

卧式 MOCVD 反应器内涡旋分布数值模拟*

金希卓 丛志先 刘明登**

吉林大学力学教研室, 长春 130023

(1991年8月27日收到, 1992年1月20日收到修改稿)

本文用有限元法, 通过求解耦合的动量、能量微分方程组, 对卧式冷壁 MOCVD 反应器内气体流动出现的涡旋分布进行了数值模拟。文中考虑了热浮力及反应器几何参数对涡旋分布的影响, 同时讨论了涡旋发生与无量纲参数 Gr 、 Re 的比值 Gr/Re^2 的关系。计算结果表明, 适当控制比值 Gr/Re^2 可以避免涡旋产生, 从而为获得均匀生长速率提供了理论指导。本文的方法可用于类似地二维或轴对称流动涡旋分布的数值模拟。

PACC: 4730, 4725, 0270

一、前 言

对于具有底部热基座, 上壁水冷的卧式 MOCVD 反应器, 由实验观测到, 在一定条件下, 基座上方或前后缘存在着涡旋, 它严重影响基座纵向和横向 III-V 化合物薄膜生长速率的均匀性, 因而吸引了许多学者对此现象进行研究。E. M. Sparrow^[1] 最早从实验角度进行了研究, 他给出了三种对流的划分并指出当流动处于混合对流时会有涡旋出现。其后, R. Takahashi^[2] 等用 TiO_2 烟雾作示踪粒子观测到 CVD 反应器内当流动处于混合对流时, 在卧式矩形 CVD 反应器横截面内有两个反向涡旋, 并给出相应的计算结果。最近, E. P. Visser^[3] 等用示踪粒子法对卧式 MOCVD 反应器内流动做了显示实验, 观测到当进入气流被基座加热后, 于基座前后缘处出现了大的涡旋区, 同时发现这种流动与压力、速度和温度有关, 他还对反应器的流动进行了数值模拟, 在忽略基座厚度和基座水平放置这两个假设下, 给出了基座前缘发生涡旋流动的流场图, 并找到涡旋流动发生与 Gr/Re^k ($1 < k < 2$) 的关系。Holstein^[4] 等用数值方法着重研究了浮力对 CVD 反应器内气体流动及生长速率均匀性的影响, 他们在计算中发现, 当 Gr/Re^2 大时, 于基座前缘形成横向旋转涡, 这些工作对我们认识反应器内的流动现象, 提高淀积薄膜的均匀性有一定的指导意义。

但是上述文献 [3] 没有考虑反应器的几何形状及其内部具有一定厚度的基座的姿态变化对流场的影响, 文献 [4] 对三种不同形状的反应器内的流场做了观测分析, 从理论分析角度文中仅对不存在涡旋的管内流场做了数值计算。本文着重研究了 [3], [4] 没有

* 吉林大学科研基金资助项目。

** 现在广西师范大学工作。

涉及的问题，即真实反应器的几何形状和 Gr/Re^2 对流场中涡旋分布的影响，它是 [3], [4] 工作的延伸和发展，数值计算过程中，采用了 Galerkin 有限元法，对不同几何形状反应器内的涡旋产生、发展和消失的演化过程做了数值模拟。文中还针对不同 Gr/Re^2 比值，计算了对应的流场和温度场，所得结果与 [4] 的观测分析结果十分吻合。本文的结果为反应器的设计和提高沉积薄膜的均匀性提供了理论和数值依据。

二、数学模型与计算方法

符 号

ρ	流体密度	H	反应管上下壁距离
C_p	定压比热	U	流体入口平均速度
μ	粘性系数	V	速度矢量
ν	运动粘性系数	u	x 方向速度分量 $u = \frac{u^*}{U}$
λ	流体导热系数	v	y 方向速度分量 $v = \frac{v^*}{U}$
γ	比容	T	温度
g	重力加速度	T_0	流体入口温度
*	有量纲量标志	T_w	基座温度
x	无量纲量 $x = \frac{x^*}{H}$	θ	无量纲温度 $\theta = \frac{T - T_0}{T_w - T_0}$
y	无量纲量 $y = \frac{y^*}{H}$	F	质量力
ω	涡量 $\omega = \frac{\omega^* H}{U}$	ϕ	流函数 $\phi = \frac{\phi^*}{UH}$
Re	Reynolds 数 $Re = \frac{UH}{\nu}$	Gr	Grashof 数 $Gr = \frac{\beta g \rho^2 (T_w - T_0) H^3}{\mu^2}$
Pr	Prandtl 数, $Pr = \frac{\mu C_p}{\lambda}$	β	流体体膨胀系数 $\beta = \frac{1}{\gamma} \frac{\partial \gamma}{\partial T}$
Δ	拉普拉斯微分算子 $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$		
∇	哈密顿算子 $\nabla = \frac{\partial}{\partial x} i + \frac{\partial}{\partial y} j$		

