

# 基于COMSOL的PVT法AlN晶体生长仿真：温场对生长驱动力的影响

金雷，程红娟，徐永宽

中国电子科技集团公司 第四十六研究所 天津 300220

**引言：**AlN 具有宽禁带、高熔点、高热导率和耐化学腐蚀等优异性质，在发光二极管(LED)、激光二极管(LD)和日盲型紫外探测器等方面具有广泛的应用。PVT 法 AlN 晶体生长气氛传输过程如图1所示。

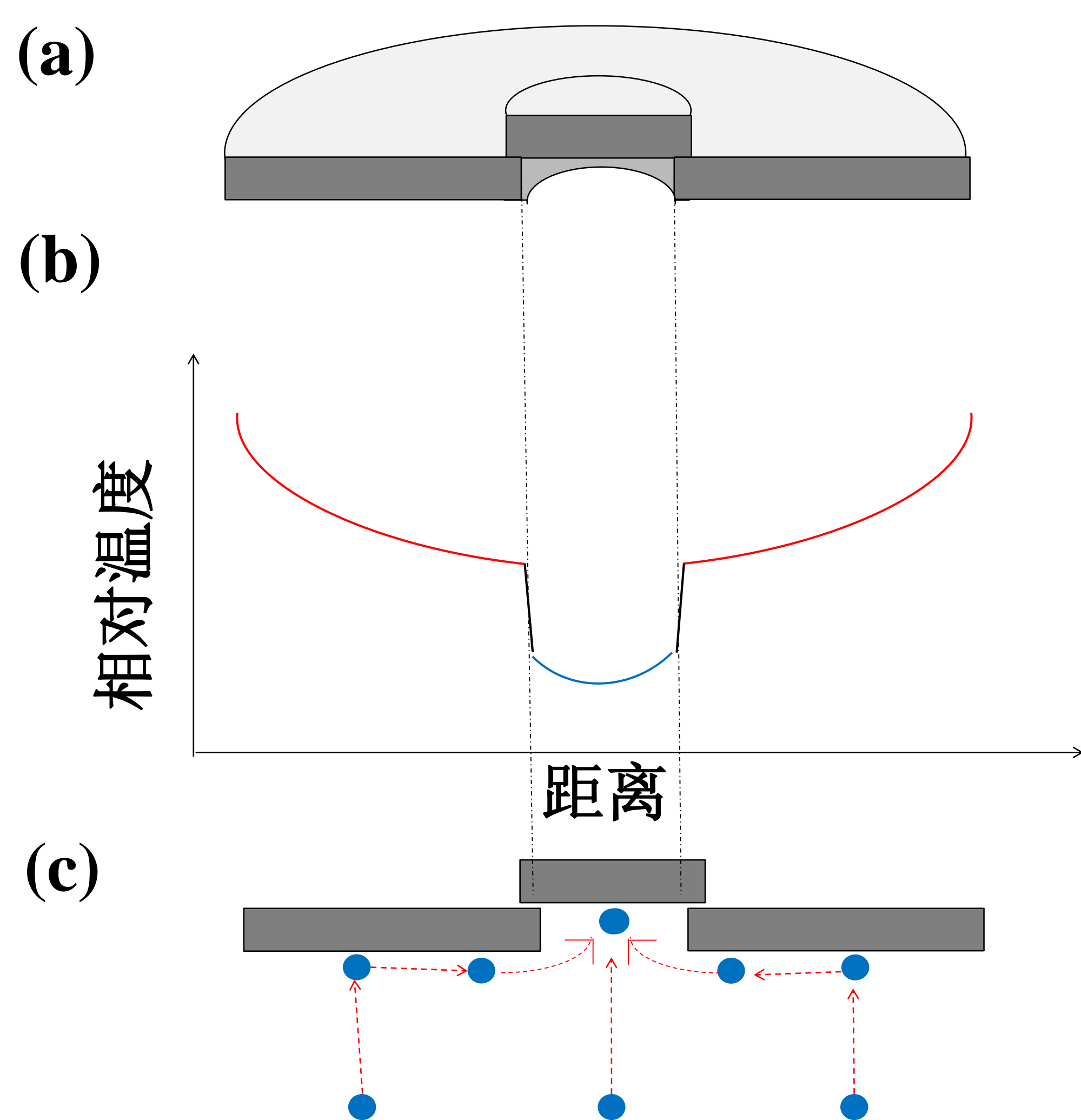


图 1. (a)-(c) AlN 晶体生长气氛传输过程

**计算方法：**采用 COMSOL Multiphysics® 软件 AC/DC 模块对 AlN 晶体生长装置中的温度分布进行仿真，模拟结果如图2所示。COMSOL 模拟建模中网格结构为设定的计算单元，坩埚内部计算单元面积小于  $0.09 \text{ mm}^2$ ，设定加热体材质为钨，其底部位于线圈底部上方 5-20mm，模拟电流为 100-200A，电源频率为 2-4 kHz。

