

基于COMSOL的LEC法GaSb晶体生长仿真

李璐杰¹, 程红娟¹

1. 中国电子科技集团公司第四十六研究所, 洞庭路26号, 天津市, 300220

引言: 碲化镓 (GaSb) 单晶被广泛用于制备 II 型超晶格红外光电薄膜、热光伏电池、低阈值电压激光二极管等器件。在 LEC (液封直拉法) 晶体生长工艺中, 熔体-固体相界面的形状将影响晶体的成晶质量。晶转和锅转工艺是改变相界面形貌的主要工艺措施。基于 COMSOL Multiphysics® 软件建立计算机仿真模型, 对上述问题进行研究, 是获得低位错密度碲化镓晶体的有效途径。

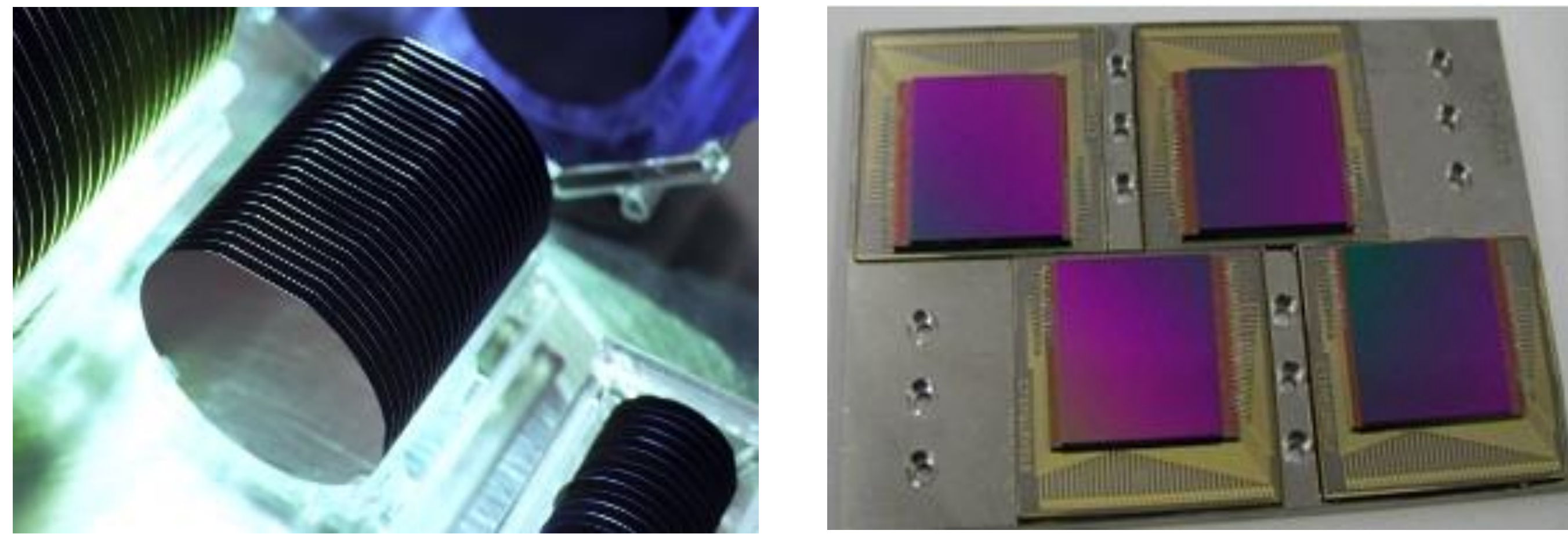


图 1. GaSb单晶衬底及其在II型超晶格方面的应用

计算方法:

传热方程、流体运动学方程:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (-k \nabla T) = Q + q_s T - \rho c_p u \cdot \nabla T + \tau : S + \frac{T}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p \left(\frac{\partial p_a}{\partial t} + u \cdot \nabla p_a \right)$$

