

Simulasi Reaktor MOCVD Dengan Menggunakan FEMLAB

Budi Mulyanti^{1,2)}, Fitri S. Arsyad^{1,3)}, Soegianto S⁴⁾, M. Barmawi¹⁾, dan Sri Jamo W¹⁾

¹⁾Laboratorium Fisika Material Elektronika, Departement Fisika, Institut Teknologi Bandung,
Jl. Ganesa 10 Bandung, E-mail: mulyanti@poem.org

²⁾Jurusan Pendidikan Teknik Elektro, Fakultas Pendidikan Teknologi dan Kejuruan,
Universitas Pendidikan Indonesia, Jl. Setiabudhi 227 Bandung

³⁾Jurusan Fisika, Universitas Sriwijaya, Kampus FMIPA –Unsri, Jl. Perabumulih, Palembang

⁴⁾Laboratorium Fisika Teori, Departemen Fisika, Institut Teknologi Bandung,
Jl. Ganesa 10 Bandung 40132

Abstrak

Simulasi numerik diperlihatkan untuk memperoleh harga parameter penumbuhan yang optimal pada penumbuhan film tipis GaN dalam reaktor MOCVD. Simulasi ini dilakukan dengan cara mengubah-ubah parameter penumbuhan yang meliputi difusivitas dan laju aliran gas serta geometri reaktor. Gas sumber yang digunakan di sini adalah trimetil galium (TMGa) dan amonia (NH₃) dan nitrogen (N₂) sebagai gas pembawa. Dari simulasi yang dilakukan, film tipis GaN yang uniform terjadi pada harga difusivitas 0,1 m²s⁻¹, laju aliran gas 10⁻³ ms⁻¹ dan jarak antara leher reaktor terhadap substrat sebesar 3,5 cm.

Kata kunci: film tipis GaN, reaktor MOCVD, parameter penumbuhan

Abstract

Numerical simulation is presented in order to have optimal growth parameters when thin film GaN is grown in the MOCVD reactor. The simulation is performed by changing the growth parameters such as diffusivities and flow rates of gases, and the reactor's geometries. Gases that are used in this simulation are trimethyl gallium (TMGa) and ammonia (NH₃) as source gases and nitrogen (N₂) as a carrier gas. The uniform thin film is obtained from this simulation, when the growth parameters are 0.1 m²s⁻¹, 10⁻³ ms⁻¹, and 3.5 cm for gas diffusivity, gas flow rate and distance between reactor neck and substrate, respectively.

Keywords: thin film GaN, MOCVD reactor, and growth parameters.

1. Pendahuluan

Chemical Vapor Deposition (CVD) adalah suatu metode penumbuhan lapisan tipis berdasarkan reaksi uap kimia pada substrat dalam suatu lingkungan kimia yang terkontrol. Penelitian tentang *metal organic chemical vapor deposition* (MOCVD) dimulai pada tahun 1968 ketika Manesevit menggunakan fase uap dari bahan metal-organik tri-etil galium dan arsen (AsH₃) dalam penumbuhan lapisan tipis GaAs¹⁾.

Dalam paper ini, penulis menggunakan bahan trimetil galium (TMGa) dan amonia (NH₃) sebagai sumber gas dan N₂ sebagai gas pembawa untuk menumbuhkan lapisan/film tipis GaN dengan menggunakan metode MOCVD yang dimiliki oleh Laboratorium Fisika Material Elektronika, Departemen Fisika, ITB.

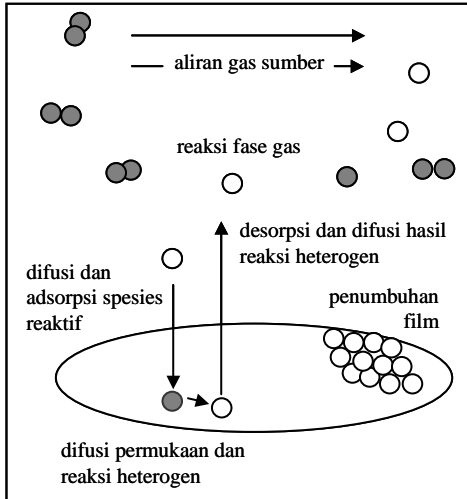
Banyak hal yang harus dipenuhi dalam metoda penumbuhan ini antara lain: laju penumbuhan yang cukup tinggi, lapisan yang uniform dan stabil pada suhu tinggi, efisiensi gas sumber, tingkat impuritas yang rendah dan lain-lain¹⁾. Masalah yang dibahas dalam penelitian ini adalah penumbuhan lapisan/film tipis GaN dengan metode MOCVD agar dihasilkan lapisan yang uniform dan efisiensi gas sumber yang optimal. Hal ini dilakukan dengan cara memvariasikan parameter penumbuhan dan geometri reaktor dengan menggunakan simulasi numerik.

