材料、结构及工艺

DOI：10.16818/j.issn1001－5868.2024052603

采用正交试验的喷淋式 HVPE 氧化镓生长腔仿真研究

吴诗颖，陈　琳*，蒋少清，郭方正，陶志阔
（南京邮电大学 电子与光学工程学院、柔性电子学院，南京 210023）

摘　要： 第三代半导体材料 α-Ga_2O_3 因具有高宽禁带及优异的巴利加优值，被广泛应用于高功率器件。在 α-Ga_2O_3 的诸多生长方法中，氢化物气相外延法（HVPE）可以满足制备大尺寸 α-Ga_2O_3 晶圆对生长速率、质量和成本的要求。文章对 α-Ga_2O_3 的喷淋式 HVPE 生长腔进行了生长过程的三维数值模拟，并引入正交试验方法对基于计算流体力学模拟的生长参数进行分析，系统且有效地评估了参数对生长结果的作用。研究结果表明，大尺寸 α-Ga_2O_3 晶圆的生长速率、均匀性与衬底倾斜角度、O_2 和 N_2 入口速率、GaCl 出口下倾角以及喷淋头的结构密切相关；同时提出了参数的优化组合，为工业上获得生长速率和生长均匀性均衡的外延层提供参考。

关键词： α-Ga_2O_3；HVPE；正交试验；生长速率；均匀性
中图分类号： TN305.5；TN304.2；TN302　**文章编号：** 1001－5868(2024)06－0910－08

Numerical Study on Hydride Vapor-Phase Epitaxy Chamber with Showerhead for Gallium Oxide Growth using Orthogonal Experiments

WU Shiying, CHEN Lin, JIANG Shaoqing, GUO Fangzheng, TAO Zhikuo
(College of Electronic and Optical Engineering, College of Flexible Electronics, Nanjing University of Posts and Telecommunications, Nanjing 210023, CHN)

Abstract: The third-generation semiconductor material α-Ga_2O_3 is widely used in high-power electronic devices owing to its wide bandgap and excellent Baliga figure of merit. Among many growth methods of α-Ga_2O_3, hydride vapor-phase epitaxy (HVPE) can meet the requirements of growth rate, quality, and cost in preparing large-scale α-Ga_2O_3 wafers. A three-dimensional numerical simulation of the α-Ga_2O_3 growth process in HVPE growth chamber with showerheads was conducted to systematically and effectively evaluate the effect of parameters on growth results. The orthogonal experimental method was introduced to analyze the growth parameters based on computational fluid dynamics (CFD) simulations. The results indicate that growth rate and uniformity are closely related to the substrate tilt angle, O_2 inlet rate, N_2 inlet rate, GaCl outlet dip angle, and structure of showerheads. This study proposes an optimized combination of parameters, providing a useful reference for achieving a balance between growth rate and growth uniformity of the epitaxial layer in actual experiments.

Key words: α-Ga_2O_3; HVPE; orthogonal experimental method; growth rate; uniformity

收稿日期：2024－05－26.
基金项目：国家自然科学基金项目(61574079)；江苏省光电信息功能材料重点实验室开放课题项目(TK222018).
* **通信作者：**陈　琳

0　引言

第三代超宽禁带半导体材料 α-Ga_2O_3 的禁带带隙(5.3 eV[1])和巴利加优值(6 726[2])与其他一至三代的半导体材料及 β-Ga_2O_3(4.85 eV 与 3 214[2])相比更具优势，尤其是在制备高温、高频、大功率器件方面，且 α-Ga_2O_3 的禁带宽度位于深紫外(DUV)波段[3]，基于 α-Ga_2O_3 材料的深紫外探测器、传感器和功率电子器件已成为热门研究方向之一，并被深入研究[4-5]。

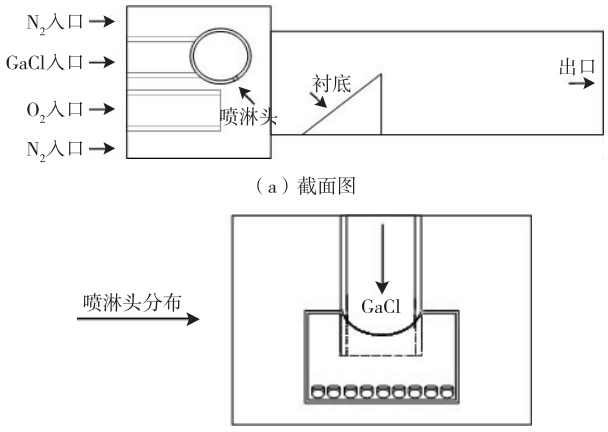
目前，α-Ga_2O_3 的合成方法包括：金属有机化学气相沉积(MOCVD[6-7])、雾化学气相沉积(Mist-CVD[8-9])和氢化物气相外延(HVPE[10])方法等。其中，HVPE 法具有装置简单、设备维护成本低以及生长速率高的优势，能够成功地在衬底上生长厚层 α-Ga_2O_3[10-12]。采用 HVPE 法制备大尺寸的 α-Ga_2O_3 晶圆，有望在生长速率、质量和成本方面达到商用要求。在生长腔体的设计和生长参数的调试与优化上，计算流体力学(CFD)仿真具有重要价值[13]。采用 HVPE 法模拟生长 α-Ga_2O_3 单晶，通过 GaCl 作为Ⅲ族前体实现高纯度的 α-Ga_2O_3 高速外延生长[11]。刘庆东等[12]对使用 GaCl 和 $GaCl_3$ 双反应源的 HVPE 法制备 α-Ga_2O_3 单晶的模拟结果表明，在面内均匀度为 10.7%条件下，平均生长速率可以达到 90 μm/h。

