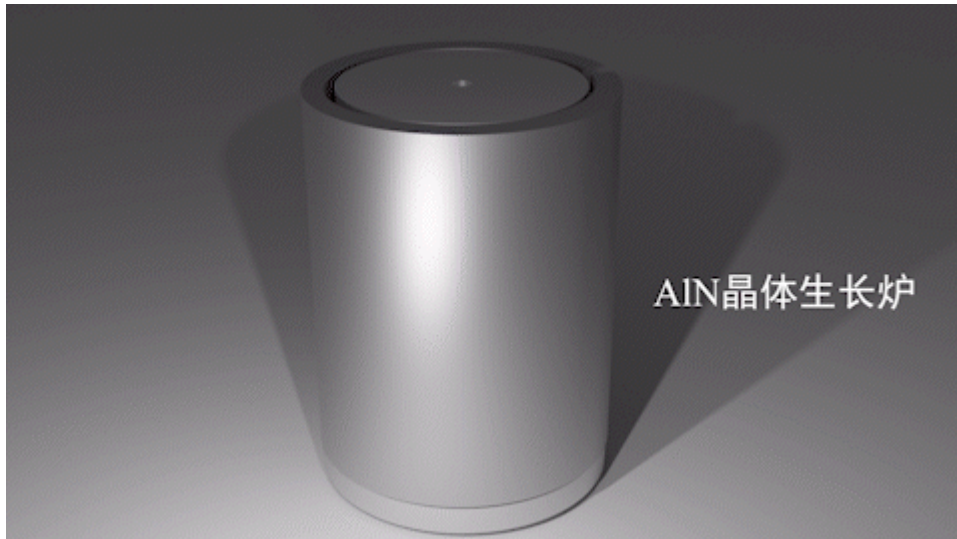


Influence of Different Heater Structures on the Temperature Field of AlN Crystal Growth by Resistance Heating

以氮化铝单晶(AlN)为代表的超宽禁带半导体材料, 因具有热稳定性高、化学稳定性高、击穿电压高、抗辐射能力强、耐酸碱腐蚀、压电特性优良等特点, 而被普遍认为将在深紫外及真空-紫外光电探测器、高温、高频和高功率器件、发光装置传感器等方面具有广阔的应用前景。近年来, 随着 AlN 晶体应用需求量不断加大, 其制备技术也随之不断提高。

目前, 国内外研究者已探索出多种制备 AlN 晶体的方法, 其中物理气相传输法(Physical Vapor Transport, PVT)因具有生长工艺简单、生长速率快、结晶完整性好、安全性高等优点, 而被证实是 AlN 体单晶制备最有效的方法之一。虽然研究者们对 PVT 法 AlN 晶体生长炉进行了大量的模拟工作, 但是针对不同加热器结构对电阻法 AlN 晶体生长影响的模拟仿真研究了解甚少。



物理气相传输法制备 AlN 晶体

为探索不同加热器组合模式对晶体生长室内温度场的影响规律, 利用多物理场耦合的仿真方法对自行设计的电阻法 AlN 晶体生长炉在不同加热器环境下的温度场进行了大规模并行数值模拟, 得出了适合 AlN 晶体生长的最优加热器结构, 为 AlN 晶体生长炉加热器结构的设计和参数优化提供了理论依据。日前, 该研究成果发表在《Materials》期刊上。

仿真模型和物性参数

本研究以实际炉体结构及晶体生长工艺参数为依据, 采用有限元法对晶体生长过程中的传热过程进行全局性数值模拟。计算模型耦合了单晶生长炉内所有结构单元, 从而可以精确预测整个生长炉内的全局温度分布、气流的流动等。

热场几何模型及模拟参数

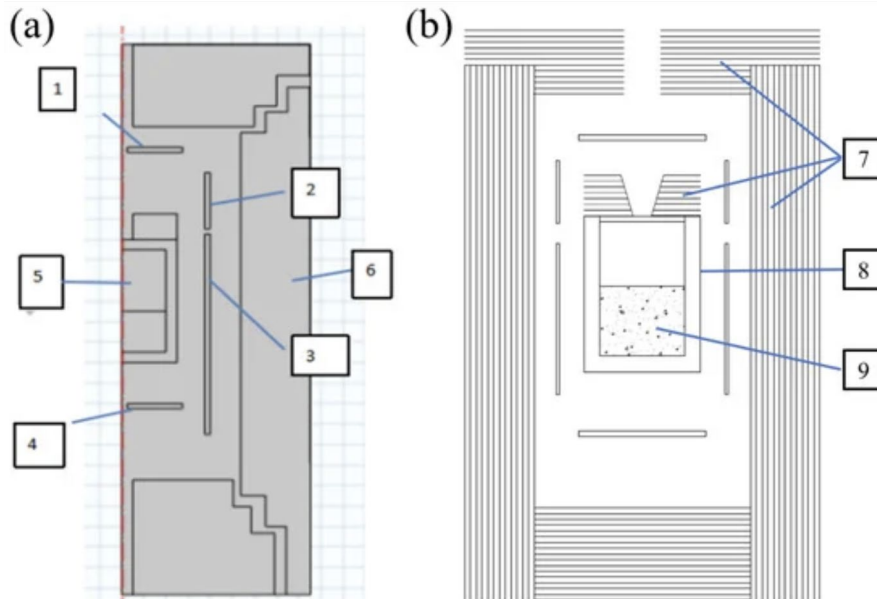


图 1 (a). 自主设计的 PVT 法生长 AlN 晶体炉内不同加热器结构示意图;