Perangkat lunak yang digunakan adalah FEMLAB Versi 2.1 buatan COMSOLAB, USA, 2000.

2. Prinsip Dasar Proses Penumbuhan dalam MOCVD

Dalam proses CVD, lapisan tipis ditumbuhkan dari fase gas melalui reaksi kimia. Film tipis yang ditumbuhkan merupakan hasil reaksi heterogen di permukaan substrat. Secara umum langkah-langkah dalam proses CVD adalah seperti yang dijelaskan oleh Gambar 1, yaitu²⁾:

1. Transport konveksi dan difusi gas-gas reaktan dari inlet ke daerah reaksi di dalam tabung reaktor.
2. Reaksi kimia dalam fase gas menghasilkan spesies baru yang reaktif dan hasil sampingan.
3. Transport difusi dan konveksi reaktan awal dan reaksi berikutnya ke permukaan substrat.
4. Adsorpsi spesies reaktif pada permukaan substrat.
5. Difusi permukaan spesies yang teradsorpsi.
6. Reaksi permukaan heterogen menyebabkan pembentukan film padatan.
7. Desorpsi gas hasil reaksi.
8. Transport difusi hasil reaksi menjauhi permukaan substrat.
9. Transport konveksi dan atau difusi menjauhi daerah reaksi menuju outlet.



Gambar 1. Diagram proses penumbuhan film di dalam MOCVD

Campuran di dalam reaktor pada umumnya tidak dalam kesetimbangan termodinamika sehingga melibatkan fenomena transport dan kinetika kimiawi. Namun demikian kadang-kadang kedua fenomena ini dapat diabaikan.

3. Fenomena Transport dan Reaksi Kimia

3.1 Asumsi Dasar

Beberapa penyederhanaan dilakukan untuk mengurangi kompleksitas masalah dan untuk tujuan komputasi dalam mencari solusi persamaan pemodelan CVD. Pada umumnya asumsi ini tidak mengurangi akurasi atau ketepatan dan dapat diaplikasikan pada pemrosesan CVD.

Asumsi-asumsi tersebut adalah:

- Campuran gas di dalam reaktor adalah kontinu. Asumsi ini berlaku jika jalan bebas rata-rata l jauh lebih kecil dari geometri reaktor ℓ ($l \ll \ell$)

$$l = \frac{1}{\sqrt{2} \pi \sigma^2 n} \quad (1)$$

- Gas di dalam reaktor dianggap sebagai gas ideal.
- Aliran laminar.
- Tidak menyerap reaksi panas.
- Mengabaikan pengaruh panas pada viskositas.
- Mengabaikan pengaruh tekanan pada campuran gas.

3.2 Persamaan Transport

Fenomena transport di dalam reaktor CVD dapat digambarkan dengan persamaan transport massa, momentum, panas dan konsentrasi bermacam-macam komponen kimia di dalam campuran gas. Komposisi campuran gas yang terdiri dari N komponen dapat dinyatakan sebagai fraksi massa tak berdimensi ω_i untuk spesies ke- i dimana

$$\sum_{i=1}^N \omega_i = 1 \quad (2)$$

Dengan asumsi-asumsi diatas, transport momentum, panas dan spesies kimia dapat dinyatakan dengan sekumpulan persamaan diferensial parsial. Persamaan-persamaan tersebut adalah²⁾:

- Persamaan kontinuitas

$$\nabla \cdot (\rho \vec{v}) = \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (3)$$

- Persamaan Momentum

$$-\nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) + \nabla \left[\mu (\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T) \right] - \frac{2}{3} \mu (\nabla \vec{v}) \cdot \mathbf{I} - \nabla p + \rho \vec{g} = \frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} = 0 \quad (4)$$

- Persamaan Energi

$$c_p \frac{\partial \rho T}{\partial t} = -c_p \nabla \cdot (\rho \vec{v} T) + \nabla \cdot (\lambda \nabla T) = 0 \quad (5)$$

- Persamaan Spesies

$$\nabla \cdot (c_i \vec{v} f) = \nabla \cdot (c_i D_i \nabla f) - A_g \exp \left(-\frac{E_g}{RT} \right) c_i f \quad (6)$$

dengan:

- μ = viskositas campuran gas
- c_p = panas jenis persatuan massa gas tekanan konstan
- T = temperatur
- ρ = densitas
- λ = konduktivitas termal
- R = konstanta gas umum
- f_i = fraksi mol spesies gas ke- i
- m_i = fraksi massa spesies gas ke- i
- D = koefisien difusi
- A_g = bilangan Arrhenius
- E_g = energi aktivasi
- c_i = konsentrasi spesies gas ke- i

Viskositas campuran gas diperoleh dari³⁾:

$$\mu_i = 2,6693 \times 10^{-6} \frac{\sqrt{M_i T}}{\sigma_i^2 \Omega_{\mu}} \quad (7)$$

dengan:

- M_i = berat molekul ke- i
- σ_i = diameter tumbukan Lennard Jones untuk molekul ke- i
- Ω_{μ} = integral tumbukan

Untuk campuran gas yang terdiri dari banyak spesies gas, μ diperoleh dari aproksimasi Wilke sebagai berikut:

$$\mu = \sum_{i=1}^N \frac{f_i \mu_i}{\sum_{j=1}^N f_j \phi_{ij}} \quad (8)$$

dengan

$$\phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{M_i}{M_j} \right)^{-1/2} \left\{ 1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{1/2} \left(\frac{M_j}{M_i} \right)^{1/4} \right\}^2 \quad (9)$$

Konduktivitas termal untuk masing-masing spesies diperoleh dengan menggunakan rumus Eucken, yaitu

$$\lambda_i = \left(c_{pi} + \frac{5}{4} \frac{R}{M_i} \right) \mu_i \quad (10)$$

Sedangkan konduktivitas termal campuran gas adalah:

$$\lambda = \frac{\sum_{i=1}^N f_i \lambda_i}{\sum_{j=1}^N f_j \phi_{ij}} \quad (11)$$

Koefisien difusi untuk pasangan gas ke- i dan j adalah:

$$D_{ij} = 1,8583 \times 10^{-2} \frac{\sqrt{T^3 \left(\frac{1}{M_i} + \frac{1}{M_j} \right)}}{p \sigma_{ij}^2 \Omega_D} \quad (12)$$

Koefisien difusi spesies ke- i adalah:

$$D_i = \frac{\rho \sum_{j \neq i}^N f_j M_j}{M \sum_{j \neq i}^N \frac{f_j}{D_{ij}}} \quad (13)$$

dimana M adalah berat molekul campuran.

3.3 Syarat Batas

Persamaan transport yang dinyatakan dalam keempat persamaan di atas, dapat diselesaikan dengan syarat batas-syarat batas pada inlet, outlet, dinding reaktor, dan permukaan substrat sebagai berikut⁴⁾:

Pada inlet

$$V_{II} = 0; \quad V_{\perp} = V_{in}; \quad T = T_{in}; \quad f = f_{in}$$

Pada dinding :

- $v = 0$, artinya :
 - tidak terjadi reaksi
 - tidak tergelincir
 - tidak permiablel
- Dinding isothermal atau adiabatik
 $T = T_{dinding}$
- Tidak ada fluks massa yang tegak lurus permukaan

$$n \cdot (j_i^c + j_i^T) = 0 \quad (14)$$

Pada permukaan Substrat:

Laju penumbuhan spesies dalam reaksi ke- l adalah:

$$G_s = \frac{m_s}{\rho_s} \sum_{l=1}^L \mu_{sl} R_L^s \quad (15)$$

μ_{sl} = koefisien stoichiometri

m_s = massa mol spesies bulk

ρ_s = densitas fase padat

R_L^s = laju reaksi permukaan netto

Dan produksi massa gas netto pada permukaan substrat adalah:

$$P_m = \sum_{i=1}^N m_i R_i^s \quad (16)$$

Sedangkan komponen kecepatan tegak lurus substrat adalah:

$$n \cdot \vec{v} = \frac{P_m}{\rho} \quad (17)$$

Dan fluks difusi pada permukaan:

$$\vec{n} \cdot \vec{j}_i = m_i R_i^s - \omega_i P_m \quad (18)$$

Pada outlet;

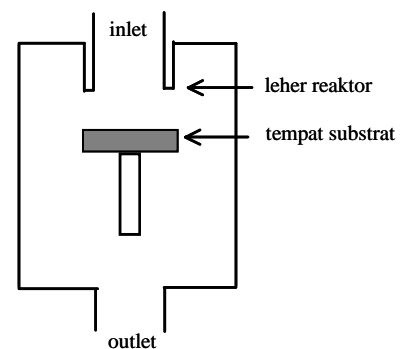
Gradien harga variabel dalam arah \perp bidang outlet diasumsikan = 0 atau ditulis sebagai:

$$\begin{aligned} v_{II} &= 0; & \vec{n} \cdot \vec{v}(\vec{p}) &= 0 \\ \vec{n} \cdot \nabla T &= 0; & n \cdot \nabla f_i \vec{v} &= 0 \\ \vec{n} \cdot \nabla p &= 0 \end{aligned} \quad (19)$$

4. Proses Simulasi

4.1. Bentuk/Geometri Reaktor

Sebelum melakukan simulasi terlebih dahulu memilih bentuk/geometri reaktor yang akan digunakan. Diagram reaktor MOCVD yang dipilih adalah nampak seperti Gambar 2 dengan diameter inlet dan diameter substrat masing-masing 10 cm, sedangkan jarak antara leher reaktor dengan substrat bervariasi 1,5 – 3,5 cm.



