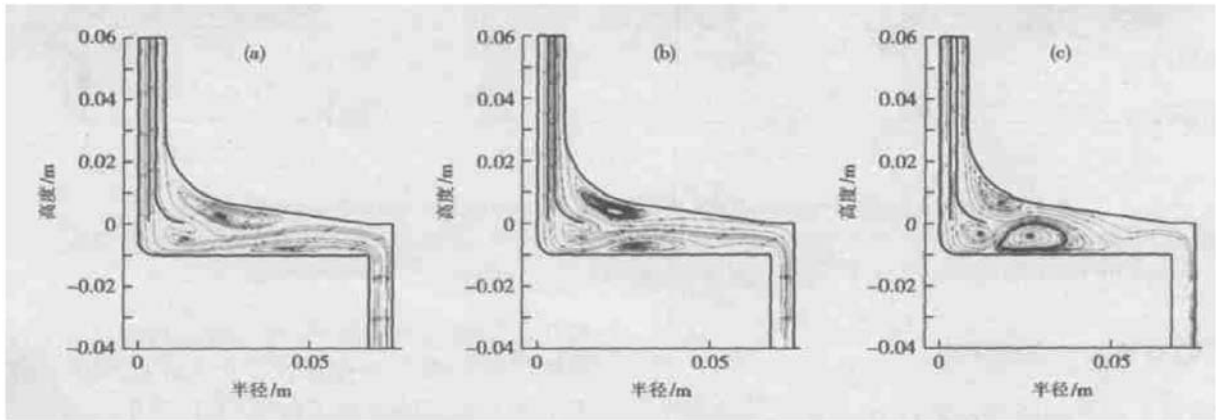


图 5 基座转速对流场的影响 (a) 基座转速 20r/min; (b) 基座转速 40r/min; (c) 基座转速 60r/min

Fig. 5 Effect of substrate rotating speed on flow pattern (a) Rotating speed: 20r/min; (b) Rotating speed: 40r/min; (c) Rotating speed: 60r/min

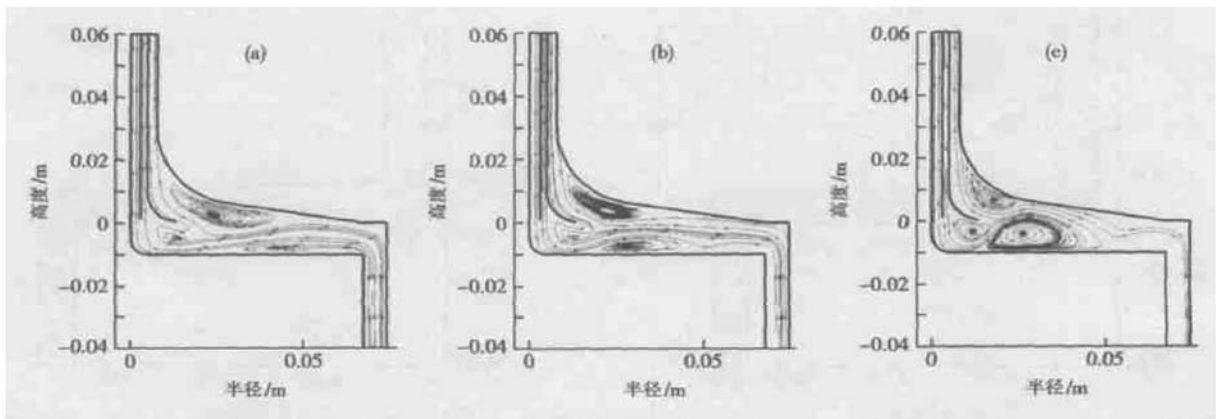


图 6 载片转速对流场的影响 (a) 载片转速 50r/min; (b) 载片转速 100r/min; (c) 载片转速 150r/min

Fig. 6 Effect of wafer rotating speed on flow pattern (a) Rotating speed: 50r/min; (b) Rotating speed: 100r/min; (c) Rotating speed: 150r/min

3.2.3 热力耦合

对于生产 GaN 的 MOCVD 设备而言, 由于 GaN 的生长温度很高(约 1050℃), 因此反应室内的浮力效应十分明显, 热力耦合下的流场呈现复杂的结构. 图 7 给出了基座转速分别为 20, 40 和 60r/min 的热力耦合的流场结构, 计算参数为: 内层通道流量 1.0L/min, 中层通道流量 3.0L/min, 外层通道流量 3.0L/min; DL = 0.01m; 基座温度 1050℃. 由图 7 可以看出, 在热浮力存在的情况下流场结构明