常用的 HVPE 法生长设备分为立式和卧式两种基本结构，其中，卧式生长设备具有建造成本低、反应前体补充和进出样机构简单、维护方便等优点。但由于卧式生长腔体缺少轴向对称性，在衬底上生长的 α-Ga_2O_3 存在横向均匀性差的问题。研究发现采用喷淋式进气设计，可在一定程度上改善这一问题[14]。通过对加入喷淋头的卧式 HVPE 系统进行 α-Ga_2O_3 的生长仿真研究，以 GaCl 和 O_2 作为前体，由载气从外部引入，对生长腔体进行三维 CFD 数值模拟。

常用的控制变量法会增加实验的复杂性和成本，限制实验的有效性，无法泛化到实际实验中。而正交试验可以减少实验次数、缩短实验周期、提高实验效率。因此，本文采用正交试验设计，以找出最佳工艺条件，获得最佳试验结果，并给出工艺优化方案。根据生长工艺中的影响因素和各因素水平，采用 $L_{16}(4^5)$ 正交表对多物理场和过程参数进行量化，并通过极差分析来研究 GaCl 出口下倾角、O_2 入口速率、N_2 速率、衬底倾斜角度和喷淋头结构等工艺参数对最佳薄膜平均生长速率和均匀性的影响。优化得到的参数可以为实际生长实验提供理论指导。

1　反应器与模型

由于参与反应的气体前体混合物进入反应室可能会引起寄生反应，并产生更复杂的预反应，进而影响薄膜沉积的均匀性。为防止金属 Ga 气源和 O_2 进入入口后立即混合，同时为制造兼具高生长速率和高均匀性的 α-Ga_2O_3 薄膜，参考 Pozina 等[14]提出的 HVPE 反应器，构建了具有喷淋头的水平放置的三维 HVPE 反应器，如图 1 所示。从图中可以看到，反应器由气体入口、室壁、衬底和气体出口构成。气体入口用于将载气(N_2)携带的Ⅲ族金属有机前体和Ⅵ族气体前体送入反应器中。气源进入反应室后，在隔离气体的作用下，会单独扩散，直至接近衬底的高温区域后，充分混合并发生反应。



(a) 截面图

(b) 俯视图

图 1　HVPE 反应器的几何结构

在该系统中，GaCl 作为Ⅲ族源与 O_2 反应，而为防止 GaCl 与 O_2 过早反应，使用 N_2 载气将 GaCl 气体输送到反应腔体中。进气口和出气口的类型分别设为 Velocity-inlet 和 Outflow。其余均设置为 Wall。各反应气体前体是不可压缩的理想气体，均考虑重力的影响。衬底倾斜放置在反应腔体内，其尺寸为 90 mm×90 mm。α-Ga_2O_3 的生长温度约为 450～700 ℃[15]，设定衬底温度为 900 K。生长腔体内恒压，反应皆在标准大气压下进行。

当采用 HVPE 法生长 α-Ga_2O_3 时，反应物为 GaCl，O_2 等气体，反应器内部的流体动力学行为和流场分布会影响薄膜的均匀性。流体动力学行为与衬底倾斜角度、O_2 入口速率、N_2 入口速率和 GaCl

出口下倾角等参数密切相关。进行多次尝试性实验后，发现当 GaCl 喷淋头出口下倾角为 30°时，得到的结果较好。所以，设定 GaCl 喷淋头出口的下倾角为 30°，将其余三个因素分为四个连续的因素水平来表示变化范围。正交影响因素和因素水平如表 1 所示。本研究采用 $L_{16}(4^5)$正交表，空开最后一列进行优化组合试验。

表 1 α-Ga_2O_3 生长的影响因素

影响因素	因素水平			
	1	2	3	4
衬底倾斜角度/(°)	30	35	40	45
O_2 入口速率/(m·s^{-1})	0.08	0.1	0.12	0.15
N_2 入口速率/(m·s^{-1})	0.08	0.1	0.12	0.1

常用的喷淋头是统一的排孔分布。张博闻等[16]研究嵌入多孔介质对沉积速率的影响，发现适当的孔隙率和厚度可使膜的均匀性得到提高。根据不使用喷淋头时衬底表面生长的 α-Ga_2O_3 沉积速率的分布[17]，提出了对喷淋头个数和喷头分布位置的优化方法。通过对比不同数量和不同位置分布的喷淋头对薄膜生长速率和均匀性的影响，得出最佳的喷淋头结构。