Gambar 2. Skema diagram reaktor MOCVD

4.2 Langkah Simulasi

Setelah kita menentukan geometri reaktor (2-dimensi), maka kita gambarkan dalam program Femlab dengan menggunakan GUI. Berhubung penampang lintang reaktor berbentuk simetris, maka penggambarannya menjadi lebih sederhana, nampak seperti Gambar 3.

Proses komputasi pada perangkat lunak Femlab ini berdasarkan persamaan-persamaan differensial parsial: persamaan Navier-Stokes, dan persamaan difusi dan konveksi⁵⁾.

Persamaan Navier-Stokes ini diperoleh dengan membuat persamaan momentum untuk masing-masing

dimensi dalam koordinat silinder, yaitu dalam arah x dan r . Asumsi yang digunakan di sini adalah bahwa fluida bersifat laminar, dengan bilangan Reynold < 2000 . Variabel-variabel yang digunakan untuk menyelesaikan persamaan ini adalah viskositas dan densitas gas.

Persamaan difusi dan konveksi digunakan karena adanya transport massa oleh konveksi dan difusi. Variabel-variabel yang digunakan adalah koefisien difusi, konsentrasi gas dan laju reaksi yang harga-harganya sangat bergantung pada temperatur dan tekanan reaktor.

Untuk dapat menyelesaikan persamaan-persamaan di atas, maka kita perlu memberikan syarat awal dan syarat-syarat batas pada inlet, dinding reaktor, sumbu simetri, permukaan substrat dan outlet, seperti yang telah dijelaskan di depan.

Adapun besaran fisis untuk simulasi ini diperoleh dengan menggunakan rumus (7) – (15) dengan harga parameter yang tercantum pada Tabel 1⁶⁾.

Tabel 1. Parameter deposisi yang digunakan dalam simulasi

Parameter deposisi	TMGa	NH ₃	N ₂
Laju aliran (sccm)	0,638	1660	7120
Berat molekul	115	17	28
Tekanan (Pa)	0,571	0,571	0,571
	0,285	0,285	0,285
Temperatur(K)	600	600	600
	700	700	700

5. Hasil Simulasi dan Pembahasan

Seperti telah dijelaskan, dalam simulasi ini digunakan trimetil galium (TMGa) dan NH₃ (amonia) sebagai gas reaktan serta N₂ sebagai gas pembawa, untuk menumbuhkan film tipis GaN (Galium Nitrat). Untuk mengetahui tingkat uniformitas lapisan tipis yang dihasilkan, dilakukan perubahan geometri reaktor dengan jalan mengubah jarak antara leher reaktor dengan permukaan substrat dan mengubah laju aliran gas sumber dan pembawa serta mengubah harga difusivitas gas sebagai fungsi tekanan dan temperatur.

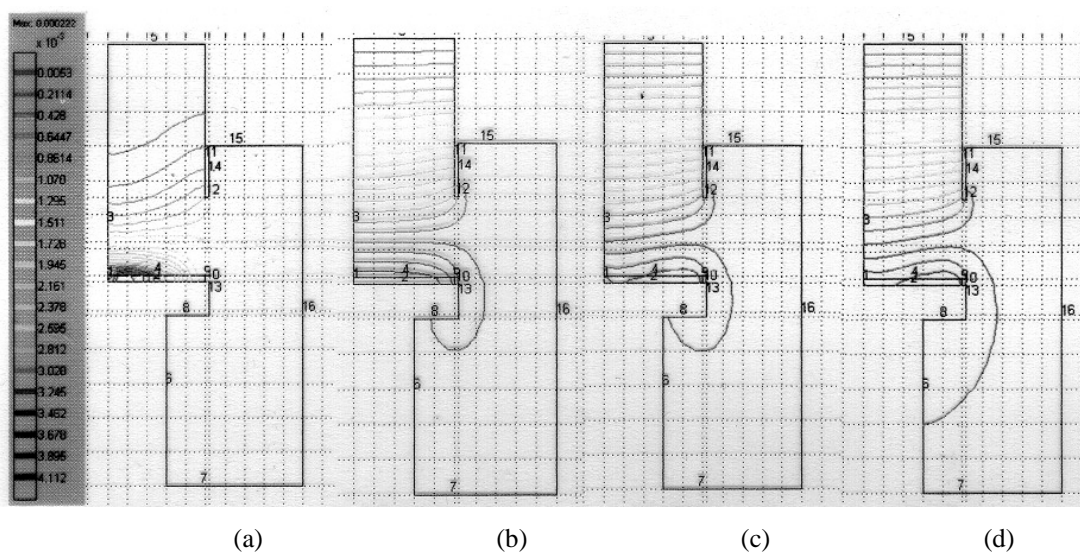
Reaksi kimia yang terjadi di atas permukaan substrat adalah:



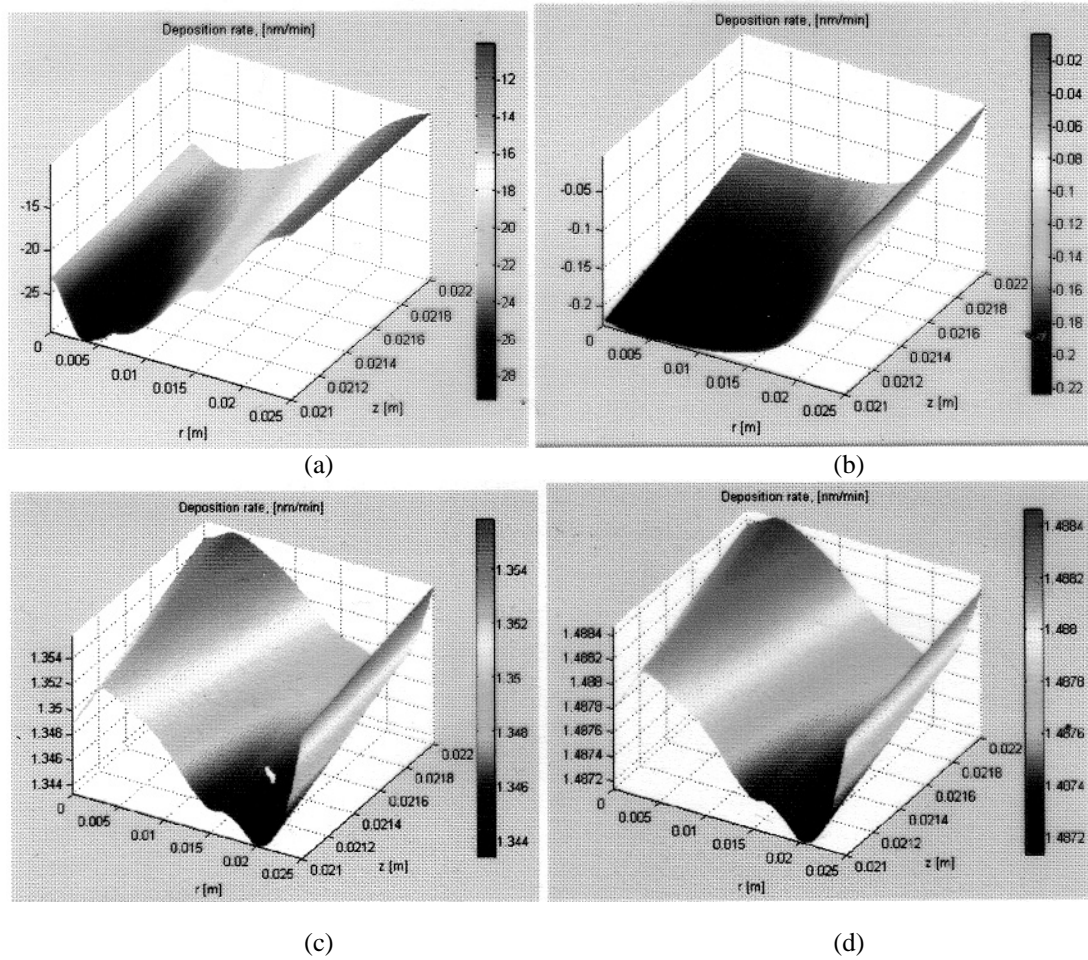
Dari hasil simulasi untuk jarak antara leher reaktor dan substrat sebesar 2,5 cm dan harga laju aliran gas $1,3 \times 10^{-2}$ m/s dan harga difusivitas berbeda-beda, yaitu: (a) 10^{-4} m²s⁻¹ (b) 10^{-3} m²s⁻¹ (c) 10^{-2} m²s⁻¹ (d) 10^{-1} m²s⁻¹ diperoleh bahwa film tipis GaN yang ditumbuhkan makin uniform jika harga difusivitas gas makin tinggi (Gambar 3 dan 4).

Sedangkan dari profil konsentrasi gas reaktan dan laju deposisi/penumbuhan GaN pada Gambar 5 dan 6 dapat terlihat bahwa film tipis GaN paling uniform terbentuk pada harga laju aliran gas sebesar 0,001 m/s untuk harga difusivitas konstan sebesar 10^{-3} m²s⁻¹.