我们采用的模型如图(1)所示，假设：(1) 流体为粘性不可压缩的，物性参数 ρ, μ, C_p, λ 等为常数，(2) 流动为二维(矩形反应器的宽高比 $\gg 1$)的层流，且流动在低雷诺数下进行。(3) 满足 Boussinesq 假设，即温度变化将引起密度改变，垂直方向密度差产生的浮力，将在动量方程中作为质量力出现。由此，N-S 方程组：

$$(1) \quad \nabla \cdot V = 0$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} + (V \cdot \nabla) V = F - \frac{1}{\rho} \nabla P + u \Delta V$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) T = \frac{\lambda}{\mu C_p} \Delta T$$

式中: $\mathbf{V} = (u, v)$, $\mathbf{F} = (0, g)$. 在 Boussinesq 假设下, 压力梯度项可写成

$$\frac{\nabla p}{\rho} = g + \frac{\nabla p}{\rho} + g\beta(T - T_0),$$

代入方程组(1)可得

$$(2) \quad \begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{V} &= 0 \\ \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{V} &= -\frac{1}{\rho} \nabla p + u \Delta \mathbf{V} - \beta g(T - T_0) \\ \frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) T &= \frac{\lambda}{\mu C_p} \Delta T \end{aligned}$$

将基本变量方程组(2)转化为无量纲涡量-流函数方程及能量方程, 其形式为:

$$\omega = -\Delta\phi \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) \omega = \frac{1}{Re} \Delta \omega + \frac{Gr}{Re^2} \frac{\partial \theta}{\partial y} \quad (3.2)$$

$$(3) \quad \frac{\partial \theta}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) T = -\frac{1}{RePr} \Delta \theta \quad (3.3)$$

$$\mathbf{V} = \left(\frac{\partial \phi}{\partial y}, -\frac{\partial \phi}{\partial x} \right). \quad (3.4)$$

边界条件为:

(1) 在所有固壁上, 流动是无滑移的, 即 $u = 0, v = 0$, 在上壁取 $\phi = 1$, 在下壁和基座上取 $\phi = 0$.

(2) 在入口处取速度为抛物线分布, $u = Uy(1-y)$, 此时 $\phi = U \left(\frac{1}{2} y^2 - \frac{1}{3} y^3 \right)$,

$\omega = U(1-2y)$. 取温度为室温 $\theta = 0$.

(3) 在基座上, $\theta = 1$, 其余固壁上 $\theta = 0$.

(4) 在出口处 $\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0, \frac{\partial \omega}{\partial x} = 0, \frac{\partial \theta}{\partial x} = 0$.

方程(3)是非线性方程组, 并且(3.2)与(3.3)是耦合的, 较难求解. 本文采用 Galerkin 有限元法, 利用四结点四边形单元划分求解区域, 对该方程组进行了计算, 计算中对 ϕ, ω, θ 采用了同阶插值函数, 通过有限元分析, 可得下列单元上的有限元特征方程:

$$B_{ii}\omega_i - A_{ii}\phi_i = 0$$

$$(4) \quad B_{ij}\omega_i + D_{ijk}\phi_j\omega_k + \frac{1}{Re} A_{ij}\omega_i - \frac{Gr}{Re^2} F_{ij}\theta_i = 0$$