2 仿真与结果分析

2.1 正交表考察各因素影响因子及优化生长参数

研究采用高效率、快速、经济的正交试验，根据正交性从全面试验中挑选出部分有代表性的均匀分布点进行试验。正交试验设计时选取的试验点分布均匀，具有较强的代表性，能够满足综合数值模拟的需求。文献[18]通过正交测试分析得到基于 3D 数值模拟研究封闭式喷头(CCS)MOCVD 反应器中生长速度最快和生长均匀性最佳的优化参数组合。通过正交试验设计研究 HVPE 生长 α-Ga_2O_3 的生长参数，合理组织参数，完成完整分析的最小化试验并提高计算效率。根据因素和水平，选用合适的正交阵列来量化参数。最后通过极差分析了生长参数对最佳薄膜生长速率和最佳薄膜均匀性的影响。

生长速率是通过面积的加权平均值来计算的，即将所选场变量和面积的乘积之和除以表面的总面积，可表示为：

$$\frac{1}{A}\int \varnothing \mathrm{d}A = \frac{1}{A}\sum_{i=1}^{n} \varnothing_i \mid A_i \mid \tag{1}$$

而均匀性是通过均匀性指数来衡量的，即指定的场变量在表面上的变化，其中值为 1 表示最高的均匀性。本文均匀性指数按面积加权：面积加权的均匀性指数捕捉数量的变化。指定场变量 $\varnothing_i$ 的面积加权均匀性指数(γ_a)的计算式可表示为：

$$\gamma_a = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n}[(\mid \varnothing_i - \overline{\varnothing_a} \mid A_i)]}{2 \mid \overline{\varnothing_a} \mid \sum_{i=1}^{n} A_i} \tag{2}$$

式中，i 是具有 n 个面的刻面体的表面指数，$\overline{\varnothing_a}$ 是该表面上的场变量的平均值：

$$\overline{\varnothing_a} = \frac{\sum_{i=1}^{n} \varnothing_i A_i}{\sum_{i=1}^{n} A_i} \tag{3}$$

为同时保持 α-Ga_2O_3 的高均匀性和高生长速率，定义考察指标 X 来评价有效衬底上 α-Ga_2O_3 的生长质量，其计算式为：

$$X = \frac{\text{生长速率}}{\text{平均生长速率}} \times 35\% + \text{均匀性} \times 65\% \tag{4}$$

如表 2 所示，第一列从 1 到 16 的数字代表 16 个模拟案例。第 2～4 列代表不同的影响因素，即 A(衬底倾斜角度)，B(O_2 入口速率)，C(N_2 入口速率)。表格右侧的右栏列出了指标：每种薄膜的平均生长速率、薄膜的均匀性和考察指标 X。

表 2 在三个因素影响下的 α-Ga_2O_3 生长结果

模拟案例	A	B	C	生长速率/(μm·h^{-1})	均匀性	X
1	1(30°)	1(0.08 m/s)	1(0.08 m/s)	2.404 3	0.904 0	0.926
2	1(30°)	2(0.1 m/s)	2(0.1 m/s)	2.415 2	0.898 5	0.924
3	1(30°)	3(0.12 m/s)	3(0.12 m/s)	1.165 9	0.671 6	0.601
4	1(30°)	4(0.15 m/s)	4(0.1 m/s)	2.954 2	0.860 8	0.976
5	2(35°)	1(0.08 m/s)	2(0.1 m/s)	2.146 5	0.910 8	0.894
6	2(35°)	2(0.1 m/s)	1(0.08 m/s)	2.869 6	0.895 5	0.986
7	2(35°)	3(0.12 m/s)	4(0.1 m/s)	2.860 2	0.909 4	0.994
8	2(35°)	4(0.15 m/s)	3(0.12 m/s)	1.611 4	0.678 9	0.668
9	3(40°)	1(0.08 m/s)	3(0.12 m/s)	1.388 4	0.791 8	0.710
10	3(40°)	2(0.1 m/s)	4(0.1 m/s)	2.684 5	0.917 0	0.974
11	3(40°)	3(0.12 m/s)	1(0.08 m/s)	3.157 9	0.877 5	1.015
12	3(40°)	4(0.15 m/s)	2(0.1 m/s)	3.397 5	0.918 7	1.076
13	4(45°)	1(0.08 m/s)	4(0.1 m/s)	2.266 2	0.895 4	0.901
14	4(45°)	2(0.1 m/s)	3(0.12 m/s)	2.229 5	0.880 7	0.887
15	4(45°)	3(0.12 m/s)	2(0.1 m/s)	3.090 7	0.895 3	1.017
16	4(45°)	4(0.15 m/s)	1(0.08 m/s)	3.098 2	0.836 5	0.980

通过各因素的水平之和来判断各因素的排序和最优水平的方法如下：(1)K_1，K_2，K_3，K_4 代表各水平的和值；(2)极差 $R = \max\{K_1, K_2, K_3, K_4\} - \min\{K_1, K_2, K_3, K_4\}$ 表示各种因素的影响。变化范围越大，则该因素的水平变化对实验结果影响越大，视为主要影响因素，具体的值见表 3。