显更为复杂, 反应室内的涡团不是位于外层通道几何扩张的位置, 而是偏向半径外侧. 相信这一涡团产生的主要原因是热浮力诱发的回流. 由图 7 可以发现, 旋转可以明显抑制热浮力作用诱发的流线上扬, 使基座表面流动平直. 然而, 随着旋转速度的增大, 在基座外缘与外壁面之间会诱发旋涡, 引起流场的不稳定, 同时也会影响沉积薄膜的边缘均匀性. 因此, 对于不同的入流流量和工作温度, 选取合适的基座旋转速度是十分重要的.

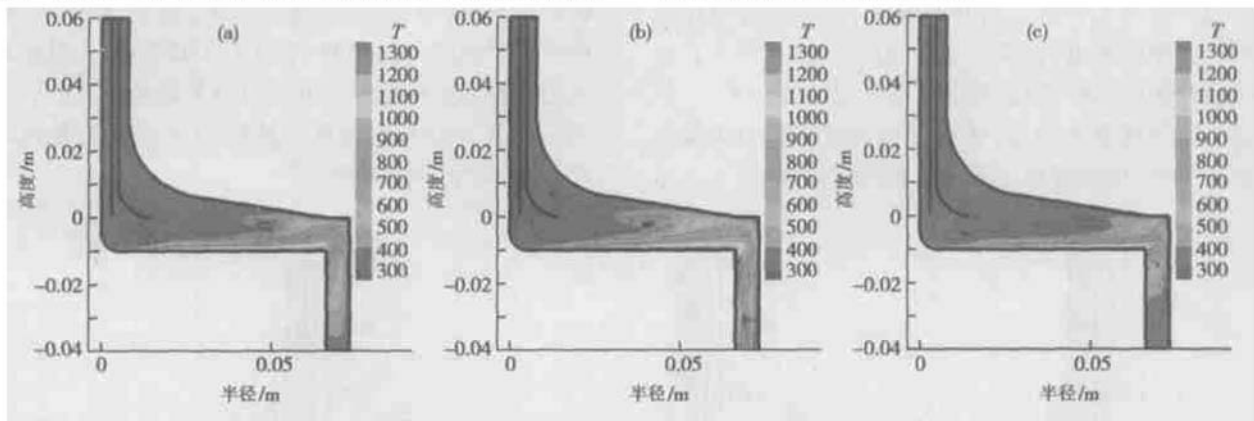


图 7 热力耦合的反应室流场 (a) 基座转速 20r/min; (b) 基座转速 40r/min; (c) 基座转速 60r/min

Fig. 7 Flow patterns inside the MOCVD reactor with coupled flow and heat (a) Substrate rotating speed: 20r/min; (b) Substrate rotating speed: 40r/min; (c) Substrate rotating speed: 60r/min

3.3 CFD 辅助反应室设计

前面的计算结果和分析表明, 初步设计方案的 MOCVD 反应室内的流场结构复杂, 不能满足流场平直稳定的要求. 因此, 基于 CFD 分析, 本文对反应

室几何结构进行了改进, 并对改进后的反应室流场进行了数值模拟. 由于本文工作尚在进行中, 这里暂不给出改进后的具体几何结构, 仅给出改进的反应室内热力耦合的流场结构, 见图 8. 计算参数为: 内层通道流量 1.0L/min, 中层通道流量 3.0L/min, 外