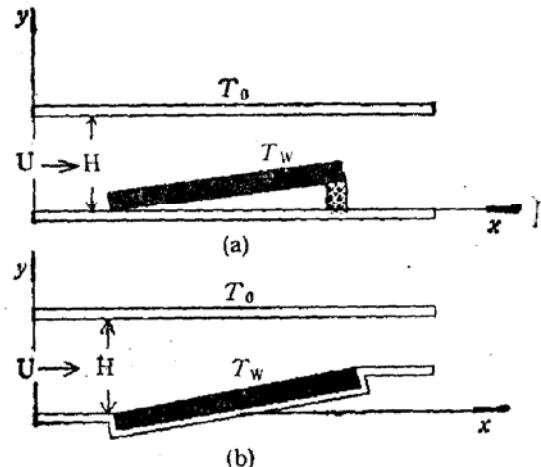


图 1 计算模型
(a) 倾斜滑块 (b) 嵌平前缘及后缘

$$B_{ij}\theta_j + D_{ijk}\Phi_i\theta_k + \frac{1}{RePr} A_{ij}\theta_i = 0$$

式中:

$$A_{ij} = \int_Q \left(\frac{\partial \Phi_i}{\partial x} \frac{\partial \Phi_j}{\partial x} + \frac{\partial \Phi_i}{\partial y} \frac{\partial \Phi_j}{\partial y} \right) dQ$$

$$B_{ij} = \int_Q \Phi_i \Phi_j dQ$$

$$F_{ij} = \int_Q \frac{\partial \Phi_i}{\partial x} \Phi_j dQ$$

$$D_{ijk} = \int_Q \left(\frac{\partial \Phi_i}{\partial y} \frac{\partial \Phi_j}{\partial x} - \frac{\partial \Phi_i}{\partial x} \frac{\partial \Phi_j}{\partial y} \right) \Phi_k dQ$$

Φ_i 为单元 Q 的插值基函数 ($i, j, k = 1, 2, 3, 4$)，对方程组 (4) 进行总体合成及边界处理，用时间相关法进行求解，得到了两种模型中的流场及温场解。

三、计算结果和分析

Sparrow^[4] 利用无量纲参数比值 Gr/Re^2 ，给出三种不同对流的判据：

$$\frac{Gr}{Re^2} > 16 \quad \text{自流对流,}$$

$$16 > \frac{Gr}{Re^2} > 0.3 \quad \text{混合对流,}$$

$$0.3 > \frac{Gr}{Re^2} \quad \text{强迫对流,}$$

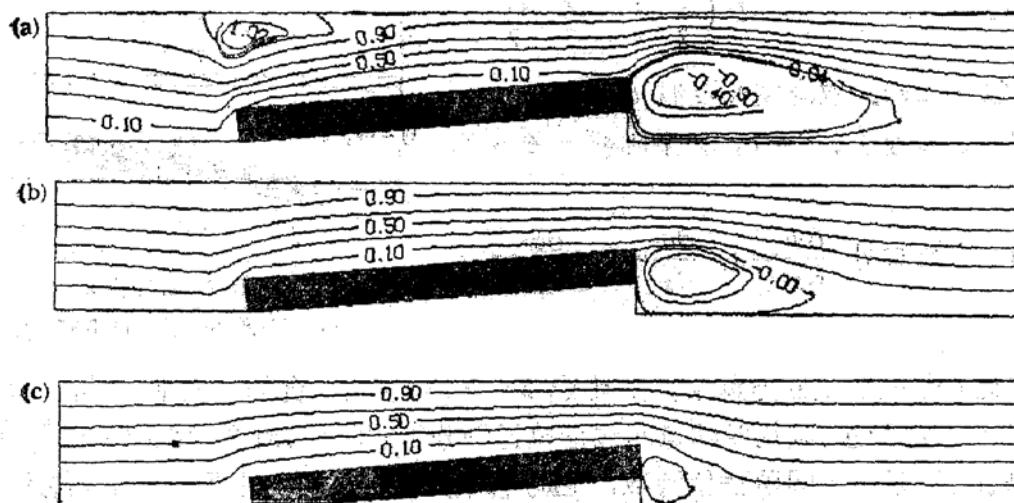


图 2 模型 (a) 内流线分布图

计算参数: (a) $Re = 10$, $Pr = 0.7$, $Gr = 1500$

(b) $Re = 10$, $Pr = 0.7$, $Gr = 500$

(c) $Re = 10$, $Pr = 0.7$, $Gr = 50$

我们根据 Sparrow 准则, 分别计算了上述三种对流情况下的速度场、温度场, 模拟动量、热量输运过程。

(1) 图 2 是倾斜基座 (图 1(a)) 的流场计算结果。图 2(a) 为自然对流占优势的情况, 可以看出由底部加热引起的热浮力, 使基座前缘上方, 后缘下方出现明显的大涡旋, 这无疑会对流场产生大的干扰, 造成速度分布不均匀, 从而影响淀积层的均匀性。