由表 2 和表 3 可知，最好的实验结果是案例 12(A3B4C2)，而根据极差，实验结果最好的应该是 A4B2C2。计算 A3B4C2 和 A4B2C2 的 X 分别为

1.082 736 826 5 和 0.776 102 380 5。显然，A3B4C2 的结果远远大于 A4B2C2。根据极差，各影响因素排序为：C＞A＞B。N_2 入口速率因素影响最大的原因是 N_2 携带前体前进，如果速率过小，因 GaCl 分子量大，则重力会使得前体降落在衬底前端，从而导致衬底上的 α-Ga_2O_3 生长速率分布不均匀；如果速率过大，则 N_2 带动前体前进的速度过大，前体流失，衬底上的 α-Ga_2O_3 生长速率普遍较低。而作为被 N_2 携带的前体之一，O_2 分子量远小于 GaCl，重力对它扩散的影响小于对 GaCl 的影响，因此 O_2 入口速率的因素影响较小。根据影响程度的排序固定衬底倾斜角度（因素 A）和 O_2 速率（因素 B）分别为 40°和 0.15 m/s，进一步模拟 N_2 入口速率（因素 C）对 α-Ga_2O_3 生长结果的影响。设定 N_2 入口速率的参数分别为 0.08，0.085，0.09，0.095，0.1，0.105，0.11，0.115 和 0.12 m/s。生长速率和均匀性的模拟结果列于表 4 中。

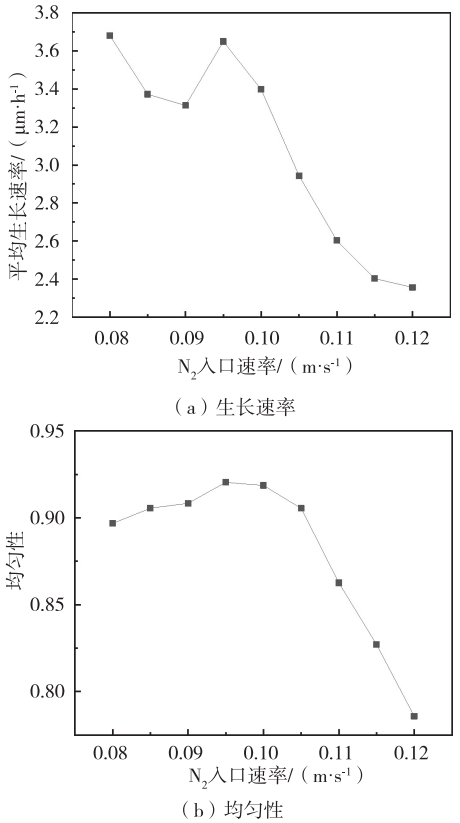
表 3　对 α-Ga_2O_3 生长结果的极差分析

参数	A	B	C
K_1	3.427	3.431	3.907
K_2	3.542	3.771	3.911
K_3	3.775	3.627	2.866
K_4	3.785	3.7	3.845
R	0.358	0.34	1.045

表 4　不同 N_2 入口速率下的 α-Ga_2O_3 生长结果

案例	N_2 入口速率/($m \cdot s^{-1}$)	生长速率/($\mu m \cdot h^{-1}$)	均匀性	X
1	0.08	3.681 4	0.896 8	0.981
2	0.085	3.693 3	0.905 6	0.988
3	0.09	3.629 0	0.908 4	0.983
4	0.095	3.650 2	0.923 7	0.995
5	0.1	3.397 5	0.918 7	0.965
6	0.105	3.223 9	0.905 5	0.937
7	0.11	2.850 6	0.862 6	0.869
8	0.115	2.631 0	0.827 1	0.822
9	0.12	2.355 8	0.785 8	0.766

图 2 是不同 N_2 入口速率下 α-Ga_2O_3 的生长速率和均匀性仿真 xy-plot 图。随着 N_2 入口速率的增大，衬底上平均生长速率先增大后减小，均匀性也在逐渐变差。由于 GaCl 喷淋头出口的下倾角度是 30°，GaCl 气体从喷淋头出来后会受重力的影响移动到衬底的前端，因而 GaCl 摩尔浓度的最大值会出现在衬底的前端。当 N_2 的流速增大时，带动 GaCl 爬升的气流也会增大，前体气体爬升衬底的速度就会加快，前体流失，在衬底前端停留的时间减小，使得生长速率减小。当 N_2 入口速率小于 0.1 m/s 时，N_2 流速相对 GaCl 和 O_2 的流速较小，因 GaCl 分子量大，带动 GaCl 和 O_2 爬升的气流较小，爬升衬底的速率低，平均生长速率和均匀性还能维持在一定的水平。而当 N_2 入口流速大于 0.1 m/s 时，N_2 带动 GaCl 和 O_2 爬升的气流大，平均生长速率会随着 N_2 速率的增大一直减小。