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho (u \cdot \nabla) u = \nabla \cdot [-pI + \eta(\nabla u + (\nabla u)^T)] + F$$

$$\nabla \cdot u = 0$$

其它假设:

不考虑热积聚、反应热、粘性损耗和压力功生成项; 在系统某一时刻, 采用准稳态处理; 所研究的系统具有轴对称性; GaSb 固体熔体统一处理
边界条件:

(1) 热场边界: 表面对表面辐射 (系统内壁); 表面对环境辐射 (炉膛壁对环境散热); 温度边界 (水冷壁);

(2) 流体边界:

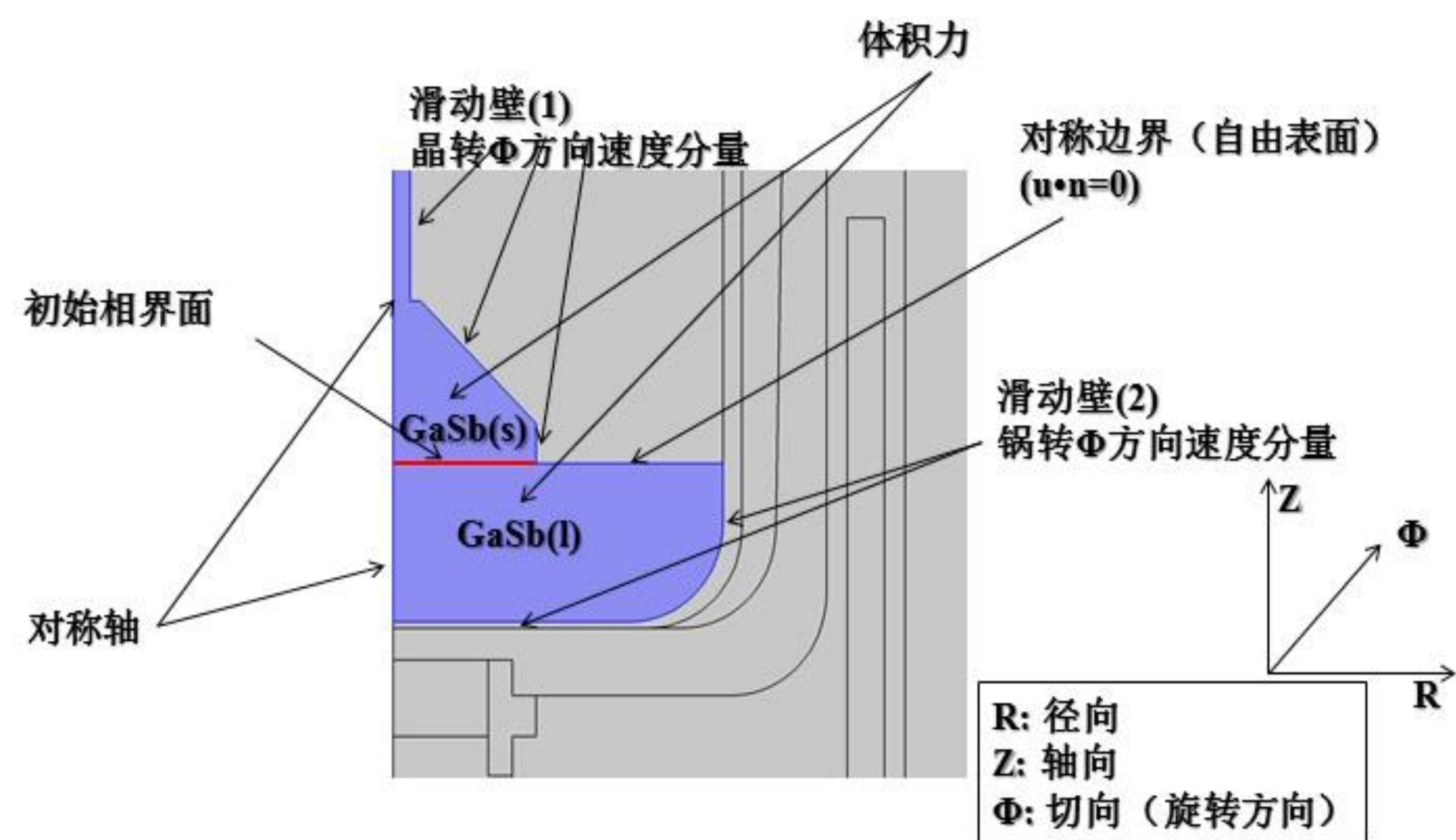


图 2. 流体边界

结果:

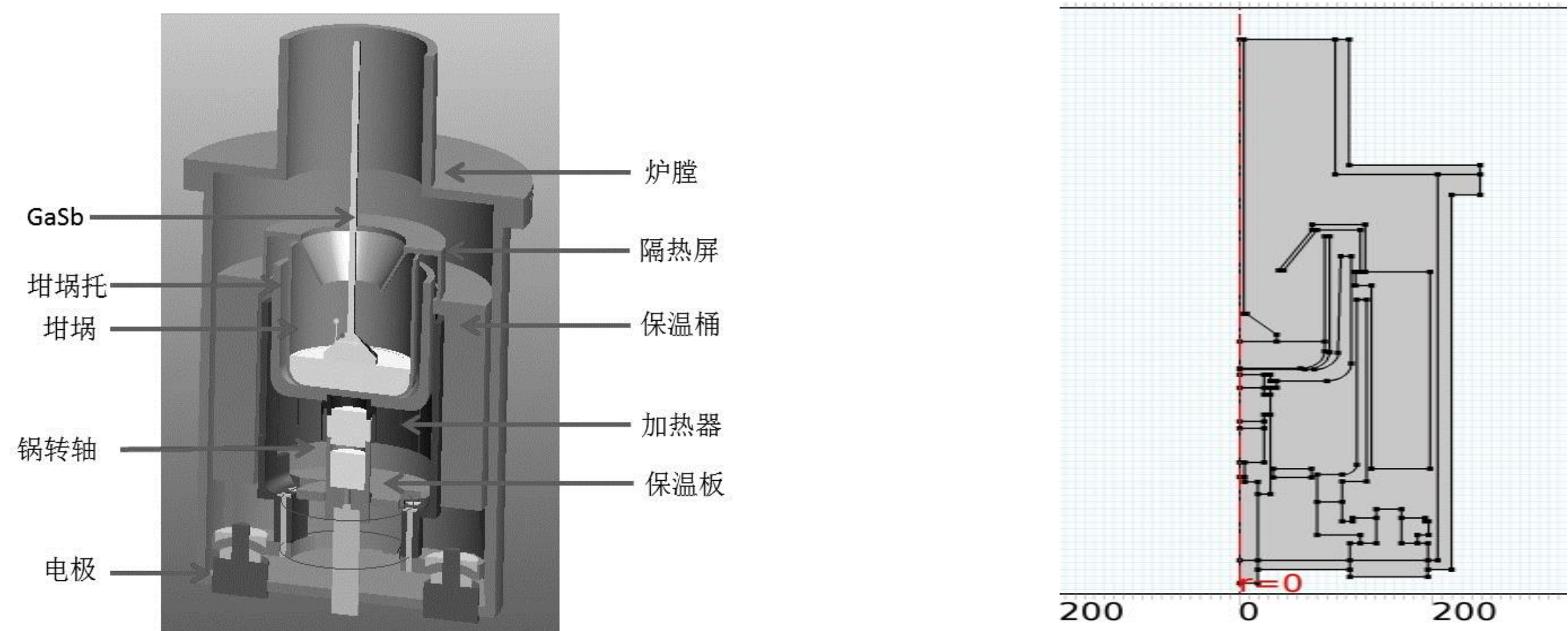


图 3. LEC 炉 3D 剖面图 图 4. LEC 炉轴对称几何模型

材料	热导率 (W/m/K)	密度 (kg/m ³)	辐射系数	热容 (J/kg/K)	动力学粘度 (Pa·s)
石墨	150	1950	0.8	710	-
石墨毡	0.3	120	0.85	200	-
石英	7.6	2210	0.85	892	-
碲化镓 (固)	7.81	5614	0.7	328	10 ¹⁰
碲化镓 (液)	17.1	6030-0.578·T	0.7	328	8.4·10 ⁽⁻⁴⁾