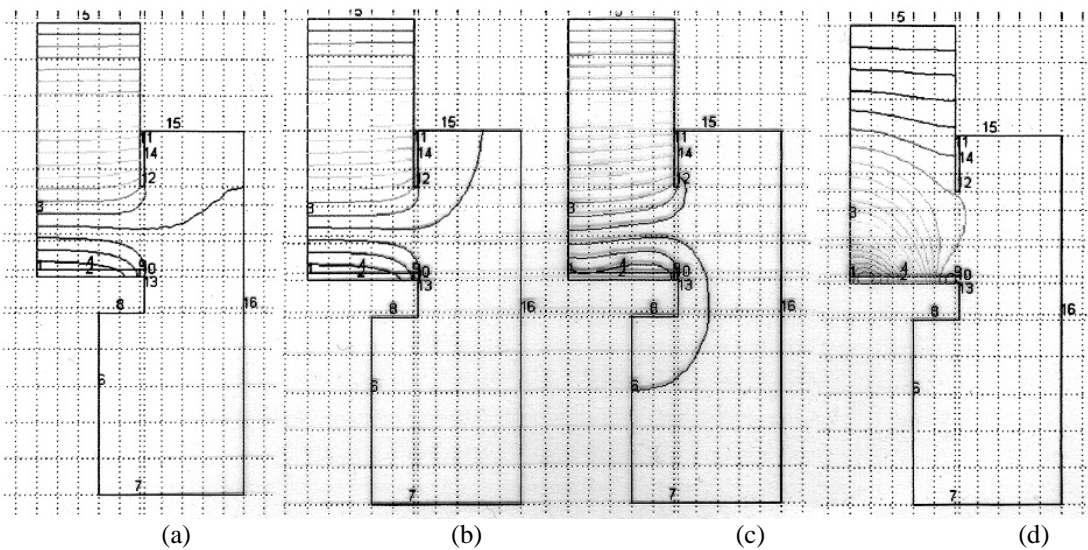
Dari profil konsentrasi gas reaktan dan laju deposisi/penumbuhan GaN pada Gambar 7 dan 8 nampak film tipis GaN terbentuk paling uniform pada jarak 3,5 cm antara leher reaktor dengan substrat untuk harga laju aliran gas sebesar 0,001 m/s dan harga difusivitas sebesar 10^{-3} m²s⁻¹.



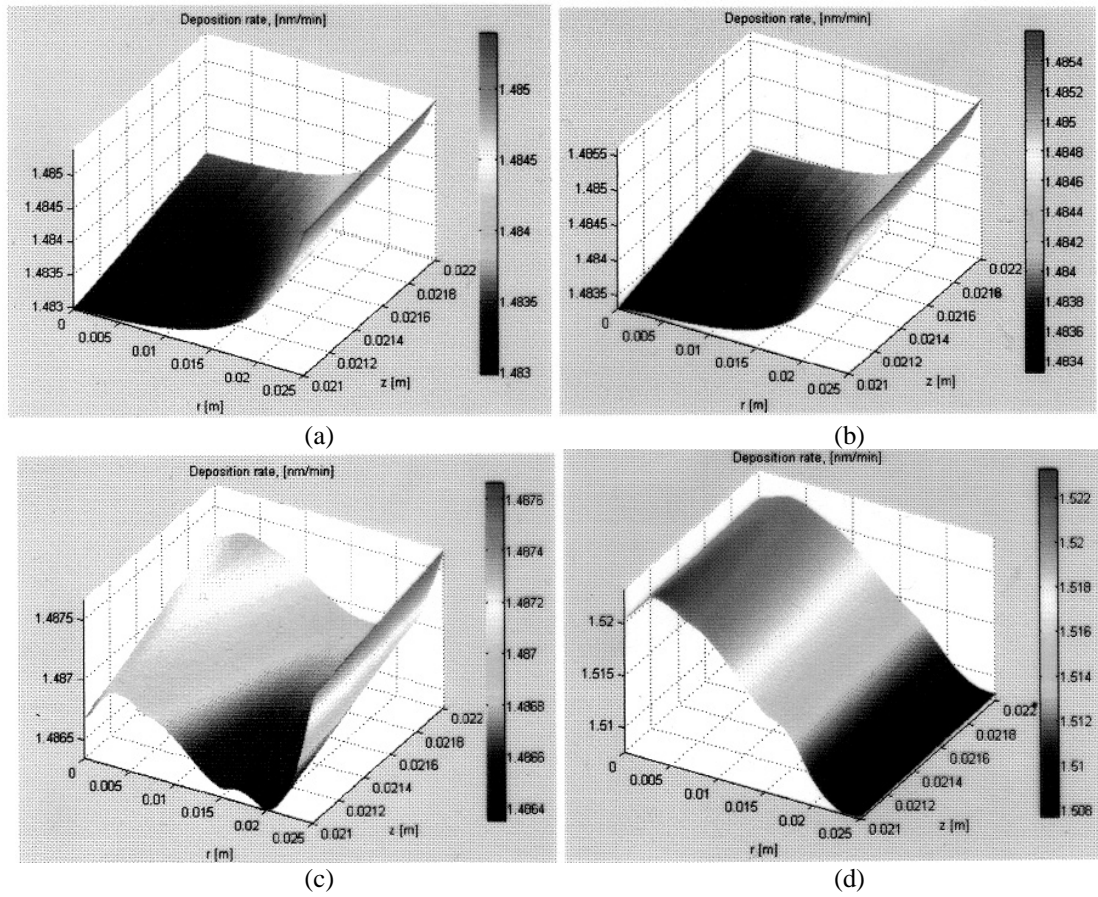
Gambar 3. Profil konsentrasi gas reaktan di dalam reaktor pada harga laju aliran gas $1,3 \times 10^{-2}$ m/s dan harga difusivitas berbeda-beda, yaitu: (a) 10^{-4} m²s⁻¹ (b) 10^{-3} m²s⁻¹ (c) 10^{-2} m²s⁻¹ (d) 10^{-1} m²s⁻¹



