

MOCVD噴灑頭式反應腔性能 與氮化鎵薄膜沉積化學反應場之數值模擬

Performance Analysis of a Showerhead Type MOCVD Reactor
and Chemical Reaction Field Simulation for GaN Thin Film Deposition

傅武雄

國立交通大學
機械系
教授

鄭泗東

國立交通大學
機械系
副教授

王威翔

國立交通大學
機械系
博士班研究生

許智勝

國立交通大學
機械系
碩士班研究生

陳柏霖

國立交通大學
機械系
碩士班研究生

關鍵詞(Keywords)

- 有機化學氣相沉積
Metal Organic Chemical Vapor Deposition
- 噴灑頭式進氣口
Showerhead
- 化學場模擬
Chemical Field Simulation

摘要(Abstract)

本文利用計算流體力學 (Computational Fluid Dynamics) 數值方法來分析一垂直噴灑頭式反應器內金屬有機化學氣相沉積 (MOCVD) 之熱流場與化學反應變化。參考模型由經濟部「氮化鎵矽基磊晶 MOCVD 設備之工業基礎技術之研究」科專計畫與工研院機械所共同開發之噴灑頭反應器。藉由改變腔體的操作壓力以及轉盤速度，可發現內流場隨著壓力的上升而變得越加紊亂，當轉盤

速提高時會消除反應腔體內渦流現象，其模擬的旨在於建立一方便調整製程各項參數之型，提供驗證以及最佳化設計，幫助半導體產業研究分析來改良薄膜沉積均勻度並降低工業化生產製造之成本。本研究以 ANSYS-FLUENT 模擬反應器腔體內溫度場分布、流場分布以及氮化鎵(u-GaN)或 p 型氮化鎵(p-GaN)沉積情形。利用熱流場分析腔體內是否有渦流產生造成薄膜沉積不均，再加入化學場反應式推導，以了解各階段化學反應，分析各項製程控制因素對薄膜成長速度及均勻性之影響。

This article presents the adoption of CFD (Computational Fluid Dynamics) numerical methods to analyze the thermal-flow field, chemical analysis, and deposition of GaN in a showerhead type vertical metal organic chemical vapor deposition (MOCVD) reactor. By changing the operating pressure and the rotation speed of the susceptor, the flow field in the

reaction chamber becomes extensively disordered. Increasing the speed of rotation will improve vortex elimination in the reaction chamber. The procedure of numerical simulation by solving the corresponding governing equations for these process parameters provides authentication and optimization of the design, research and analysis in the semiconductor industry to help improve thin film deposition uniformity, and reduces manufacturing costs. In this study, ANSYS-FLUENT was used to simulate the response in the reaction chamber with temperature field distribution, flow distribution and GaN (u-GaN) or p-type GaN (p-GaN) thin film deposition. Use of heat flow field analysis to investigate whether vortex is generated in the chamber causing uneven film deposition with the addition of the chemical reaction formula may help to understand the various stages of the chemical reaction and its effects on growth and uniformity of the deposited thin film.

1. 前言

金屬有機物化學氣相沉積(Metal Organic Chemical Vapor Deposition MOCVD)製程技術為氮化鎵(GaN)薄膜磊晶廣泛使用方式[1~3],其基本原理為氣態的金屬有機物三甲基鎵(TMGa)稀釋於運輸氣體中注入反應室內,在高溫基座上的載片表面, TMGa 和 NH_3 發生反應,沉積形成奈米到微米厚度的 GaN 晶體薄膜。MOCVD 技術的挑戰為精確控制大面積或多載片表面上沉積層的成分一致性和厚度均勻性,保證製程的重複性以及在批量生產環境下獲得較高的生產效率。為了抑

制 TMGa 與 NH_3 的寄生反應,反應氣體在進入反應腔後才開始混合,使反應腔內的氣體流動存在強烈的剪切與混流。反應物氣體的混合、加熱以及在氣體與壁面形成的附面層中發生化學反應和沉積,此過程涉及大量複雜的流體力學計算和現象[4~6]。此外,對於薄膜沉積的化學反應過程,其反應速率隨溫度升高呈指數增加,晶體薄膜層的均勻性主要依賴基座溫度均勻性,然而,對於高溫製程的 GaN 而言,化學反應速率極快,晶體薄膜的生長和均勻程度更依賴於反應物的運輸,也依賴於流動條件。因此,研究反應腔內的熱浮力效應、旋渦、混合這些流體力學現象的發生機制及其對 MOCVD 設備狀況和薄膜生成的影響,需提出改善流場條件的控制手段,對於 GaN-MOCVD 設備反應腔的結構設計和最佳化運作都為關鍵。

MOCVD 設備腔體內發生的化學反應相當複雜。腔體噴入反應氣體三甲基鎵(TMGa)及氨氣(NH_3),對 GaN 薄膜有直接影響的氣相化學反應(gas phase reaction)主要有 2 種路徑,如圖 1 所示[7]。圖 1 上方的路徑為噴入氣體在低溫區所進行的化學反應式, TMGa 及 NH_3 形成路易士-酸鹼化合物 $\text{TMGa}:\text{NH}_3$, 隨後分解一個甲基形成 $\text{DMGa}:\text{NH}_2$, 此時的形式有部分在載盤(susceptor)上形成 GaN 薄膜,其餘則聚集成較大分子並被排出,造成資源的浪費。圖 1 下方的路徑則為噴入氣體在高溫區所進行的化學反應。在高溫時 TMGa 直接分解成 DMGa , 接著分解成 MMGa , 每個步驟皆會分解出一個甲基,最後剩下 Ga 離子,在載盤上與 N 形成 GaN 薄膜。

更完整的內容

請參考【機械工業雜誌】377期・103年8月號

每期220元・一年12期2200元

劃撥帳號：07188562 工業技術研究院機械所

訂書專線：03-591-9342

傳真訂購：03-582-2011

機械工業雜誌官方網站：www.automan.tw