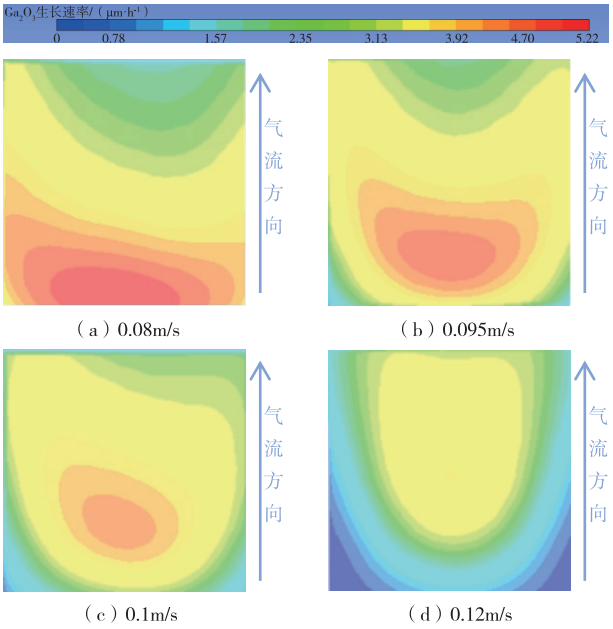
（a）生长速率

（b）均匀性

图 2　不同 N_2 入口速率下 α-Ga_2O_3 的生长速率和均匀性曲线图

图 3 是不同 N_2 入口速率下的衬底生长速率仿真云图。α-Ga_2O_3 的生长速率的最大值会随着 N_2 入口速率增大而减小，同时最大值的位置也从衬底的前端逐渐移动到衬底的后端。由于 GaCl 喷淋头出口的下倾角度是 30°，GaCl 气体从喷淋头出来后会受重力的影响移动到衬底的前端，因而 GaCl 摩尔浓度的最大值会出现在衬底的前端，当 N_2 的流速增大时，带动 GaCl 爬升的气流也会增大，前体气体爬升衬底的速度就会加快，在衬底前端停留的时间减小，使得生长速率的最大值减小。当 N_2 速率为 0.08，0.095 和 0.1 m/s 时，N_2 流速相对 GaCl 和 O_2 的流速较小，N_2 带动 GaCl 和 O_2 爬升的气流较小，生长速率的最大值都出现在衬底前端。但当 N_2

速率为 0.12 m/s 时，N_2 带动 GaCl 和 O_2 爬升的气流较大，使得部分 O_2 和 GaCl 未能混合就往上扩散，所以生长速率的最大值出现在衬底中端。由于 GaCl 喷淋头出口的下倾角度是 30°，前体到达衬底前端后扩散的时间较少，而在前体爬升衬底的过程中 GaCl 和 O_2 会一起扩散融合，所以 α-Ga_2O_3 在衬底前端上横向生长的均匀性比在衬底后端生长的 α-Ga_2O_3 均匀性差。由于前体被 N_2 带动爬升衬底的过程中会反应生成 α-Ga_2O_3，所以衬底上会形成阶梯状的生长速率分布。这也是纵向均匀性不如横向均匀性的原因所在。



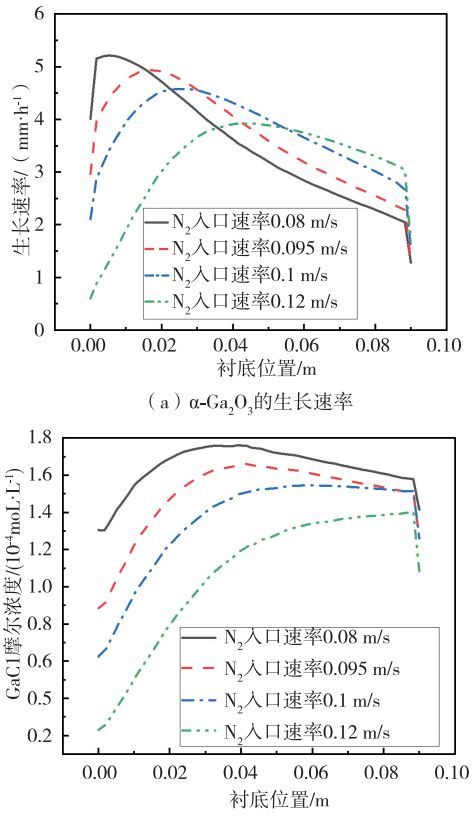
（a）0.08m/s （b）0.095m/s

（c）0.1m/s （d）0.12m/s

图 3 不同 N_2 入口速率下 α-Ga_2O_3 衬底生长速率仿真云图

图 4 所示为不同 N_2 入口速率下沿气流方向的 α-Ga_2O_3 生长速率和 GaCl 摩尔浓度仿真结果。由图 4(a)可见，随着 N_2 入口速率的增大，衬底上 α-Ga_2O_3 生长速率的最大值在逐渐减小，同时最大值也从衬底的前端逐渐移动到衬底的中端。这是因为当 N_2 的流速增大时，带动 GaCl 扩散的气流也会越强，沿衬底爬升的速度就会加快，在衬底前端停留的时间短，使得生长速率的最大值减小。当 N_2 速率为 0.08，0.095 和 0.1 m/s 时，相对 GaCl 和 O_2 的流速较小，N_2 带动 GaCl 和 O_2 爬升的气流较小，生长速率的最大值都出现在衬底前端。但当 N_2 速率为 0.12 m/s 时，N_2 带动 GaCl 和 O_2 爬升的气流较大，使得部分 O_2 和 GaCl 未能混合就往上扩散，所以生长速率的最大值出现在衬底中端。