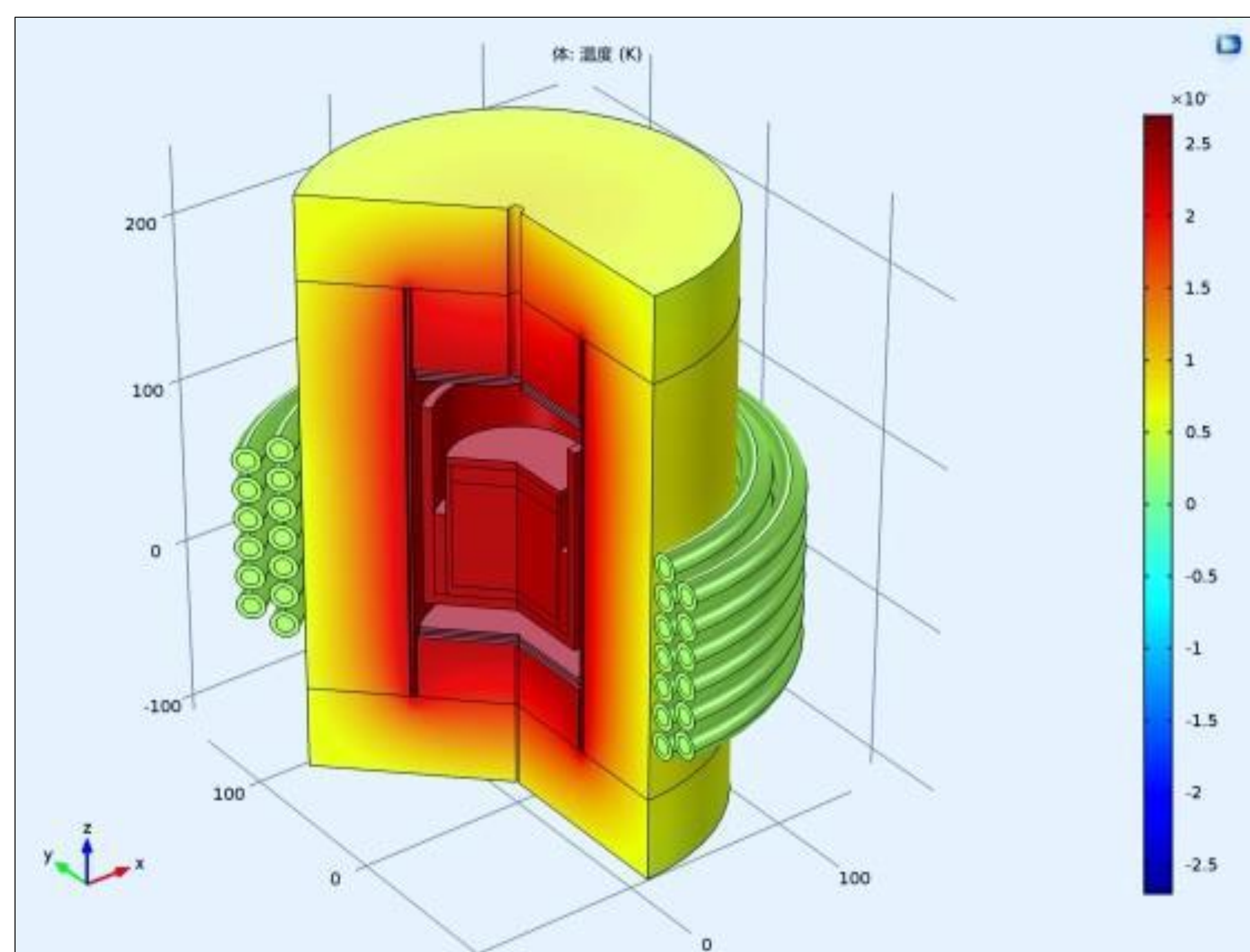


图 2. COMSOL 晶体生长装置 3D 温场分布图

**结果：**衬底 I 表面并没有温度跳跃的现象，即不存在温度阱；衬底 II 和衬底 III 表面温度产生了温度跳跃现象，表面温度跳跃  $\Delta T_1$  为 1.3 K， $\Delta T_2$  为 1.5 K。

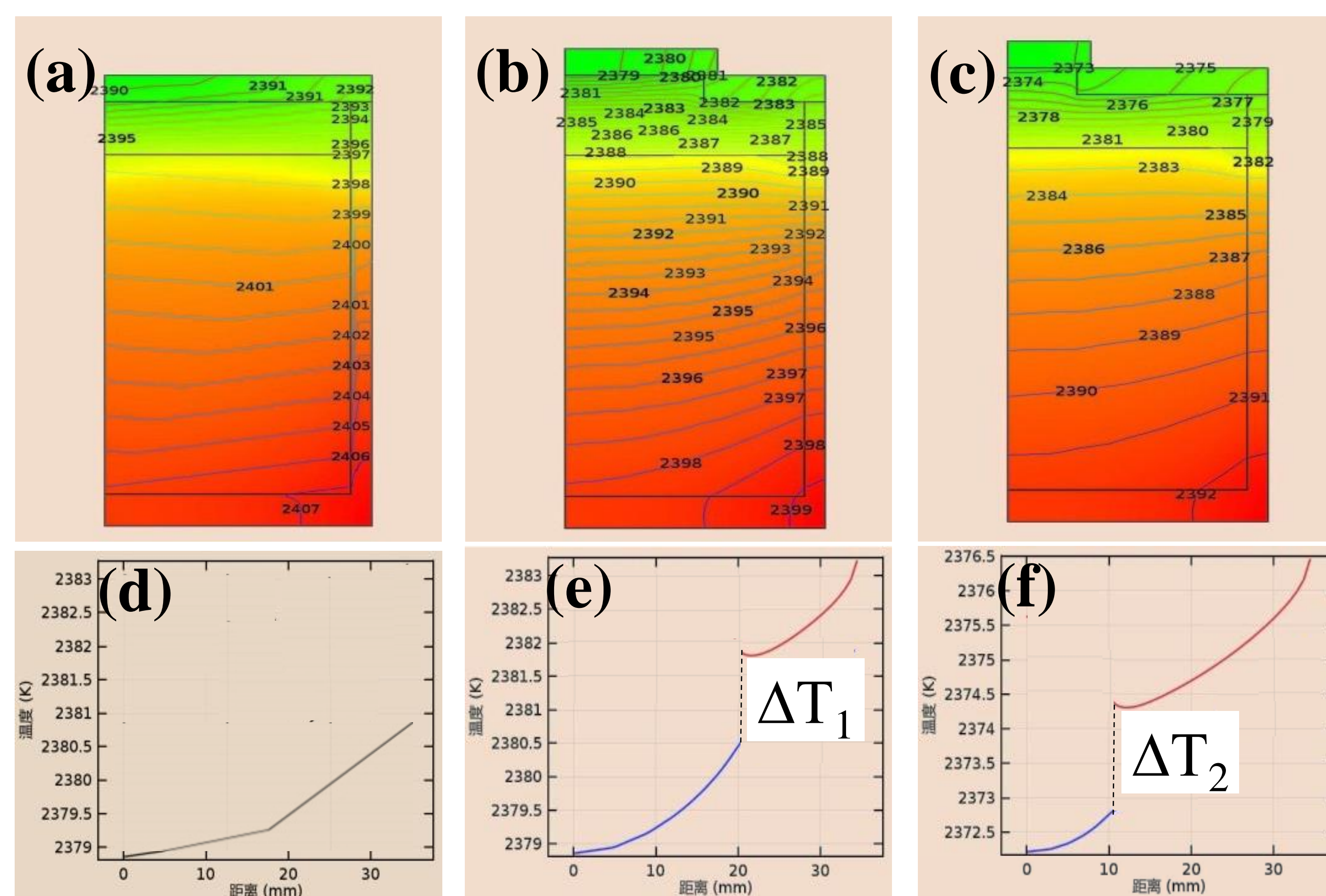


图 3. 坩埚内部温度分布模拟结果 (a)-(c)为衬底I、衬底II和衬底III的温场模拟结果；(d)-(f)为相应衬底表面的温度分布图