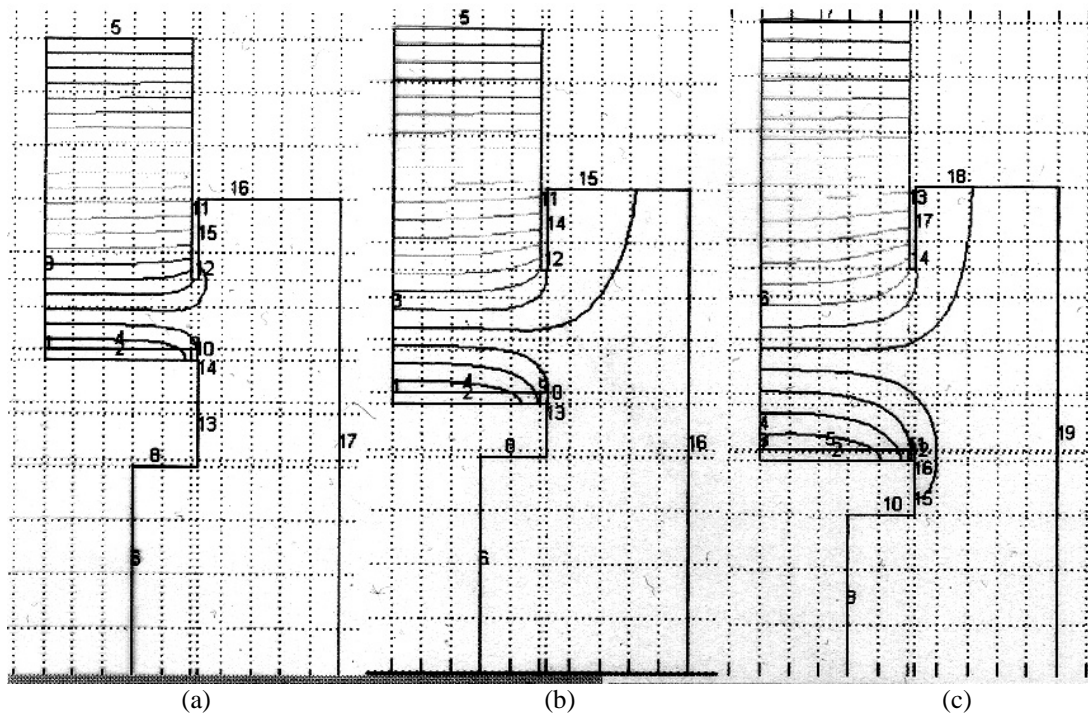
Gambar 4. Laju deposisi/penumbuhan film tipis GaN pada harga laju aliran gas $1,3 \times 10^{-2}$ m/s dan harga difusivitas berbeda-beda, yaitu: (a) $10^{-4} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ (b) $10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ (c) $10^{-2} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ (d) $10^{-1} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$