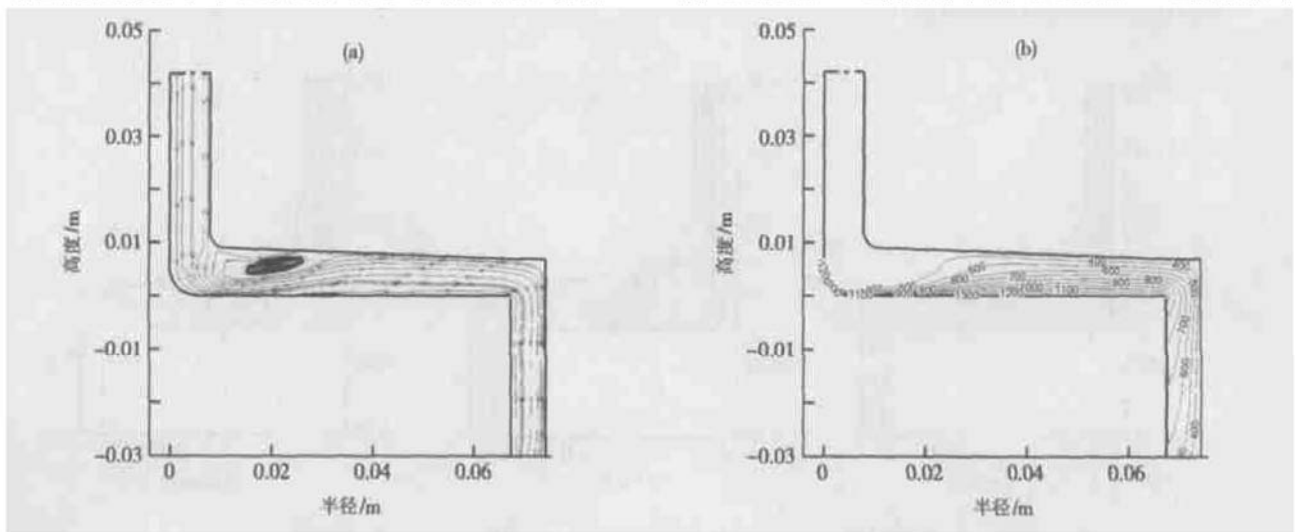


图 8 改进结构的反应室热力耦合流场 (a) 流线图; (b) 温度等值线图

Fig. 8 Flow patterns inside the redesigned MOCVD reactor with coupled flow and heat (a) Flow streams; (b) Contours of temperature

层通道流量 3.0L/min; DL= 0.01m; 基座旋转速度 20r/min; 基座温度 1050℃. 由图 8 可以看出, 改进后的流场结构有了明显改善, 反应室大部分空间内的流线平直, 基座表面附近流线平直和温度均匀. 但在外层出口处仍然存在回流涡, 尚需继续改进.

4 结论

本文采用 CFD 数值仿真技术对生产型 GaN-MOCVD 设备反应室内的流场进行了模拟. 模拟结果有效再现了具有复杂几何结构和运动方式的 MOCVD 反应室内的流场结构, 研究了改变几何尺寸和运行参数对 MOCVD 反应室流场结构的影响. 数值仿真对 MOCVD 设备的结构设计有重要指导作用, 同时也是 MOCVD 设备调试和运行的重要辅助手段.

对于本文模拟的 MOCVD 反应室来说, 间距 DL、入口流量配比、基座和载片旋转速度等对流场结构均有明显影响. 在一定范围内缩小 DL 有利于改善流场结构; 载片转速的增大使流场结构趋向复杂, 基座转速增大可以使基座表面流线趋于平直, 具有稳定流场的作用; 热浮力效应明显. 在一定范围内增大基座转速具有抑制热浮力效应和平稳流场的作用.

本文研究的反应室几何结构的通道出口圆弧对流场结构有较大影响, 本文基于 CFD 分析对反应室几何结构进行了改进, 改进后的反应室流场结构有明显改善. 本文工作表明, CFD 是辅助反应室设计和优化运行参数的重要手段.