由图 4(b)可见，GaCl 摩尔浓度从衬底前端到后端遵循先增大后减小的曲线变化规律。先增大的原因是 GaCl 出口下倾角为 30°，GaCl 摩尔浓度最大值会出现在衬底前端。随着 N_2 入口速率的增大，从衬底前端到后端曲线斜率绝对值越来越大，这是因为 N_2 入口速率越小，衬底前端生长速率越大，消耗了更多的 GaCl 和 O_2，从而导致衬底后端生长速率越小。此外，在衬底前端，GaCl 摩尔浓度随着 N_2 入口速率的增大而减小，其原因可能是 N_2 流速越大，爬升速度就会加快，所以衬底前端的 GaCl 分布更均匀，摩尔浓度随之降低。



（a）α-Ga_2O_3的生长速率

（b）GaCl摩尔浓度仿真曲线图

图 4 不同 N_2 入口速率下的沿气流方向 α-Ga_2O_3 的生长速率和 GaCl 摩尔浓度仿真曲线图

2.2 喷淋头喷头数量对 α-Ga_2O_3 生长过程的影响

为研究出最佳的喷淋头结构从而生长出高质量、高生长速率的 α-Ga_2O_3 薄膜，对比了不同喷头数量对 α-Ga_2O_3 生长速率与生长均匀性的影响。沿用在 2.1 节中得到的最好实验结果的生长参数。设定衬底倾斜角度、O_2 入口速率、N_2 入口速率和 GaCl 喷淋头出口角度分别为：40°，0.15 m/s，0.095 m/s 和 30°。首先，为研究喷淋头喷头个数的影响，设定喷淋头喷头的个数分别为 9，8，7，6 和 5 个。使用不同个数喷头的仿真数据记录在表 5 中。

图 5 是不同喷头个数下衬底上的 α-Ga_2O_3 生长速率曲线图。随着喷淋头喷头的个数增加，α-Ga_2O_3 薄膜的生长速率和均匀性也随之提高。这是因为气体进入反应室后，GaCl 入口速度快，扩散不明显，几乎所有的 GaCl 都向衬底中心聚集，而当喷头个数增加后，气体的扩散效果增强，使得 GaCl 摩尔浓度分布会更均匀，衬底中心区域的 α-Ga_2O_3 的生长速率降低，所以整个衬底上 α-Ga_2O_3 薄膜的生长速率的极值差异减小。同时，由于 GaCl 气体总浓度是固定的，喷头个数越多，每个喷淋头出来的 GaCl 气体流速就越小，这使得 GaCl 沿衬底爬升的速度减小，所以 α-Ga_2O_3 的生长速率随着喷淋头喷头个数的增加而增加。因此，在研究中可以优先考虑多喷头的反应气体喷淋头模型。

表 5　喷头数量对 α-Ga_2O_3 生长的影响

喷淋头喷头个数	α-Ga_2O_3 生长速率/($\mu m \cdot h^{-1}$)	α-Ga_2O_3 的生长均匀性
9	3.650 2	0.923 7
8	3.343 0	0.922 8
7	3.073 9	0.917 0
6	2.623 8	0.898 2
5	2.347 0	0.898 1

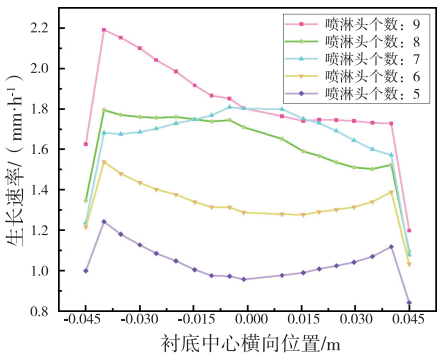


图 5　不同喷头数量对 α-Ga_2O_3 生长速率的影响

2.3　喷淋头喷头位置分布对 α-Ga_2O_3 生长过程的影响

Li[17] 等发现无喷淋头的情况下衬底上 α-Ga_2O_3 薄膜的沉积速率趋于正态分布，表面的沉积速率极差较大。所以优化喷淋头喷头位置分布同样可以有效提高薄膜的均匀性。选择 7 个喷头的方案进行位置的优化。7 个喷头的排列和相隔的距离，以及喷头以中心的喷头为轴线对称分布如图 6 所示。需要注意的是，$h1+h2+h3$ 是保持不变的。