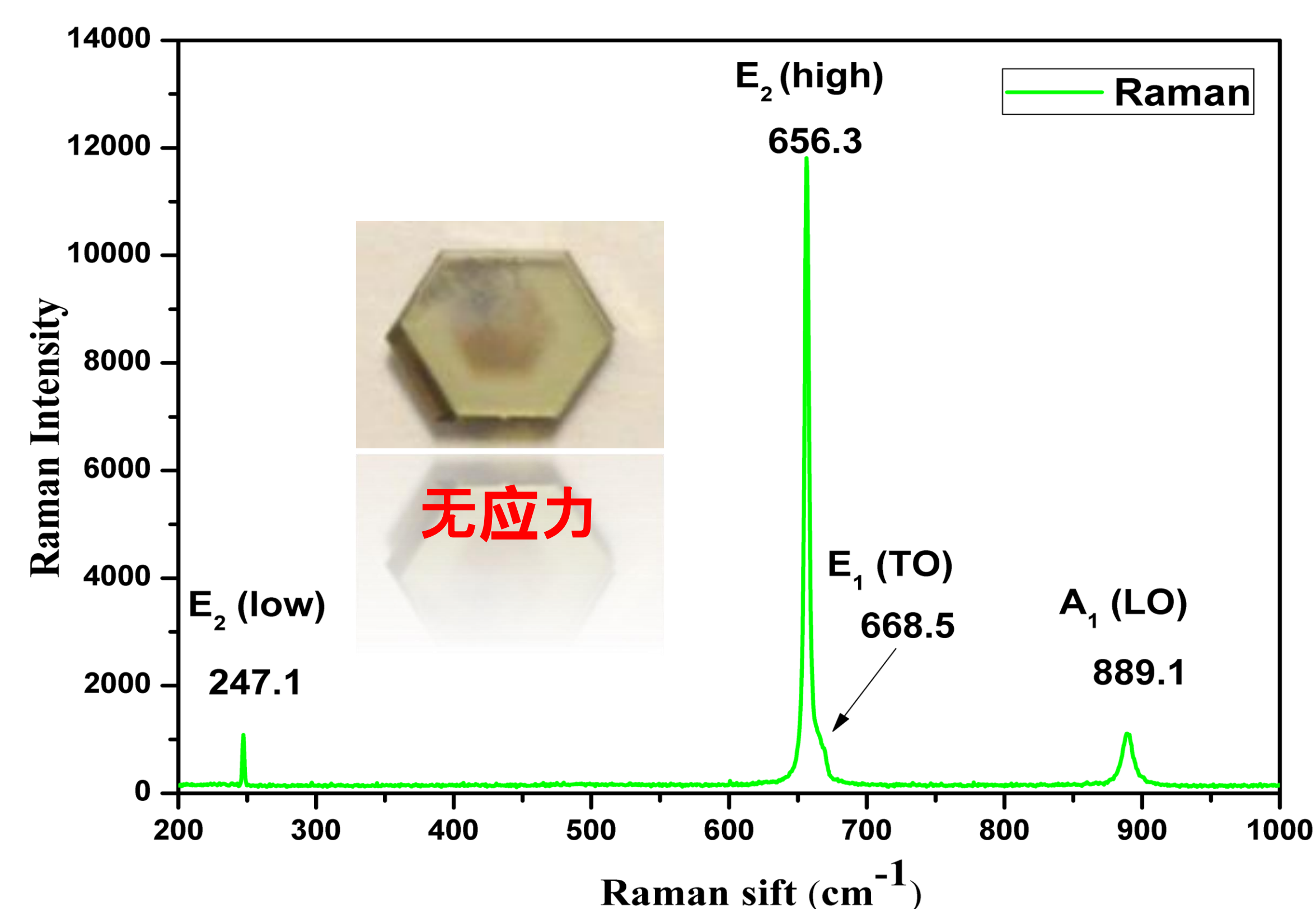


图 4. AlN 单晶的拉曼位移曲线图谱

**结论：**分别从理论和实验上证实了坩埚内部温度分布可以通过衬底结构调节，并实现了对 AlN 晶体形核位置和形核数量的控制，最终制备出无应力高质量 AlN 单晶。

## 参考文献：

1. JIN L., ZHANG H Y, HAN J C, et al. Control of AlN single crystal nucleation: An insight into the crystal growth habit in the initial stages of the physical vapor transport method; Mater. Express 5, 129 (2015)
2. ZUO S B, CHEN X L, JIANG L B, et al. Crystal growth of AlN: Effect of SiC substrate; Materials Science in Semiconductor Processing, 15, 401 (2012)
3. SUMATHI R R. Native seeding and silicon doping in bulk growth of AlN single crystals by PVT method [J]. Phys. Status Solidi C11, 545 (2014)