参考文献

- [1] Zhang Rong, Yang Kai, Qin Linhong, et al. Optical property studies of GaN films grown by MOCVD. Chinese Journal of Semiconductors, 1997, 18(2): 91(in Chinese)[张荣, 杨凯, 秦林洪, 等. MOCVD 生长的 GaN 膜的光学性质研究. 半导体学报, 1997, 18(2): 91]
- [2] Zhang Qilin, Sun Wenhong, Liu Yanfei, et al. Study on growth of GaN material. Semiconductor Information, 1997, 34(5): 6(in Chinese)[章其麟, 孙文红, 刘燕飞, 等. GaN 材料生长研究. 半导体情报, 1997, 34(5): 6]
- [3] Tokunaga H, Tan H, Arai T, et al. Performance of multiwafer reactor GaN MOCVD system. J Cryst Growth, 2000, 221: 616
- [4] Mao Xiangjun, Yang Zhijian, Li Jing, et al. PL characteristics of rapidly annealed Mg: GaN. Chinese Journal of Semiconductors, 1999, 20(8): 639(in Chinese)[毛祥军, 杨志坚, 李景, 等. 用 MOCVD 在 ZnO/Al₂O₃ 衬底上生长 GaN 及其特性. 半导体学报, 1999, 20(8): 639]
- [5] Cao Chuanbao, Zhu Hesun. Research status of GaN thin films. Chinese Journal of Materials Research, 2000, 14(suppl): 1(in Chinese)[曹传宝, 朱鹤孙. 氮化镓薄膜及其研究进展. 材料研究学报, 2000, 14(增刊): 1]
- [6] Lu Dacheng, Wang Du, Wang Xiaohui. Growth of GaN by MOCVD. Chinese Journal of Semiconductors, 1995, 6(11): 831(in Chinese)[陆大成, 汪度, 王晓辉, 等. GaN 的 MOCVD 生长. 半导体学报, 1995, 6(11): 831]
- [7] Khoruzhnikow S E, Robachevsky A M, Segal A S. Simulation of MOCVD-process for Y-Ba-Cu-O film production in stagnation zone reactor. Mater Sci Eng, 1994, B22: 317
- [8] Nami Z, Misman O, Erbil A, et al. Computer simulation study of the MOCVD growth of titanium dioxide films. J Cryst Growth, 1997, 171: 154
- [9] Won Y C, Do H K, Young S C. Modeling of Cu thin film growth by MOCVD process in a vertical reactor. J Cryst Growth, 1997, 180: 691
- [10] David W W, Brian S A. Design and operating considerations for a water-cooled close-spaced reactant injector in a production scale MOCVD reactor. J Cryst Growth, 1997, 170: 77
- [11] Jin X Z, Cong Z X, Liu M D. Numerical simulation of vortex distribution in horizontal MOCVD reactors. Chinese Journal of Semiconductors, 1993, 14(1): 21(in Chinese)[金希卓, 丛志先, 刘明登. 卧式 MOCVD 反应器内涡旋分布的数值模拟. 半导体学报, 1993, 14(1): 21]
- [12] Zhang J W, Gao H K, Zhang J K, et al. Numerical simulation of return flow in MOCVD reactor. Chinese Journal of Semiconductors, 1994, 15(4): 268(in Chinese)[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(4): 268]
- [13] Jin X Z, Fu S L, Xu S Y. Numerical study of the natural convective in a pipe with upper-cooled and lower-tilted heated wall. ACTA Scientiarum Naturalium Universitatis Jilinensis, 1996, 2: 18(in Chinese)[金希卓, 傅姝莉, 徐世英. 底部倾斜冷热壁直管内自然对流数值研究. 吉林大学自然科学学报, 1996, 2: 18]
- [14] Ning Z. CFD simulation of pulsed MOCVD to reduce gas-phase parasitic reaction. SPIE, 1999, 3792: 58
- [15] Linda R B. MOCVD of GaAs in a horizontal reactor: modeling and growth. J Cryst Growth, 1991, 109: 241
- [16] Nami Z. Computer simulation study of the MOCVD growth of titanium dioxide films. J Cryst Growth, 1997, 171: 154
- [17] Rhie C M, Chow W L. Numerical study of the turbulent flow past an airfoil with edge separation. AIAA Journal, 1983, 21(11): 1525

CFD Simulation of Flow Patterns in GaN-MOCVD Reactor*

Liu Yi, Chen Haixin and Fu Song

(*Department of Engineering Mechanics, Tsinghua University, Beijing 100084, China*)

Abstract: Computational fluid dynamics (CFD) simulation is performed to study the flow dynamics in the metal-organic chemical vapor deposition (MOCVD) reactor. The numerical code is based on the SIMPLE scheme with the non-stagger grids system. The improved pressure-velocity method by Rhie & Chow is adopted to avoid unreasonable pressure fluctuation. The governing equations are discretized with a finite volume method. CFD simulation gives the flow structures in the planetary MOCVD reactor which has complex geometrical structures and motion style. The effect of the different geometrical size and working parameters on the flow patterns in the MOCVD reactor is studied. The CFD simulation results give constructive suggestion to the configuration design and the parameter optimization of the MOCVD reactor.

Key words: CFD; GaN; MOCVD; numerical simulation

PACC: 4700; 7360F

Article ID: 0253-4177(2004)12-1639-08

* Project supported by National Natural Science Foundation of China (No. 10232020), National Key Basic Research Special Fund (No. 2001CB409600), National High Technology Research and Development Program of China (No. 2002AA 311240)

Received 9 December 2003, revised manuscript received 27 April 2004

© 2004 The Chinese Institute of Electronics