图 7 是不同喷淋头位置分布下衬底上生长的 α-Ga_2O_3 的均匀性曲线图。由图 7 可知，喷淋头分布样式 4 生长的 α-Ga_2O_3 的均匀性最好。这是因为样式 4 喷淋头喷头的分布是“中间疏，两边密”。无喷淋头的情况下衬底上 α-Ga_2O_3 的沉积速率趋于正态分布，气体进入反应室后几乎聚集在衬底中心，而当喷头的分布是“中间疏，两边密”时，喷出来的 GaCl 摩尔浓度分布会很均匀，所以整个沉积区域的沉积速率的极值差异减小。样式 5 同样是“中间疏，两边密”的分布，但其均匀性相较样式 4 减小的原因应该是中心的 GaCl 分布过于稀疏，两边的分布过于密集，这使得喷出来的 GaCl 摩尔浓度会呈现出两边多中间少的分布曲线。GaCl 到达衬底后还会继续扩散，进一步降低了中心的 α-Ga_2O_3 沉积速率，所以样式 5 生成的 α-Ga_2O_3 的均匀性相较样式 4 减小。综上所述，采用“中间疏，两边密”的喷淋头分布方式生长的 α-Ga_2O_3 的均匀性最好。

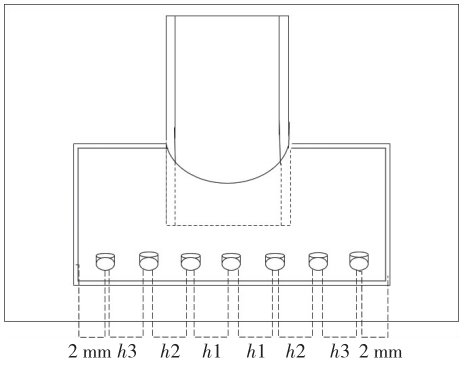


图 6　喷头分布图

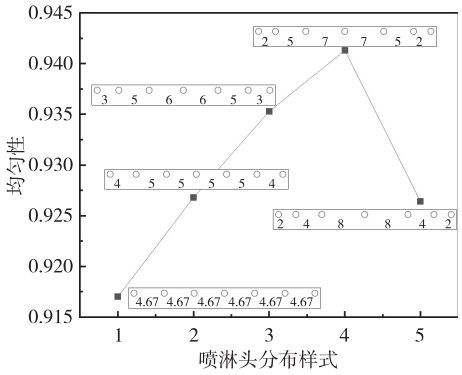


图 7　不同喷淋头位置分布下 α-Ga_2O_3 生长均匀性曲线图

3　小结

本文使用 CFD 方法对 α-Ga_2O_3 水平喷淋式 HVPE 生长腔进行了三维数值模拟。引入正交试验方法对生长参数进行分析。结果表明生长速率和均匀性与衬底倾斜角度、O_2 入口速率、N_2 入口速率、GaCl 出口下倾角以及喷淋头的结构密切相关。根据正交试验结果的极差排序确定影响因素顺序

为：N_2 入口速率＞衬底倾斜角度＞O_2 入口速率。固定衬底倾斜角度和 O_2 速率分别为 40°和 0.15 m/s，进一步模拟 N_2 入口速率对 α-Ga_2O_3 生长结果的影响。得出最佳工艺参数：衬底倾斜角度、O_2 入口速率、N_2 入口速率和 GaCl 喷淋头出口角度分别为 40°，0.15 m/s，0.095 m/s 和 30°。研究喷淋头喷头个数的影响，结果显示随着喷淋头喷头的个数增加，α-Ga_2O_3 薄膜的生长速率和均匀性都随之增加，因此可以优先考虑多喷头的反应气体喷淋头模型。研究喷淋头喷头位置分布的影响，结果显示“中间疏，两边密”的喷淋头分布生长的 α-Ga_2O_3 的均匀性是最好的。

通过 HVPE 方法生长 α-Ga_2O_3 外延膜具有广阔的前景。研究进一步提出了参数的优化组合，优化得到的参数可以为工业上获得生长速率和生长均匀性之间平衡的外延层提供有用的参考，帮助节省时间成本并提升实际生长实验的效率。后续可以在该模型的基础上，对非水平放置或非喷淋头的 HVPE 系统进行三维建模，以及调控衬底温度、衬底放置位置等参数并对其于衬底上 α-Ga_2O_3 薄膜生长的影响进行研究和分析，从而为大面积均匀外延提供理论优化参数。

参考文献：

[1] 贾晓萍，宁平凡，杨邻峰，等. 超宽禁带半导体 α-Ga_2O_3 肖特基二极管仿真研究[J]. 电子器件，2022，45(4)：855-859.
Jia Xiaoping，Ning Pingfan，Yang Linfeng，et al. Simulation study of ultra wide bandgap semiconductor α-Ga_2O_3 Schottky diode[J]. Electronic Devices，2022，45(4)：855-859.

[2] Wang W，Hu S，Wang Z，et al. Exploring heteroepitaxial growth and electrical properties of α-Ga_2O_3 films on differently oriented sapphire substrates[J]. Journal of Semiconductors，2023，44(6)：50-55.