图 1 (b). PVT 法生长 AlN 晶体炉结构示意图。

1-顶部加热器, 2,3-侧边加热器, 4-底部加热器, 5-晶体生长室, 6,7-钨钼绝缘屏, 8-钨坩埚, 9-AlN 原材料

仿真模拟与结果分析

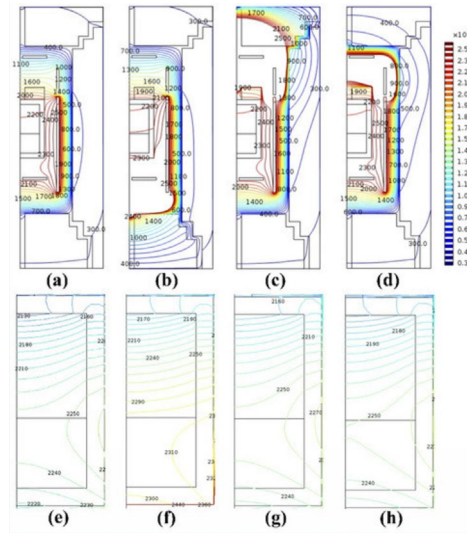


图 2.不同分段加热模式生长室内温度场分布情况: (a,e)为侧加热 1 模式、(b,f)为侧 1 加热器+底加热器模式、(c,g)侧 1 加热器+顶加热器模式、(d,h)为侧 1 加热器+侧 2 加热器模式

图 3.(a)不同加热模式下沿 R 方向不同位置下的 Z 方向的温度梯度统计曲线, 其中 R 代表径向, z 代表轴向; (b)不同加热模式下径向温度梯度(K/cm)

本研究根据自行设计 AlN 晶体生长炉的实际加热区的结构，提出了一种新型的电阻法 AlN 晶体生长炉不同段加热器对 AlN 晶体生长过程中的传热过程进行了全局数值模拟，得到以下结论：

1 模拟验证了顶加热器对减小轴向温度梯度有明显作用，而底加热器对轴向温度梯度有增大的作用，底部加热器能明显提高坩埚底部温度，从而使原料温度升高。2 模拟验证了径向温度梯度在只使用侧加热器 1 模式时最大，其他三种模式的径向梯度比较合适，且相差较小，符合晶体生长需求。3 增加底部加热器后，原料表面和生产腔处的等温线比较平滑，其他形式加热器配合加热时，原料表面和生长腔处的等温线存在突变。本文的工作将对电阻法 AlN 生长炉的设计具有指导意义，对电阻法制备 AlN 晶体中不同段加热器对温度的把控具有参考价值。

该成果得到了国家自然科学基金(51872164)、深圳市科技计划(JCYJ20210324141607019)，山东省重点研发计划(2019GGX103004)，山东省自然科学基金(ZR2021MB034)，山东省科学院国际合作计划(2019GHPY06)，山东大学晶体材料国家重点实验室合作项目(No. KF1911)，齐鲁工业大学科教产项目(2020KJC-YJ04)的资助。上述研究工作所涉及的计算模拟工作得到了济南超级计算技术研究院和国家超级计算济南中心的大力支持。

论文链接： <https://www.mdpi.com/1996-1944/14/23/7441>

以上研究工作部分作者来自我院工程仿真技术应用中心，该中心联合山东省科学院能源所引进加拿大工程院 Krishnaswamy Nandakumar 院士，在国家超算济南中心超算平台上部署了化工过程模拟、新材料性能仿真等工业软件，展开了与化工、新材料等本地龙头制造业和高等院校的合作。基于国家超算济南中心神威 E 级原型系统、山河超级计算平台计算资源，开发化工反应过程仿真、新材料在线模拟计算等高性能工业仿真软件，形成化工、新材料行业数字化设计、仿真应用服务平台，“立足济南、放眼山东、辐射全国”，打造山东省新旧动能转换下的化工、新材料行业数字化转型的“工业仿真引擎”，为“科创济南”建设贡献力量。

SaaS 化的超级计算平台——灵犀易算

灵犀易算基于济南超算中心资源，提供 WEB 桌面化操作界面

负载千款科学计算软件，无需安装即开即用

仅需 5 秒注册，最快 15 秒就可使用超算中心的资源

新用户注册 免费试用

www.yeesuan.com



更多资讯请关注微信公众号