表 1. 材料物理参数

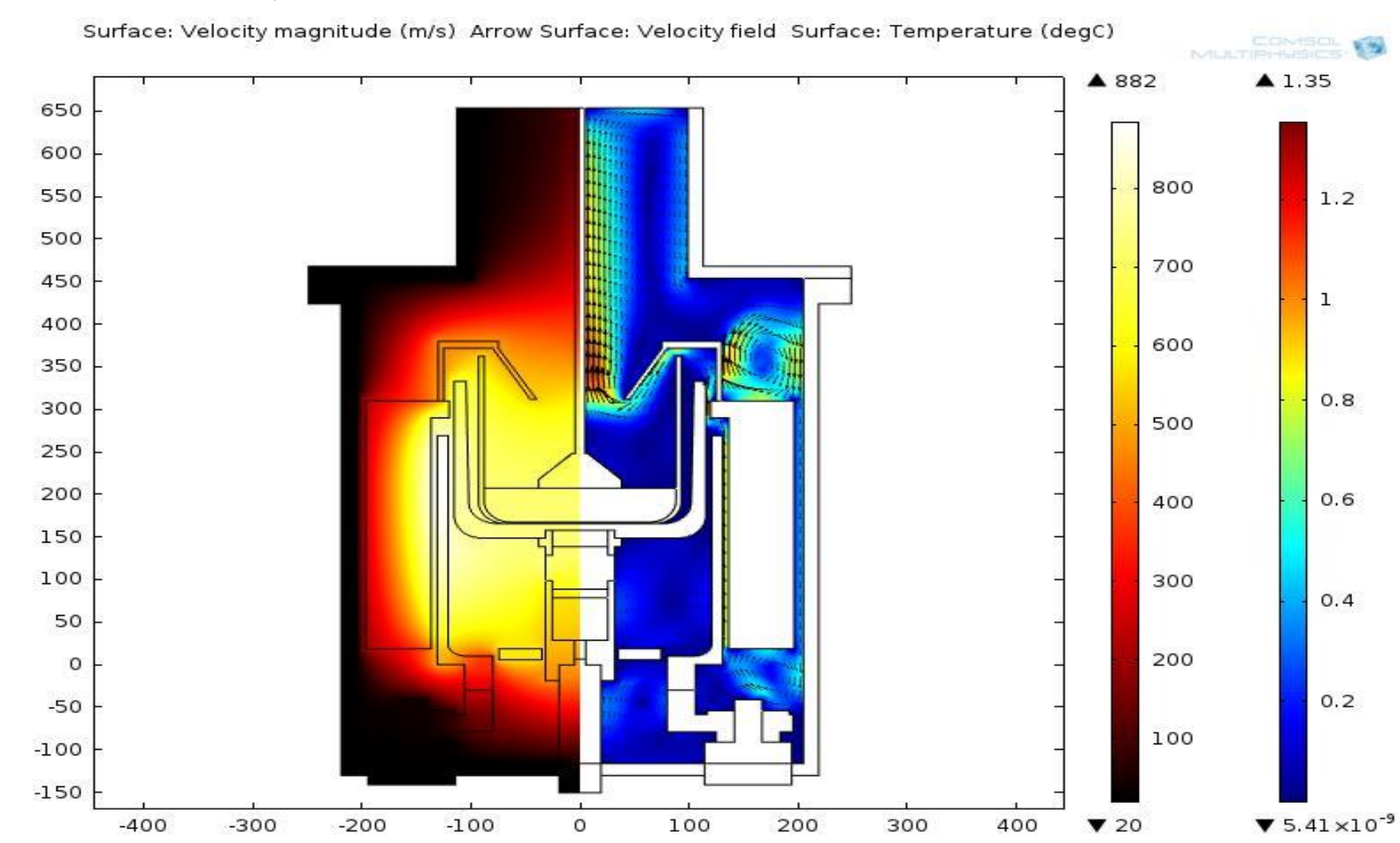


图 5. 全系统热场流场图

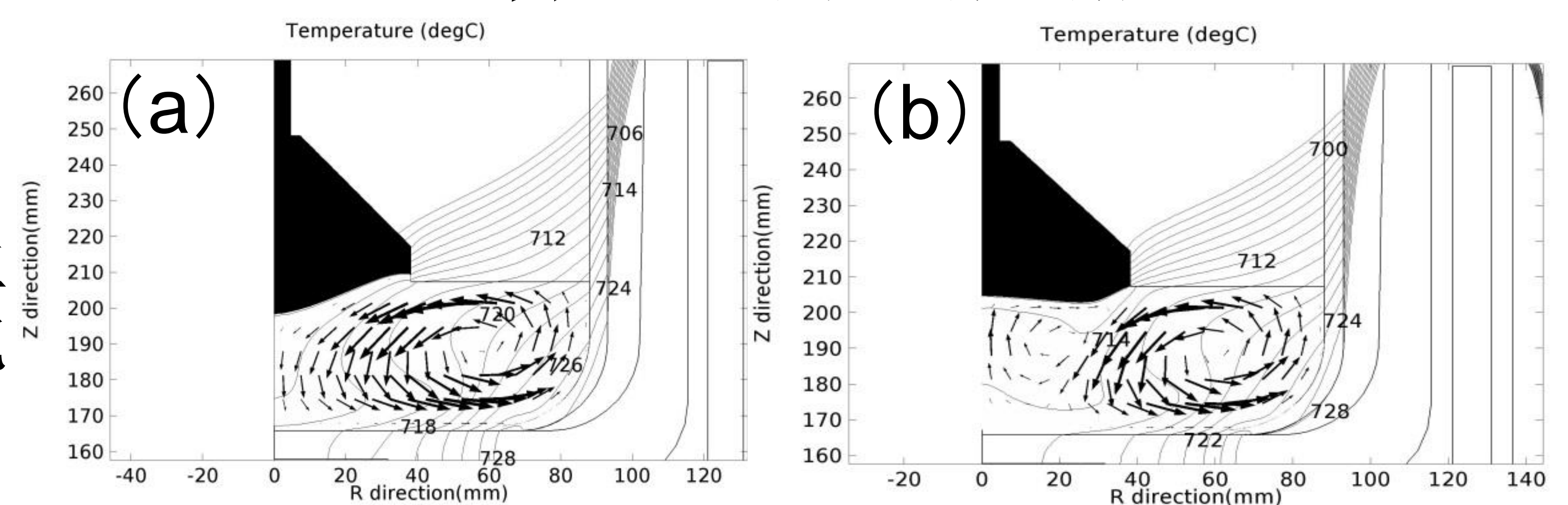


图 6. (a) 晶转-6 rpm、锅转4 rpm (功率7850W) (b) 晶转-10rpm、锅转4rpm (功率7800W)



图 7. 有益结果

结论: 通过仿真结合实验, 优化了晶转、锅转 LEC 工艺参数, 获得了近似“平面”的熔体-固体相界面, 提高了碲化镓晶体质量。

参考文献:

1. COMSOL 5.2 application libraries: Swirl Flow around a rotating disk.