图 2(b) 为混合对流情况下的速度场, 此时热浮力和强迫对流的惯性力具有相同的数据级, 由于惯性力作用明显并消弱了热浮力的作用, 使前缘上方的涡旋区变小或消失, 后缘尾涡区变小。

当强迫对流占优势时, 前缘的上方涡区消失, 但后缘仍有旋涡, 见图 2(c), 这是由于绕角点流动造成的分离形成的涡旋区, 此种情况的流线分布均匀, 流场品质明显变好。

(2) 图 3 是图 1(a) 所示模型的等温线分布, 从温度分布的均匀性来看, 仍然是强迫对流为好。

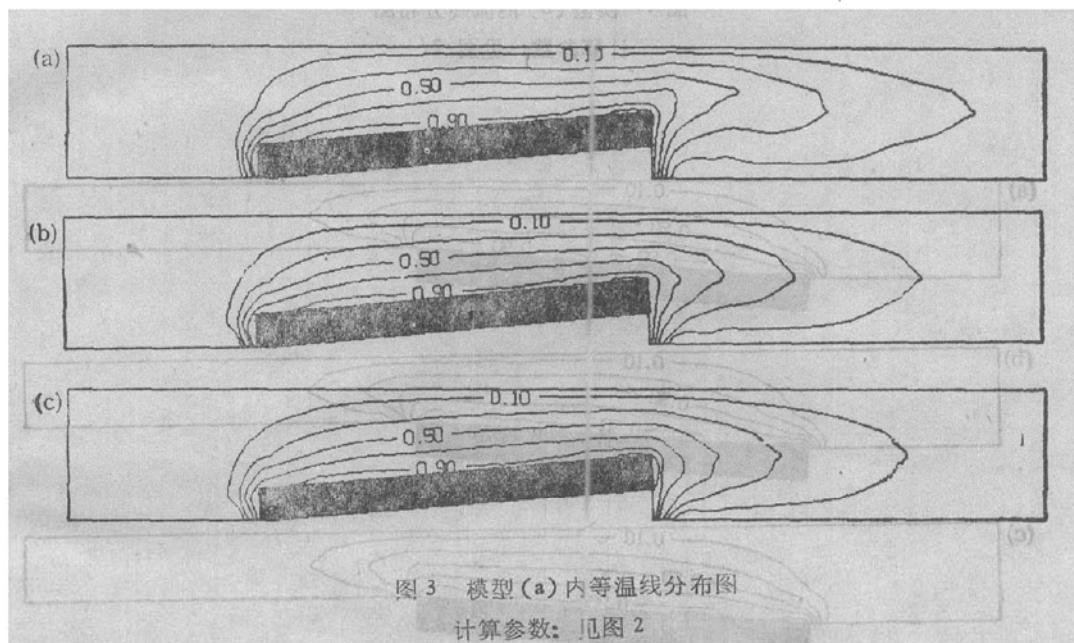


图 3 模型 (a) 内等温线分布图

计算参数: 见图 2

(3) 图 4~5 为基座嵌平前后缘时的计算结果。图 4(a) 为自然对流占优时的速度场, 可以看出热浮力仍造成基座前缘上方的涡旋, 但后方的大涡区消失。在强迫对流时, 由于后缘嵌平, 消除了分离涡, 流场品质明显变好, 这是最可取的基座放置方式和反应器外形设计。从图 5 给出的等温线分布可以看出温度分布是均匀的。

综上所述, MOCVD 反应器内流场、温度场品质的好坏, 涡旋分布与反应器的几何形状和 Gr/Re^2 有关。对于给定的反应器主要取决于 Gr 和 Re 的比值, 即热浮力与惯性力的比值大小。调整 Gr/Re^2 的比值有两种方法: 一种方法是保持 Re 数不变, 改变 Gr 数, 如本文的方法与计算结果。另一种方法是保持 Gr 数不变, 改变 Re 数(对应于人口流速改变)。对于基座前后缘嵌平的反应器(图 1(b)), 由于不出现分离, 所以用两种方法所得的流场基本一致。现在, 我们针对基座前后缘没有嵌平的反应器(图 1(a))来讨论后一种方法, 即 Re 数的变化对流场的影响。首先, 给定 Gr 数, 令 Re 数较小, 使流动处于自然对流状态, 此时由于热浮力起主导作用, 于基座上方及前后缘处均有涡旋; 改变 Re 数, 使