[3] Sun X Y，Wang Z P，Gong H H，et al. *M*-plane α-Ga_2O_3 solar-blind detector with record-high responsivity-bandwidth product and high-temperature operation capability[J]. IEEE Electron Device Letters，2022，43(4)：541-544.

[4] Lee M，Yang M，Lee H Y，et al. The growth of HVPE α-Ga_2O_3 crystals and its solar-blind UV photodetector applications [J]. Materials Science in Semiconductor Processing，2020，123(22)：105565.

[5] Boldbaatar S，Janardhanam V，Zumuukhorol M，et al. Temperature-dependent Schottky diode behavior of Ni Schottky contacts to α-Ga_2O_3 film epitaxially grown on sapphire substrate[J]. Materials Science in Semiconductor Processing，2023，163：107589.

[6] Gottschalch V，Merker S，Blaurock S，et al. Heteroepitaxial growth of α-，β-，γ- and κ-Ga_2O_3 phases by metalorganic vapor phase epitaxy[J]. Journal of Crystal Growth，2019，510：76-84.

[7] Sun H，Li K H，Castanedo C G T，et al. HCl flow-induced phase change of α-，β-，and ε-Ga_2O_3 films grown by MOCVD [J]. Crystal Growth & Design，2018，18(4)：2370-2376.

[8] Wang X，Mu W，Xie J，et al. Rapid epitaxy of 2-inch and high-quality α-Ga_2O_3 films by mist-CVD method[J]. Journal of Semiconductors，2023，44(6)：56-62.

[9] Takane H，Kaneko K，Ota Y，et al. Initial nucleation scheme of Ga_2O_3 on (0001) sapphire by mist CVD for the growth of α-phase[J]. Japanese Journal of Applied Physics，2022，61(9)：099301.

[10] Yao Y，Okur S，Lyle L A M，et al. Growth and characterization of α-，β-，and ε-phases of Ga_2O_3 using MOCVD and HVPE techniques[J]. Materials Research Letters，2018，6(5)：268-275.

[11] Ning P，Grümbel J，Blaesing J，et al. Lattice vibrations and optical properties of α-Ga_2O_3 films grown by halide vapor phase epitaxy[J]. Semiconductor Science and Technology，2020，35(9)：095001.

[12] 刘庆东，陈　琳，陶志阔，等. 双反应源气体 HVPE 生长 α-Ga_2O_3 的仿真优化研究[J]. 半导体光电，2021，42(2)：252-258.
Liu Qingdong，Chen Lin，Tao Zhikuo，et al. Simulation and optimization study on the growth of α-Ga_2O_3 by dual reaction source gas HVPE[J]. Semiconductor Optoelectronics，2021，42(2)：252-258.

[13] 汪久龙，赵思齐，李云凯，等. 无偏角 4H-SiC 同质外延温场分布系数的仿真及实验研究[J]. 半导体光电，2022，43(5)：909-913.
Wang Jiulong，Zhao Siqi，Li Yunkai，et al. Simulation and experimental study on temperature field distribution coefficient of 4H-SiC homoepitaxial growth without deviation angle[J]. Semiconductor Optoelectronics，2022，43(5)：909-913.

[14] Pozina G，Hsu C W，Abrikossova N，et al. Numerical modelling for the experimental improvement of growth uniformity in a halide vapor phase epitaxy reactor for manufacturing β-Ga_2O_3 layers[J]. Crystals，2022，12(12)：1790.

[15] 戴必胜，陈　琳，陶志阔，等. 氧化镓生长模拟中的流场与反应参数优化研究[J]. 半导体光电，2020，41(4)：527-530，547.
Dai Bisheng，Chen Lin，Tao Zhikuo，et al. Optimization of flow field and reaction parameters in simulation of gallium oxide growth[J]. Semiconductor Optoelectronics，2020，41(4)：527-530，547.

[16] 张博闻，吴　勇，杨　甫，等. 计算流体力学(CFD)在化学气相沉积(CVD)模拟仿真中的应用[J]. 材料保护，2022，55(9)：141-147.
Zhang Bowen，Wu Yong，Yang Fu，et al. Application of

computational fluid dynamics (CFD) in chemical vapor deposition (CVD) simulation[J]. Materials Protection, 2022, 55(9): 141-147.

[17] Li Q, Zhang Y, Ji B, et al. Improvement of SiC deposition uniformity in CVD reactor by showerhead with baffle[J]. Journal of Crystal Growth, 2023, 615: 127-255.

[18] Zhang Z, Fang H, Yan H, et al. Influencing factors of GaN growth uniformity through orthogonal test analysis[J]. Applied Thermal Engineering, 2015, 91: 53-61.

作者简介：

吴诗颖(2000—)，女，江苏省泰州市人，硕士研究生，电子信息专业，从事半导体材料仿真研究；

陈　琳(1980—)，男，主要研究方向为Ⅲ-Ⅴ族半导体材料和器件。