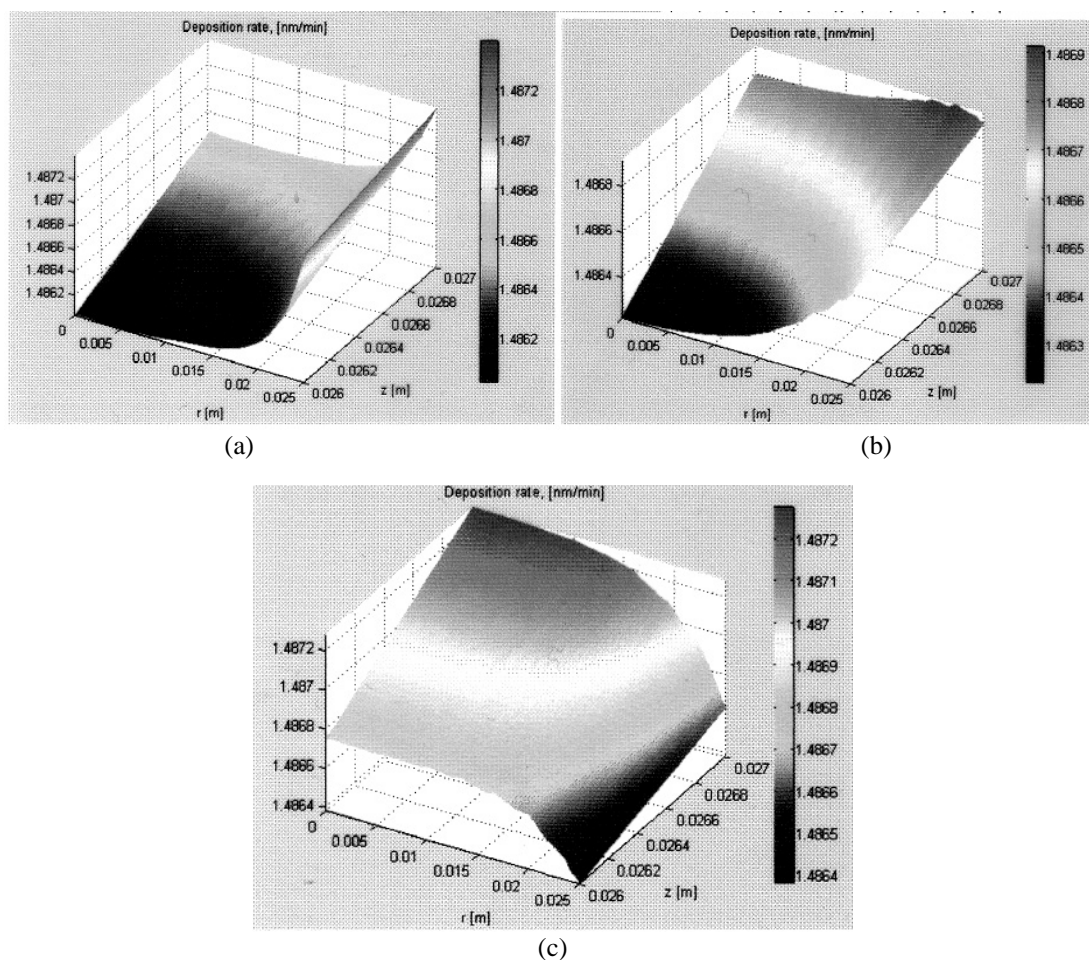
Gambar 5. Profil konsentrasi gas reaktan di dalam reaktor pada harga difusivitas $10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ dan harga laju aliran gas berbeda-beda, yaitu: (a) 10^{-4} m/s (b) 10^{-3} m/s (c) 10^{-2} m/s (d) 10^{-1} m/s .



Gambar 6. Laju deposisi/penumbuhan film tipis GaN pada harga difusivitas $10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ dan harga laju aliran gas berbeda-beda, yaitu: (a) 10^{-4} m/s (b) 10^{-3} m/s (c) 10^{-2} m/s (d) 10^{-1} m/s .



Gambar 7. Profil konsentrasi gas reaktan di dalam reaktor pada harga laju aliran gas $1,3 \times 10^{-2} \text{ m/s}$ dan harga difusivitas $10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ dan jarak antara leher reaktor dengan substrat berbeda-beda, yaitu: (a) 1,5 cm (b) 2,5 cm (c) 3,5 cm.



Gambar 8. Laju deposisi/penumbuhan film tipis GaN pada harga laju aliran gas $1,3 \times 10^{-2} \text{ m/s}$ dan harga difusivitas $10^{-3} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ dan jarak antara leher reaktor dengan substrat berbeda-beda, yaitu: (a) 1,5 cm (b) 2,5 cm (c) 3,5 cm.

6. Kesimpulan

Konsentrasi gas dan laju deposisi atau penumbuhan film tipis suatu material semikonduktor (dalam hal ini GaN) dengan reaktor MOCVD dapat diketahui melalui simulasi numerik, khususnya dengan menggunakan perangkat lunak Femlab, 2000. Dengan memasukkan harga-harga parameter penumbuhan, kita dapat memperoleh harga-harga yang sesuai yaitu untuk dapat menghasilkan film tipis yang uniform, yaitu harga difusivitas $0,1 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$, laju aliran gas 10^{-3} ms^{-1} dan jarak antara leher reaktor terhadap substrat sebesar 3,5 cm. Harga-harga ini sangat berguna dalam eksperimen penumbuhan film tipis GaN di dalam reaktor MOCVD, dengan sumber gas berupa trimetil galium (TMGa), amonia (NH_3) dan nitrogen (N_2) sebagai gas pembawa.

Daftar Pustaka

1. R. A. Sani, *Proses Deposisi Kimia Organo-Logam Dalam Reaktor MOCVD*, Disertasi Program Doktor ITB, 1999.
2. R. Klejn, *Chemical Vapor Deposition Processes*, Delf University of Technology, The Netherlands, 1991
3. Jingxi Sun et.al, *Phys. stat. Sol. (a)* 176,693 (1999)
4. Sustini, R.A. Sani, P.Arifin dan M. Barmawi, *KFI*, Vol.10 No.3, 90 (1999)
5. Femlab Manual References, Ver. 2.1 (2000)
6. Krishnan and Ning Zhou, *Analysis of Chemical Vapor Deposition in Industrial Reactors*.