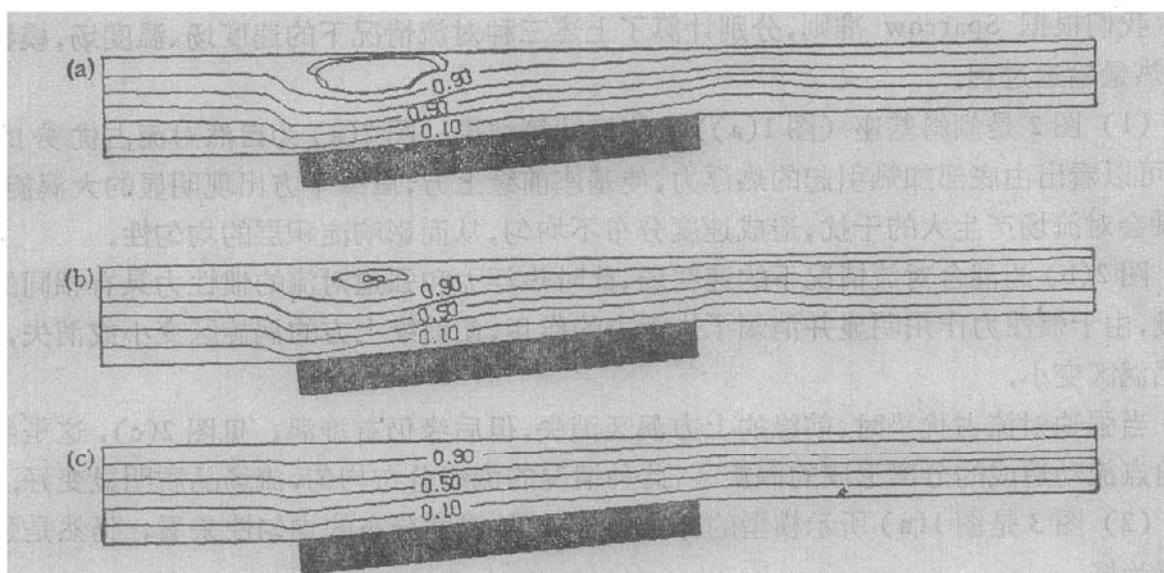


图 4 模型 (b) 内流线分布图

计算参数: 见图 2

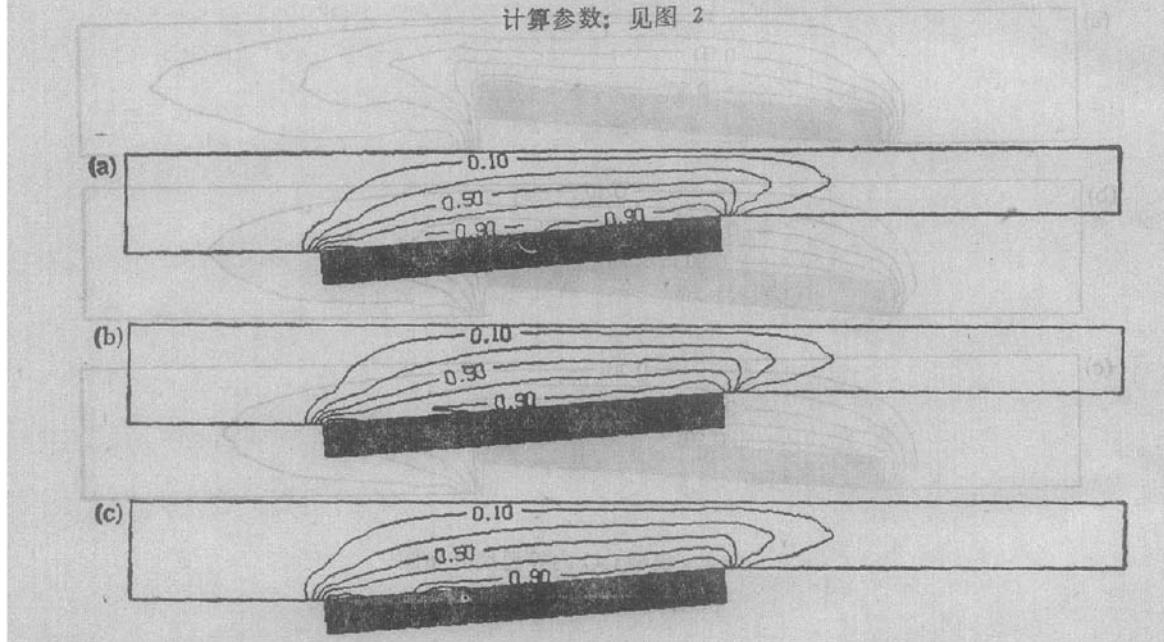


图 5 模型 (b) 内等温线分布图

计算参数: 见图 2

流动处于强迫对流状态,在这种情况下惯性力起主导作用,热浮力引起的基座上方和前缘的涡旋受到抑制而逐渐消失,但是由于基座后缘处为绕大于 π 角的固壁流动而出现流动分离,因而存在涡旋区,这个区域随 Re 数的增大而增大,但是在一定 Re 数下,只要涡旋不脱落,它并不影响基座上方的流场,所以增大 Re 数是获取均匀流场的可行办法,这一点已被许多实验所验证,文献[2]通过实验观察到,随着流速增加或者降低压力,横截面上两个反向涡旋向角落减小并逐渐消失。文献[3]通过实验指出,用上述方法可以消除回流(Return Flow)或螺旋流动(Spiral Rolls)。对于温度场,当增加 Re 数,使流动处于强迫对流,温度分布和换热系数与 Gr 数无关,并且随 Re 数增加,纵向温度梯度减小,从而增加了纵向温度分布的均匀性。

四、结 论

1. 应用 Galerkin 有限元法求解了包括热浮力影响在内的混合对流问题, 得到了符合实际的 MOCVD 反应室内气体流动特征的模拟图。Galerkin 有限元法在求解此类问题时是很有效的。
2. 为获得均匀的速度场和温度场, 必须有效地抑制热浮力的影响, 保持强迫对流占优。为此, 主要控制 Gr/Re^2 的值, 使之小于 0.3。当不能控制到此值时, 必须考虑热浮力的影响。
3. 为避免基座前缘、后缘处涡旋的产生, 应当注意反应器外形及其内部结构对流场的影响, 当使基座倾斜, 并使其前后与器壁嵌平, 这是最理想的基座放置方式和反应器外形设计。

参 考 文 献

- [1] E. M. Sparrow, R. Eichhorn and J. L. Gregg *Phys. Fluids*, 2, 319(1959).
- [2] R. Takahashi, Y. Koga and K. Sugawara, *J. Electrochem. Soc.*, 119, 1406(1972).
- [3] E. P. Visser and C. R. Kleijn, *J. Crystal Growth*, 94, 929(1989).
- [4] W. L. Holstein, *et al.*, *J. Crystal Growth*, 94, 131(1989).
- [5] E. R. G. Eckert and R. M. Drake, *Analysis of Heat and Transfer*, Mc Graw-hill, 1972.

Numerical Simulation of Vortex Distribution in Horizontal MOCVD Reactors

Jin Xizhuo, Cong Zhixian and Liu Mingdeng

Jilin University, Changchun 130023

(Received 27 August 1991, revised manuscript 20 January 1992)

Abstract

The vortex distribution in horizontal cold wall MOCVD reactors is numerically simulated by solving coupling momentum and energy equations using finite element method in this paper. The effects of buoyancy, reactor geometry and postures of susceptor upon the vortex distribution, as well as the relationship between the occurrence of vortex and ratio of dimensionless Grashoff number Gr with Reynolds number Re , Gr/Re^2 , are discussed. The results show that vortex can be eliminated by controlling the ratio Gr/Re^2 appropriately, and the uniform growth rate can be obtained. In addition, the method used in this paper can be universally applied to study any flow problem in other typical MOCVD reactors.

PACC: 4730, 4725, 0270