

03

© 1991 г.

## МОДЕЛЬ ОСАЖДЕНИЯ В ГОРИЗОНТАЛЬНОМ ПРОТОЧНОМ ГАЗОЭПИТАКСИАЛЬНОМ РЕАКТОРЕ

П. Л. Крупкин

Рассмотрен изотермический массоперенос в газоэпитаксиальном реакторе с наклонным подложкодержателем, широко используемом для производства полупроводниковых структур. Для диффузионного режима осаждения установлены закономерности роста слоев, найдены условия получения однородных по длине пленок. Получена оценка переходной области течения газа при смене геометрии реактора в начале подложкодержателя.

Проточные реакторы с наклонным подложкодержателем (рис. 1) широко используются в газоэпитаксиальной технологии [1]. При этом экспериментальные данные традиционно обобщаются с помощью моделей, основанных на теории пограничного слоя (ПС) [2]. Однако известно, что во внутренних газовых течениях с малым числом Рейнольдса  $Re \leq 10$  ПС обычно не реализуется [3, 4], как это, например, имеет место при осаждении в трубе [5, 6]. В настоящей работе рассмотрена модель осаждения в реакторе (рис. 1) с внешним обогревом, уточняющая условия реализации ПС вблизи подложкодержателя.

Течение газа-носителя не зависит от переноса малых количеств осаждаемого вещества (ОВ) и в изотермических условиях описывается уравнениями Навье—Стокса для вязкой несжимаемой жидкости [3-6]. В случае реактора (рис. 1), за исключением небольшой переходной области в начале подложкодержателя, величина которой оценена в Приложении, поле скоростей газа можно аппроксимировать плоским течением в конфузоре (ТК) [7]. В полярных координатах при переходе к безразмерным переменным  $r \rightarrow \xi r_0$ ,  $\varphi \rightarrow \varphi\alpha/2$  определяется соотношениями  $V_\varphi = 0$ ,  $V_r = -V_0 u(\varphi)/\xi$ , а четная функция  $u(\varphi)$  на отрезке  $[-1, 1]$  является решением задачи

$$u'' + \alpha^2 u - \alpha Re^* u^2 + N = 0; \quad u(0) = 1, \quad u(1) = 0. \quad (1)$$

Здесь  $r_0 = H/\sin \alpha$ ,  $\alpha$  — угол наклона подложкодержателя,  $H$  — сечение реактора (рис. 1);  $Re^* = \alpha Re/4 \sin \alpha$ ;  $Re = HV_0/\nu$  — число Рейнольдса;  $V_0$ ,  $\nu$  — характерное значение скорости и коэффициент кинематической вязкости газа-носителя;  $N$  — постоянная, реализующая граничные условия (1).

Перенос ОВ определяется уравнением конвективной диффузии [3-6] с указанным выше полем скоростей. В диффузионном режиме осаждения ( $KH/D \gg 1$ , где  $K$ ,  $D$  — константа скорости гетерогенной реакции и коэффициент диффузии ОВ) поле концентраций ОВ можно искать в виде

$$C(\xi, \varphi) = C_0 \xi^m q(\varphi) \quad (2)$$

с следующей задачей относительно четной функции  $q(\varphi)$ :

$$q'' + n[n + Pe^* u(\varphi)]q = 0; \quad q(0) = 1, \quad q(1) = 0, \quad (3)$$

где  $n = \alpha m/2$ ,  $Pe^* = \alpha Pe/2 \sin \alpha$ ,  $Pe = HV_0/D = Re Sc$  — число Пекле,  $Sc = \nu/D$  — число Шмидта.

Решения краевых задач (1), (3) определяют течение газа-носителя и осаждение на стенки реактора (рис. 1) в диффузионном режиме. Заметим, что если  $N$  в (1) может принять только одно значение, при котором удовлетворяются граничные условия, то в (3) существует счетное количество различных  $n_i \geq 0$ , удовлетворяющих задаче. При этом в общем случае  $C(\varepsilon, \varphi)$  представляется рядом слагаемых типа (2). Однако поскольку с увеличением  $n$  соответствующие члены убывают с уменьшением  $\xi$  все быстрее, то осаждение будет определяться слагаемым с наименьшим  $n$ , рассмотрением которого мы и ограничимся.

Нетрудно показать, что в случае малого наклона подложкодержателя ( $\alpha \rightarrow 0$ ) решение задачи (1) определяет течение Пуазейля, а поле концентраций совпадает с определенным в работе [8] для диффузионного режима осаждения на стенки канала. В другом крайнем случае, при  $\alpha \text{Re} \gg 1$ , систему (1) можно переписать в виде

$$\varepsilon^2 u'' + \alpha^2 \varepsilon^2 u = u^2 - N; \quad u(0) = 1, \quad u(1) = 0, \quad (4)$$

где  $\varepsilon^2 = 1/\alpha \text{Re}$ .

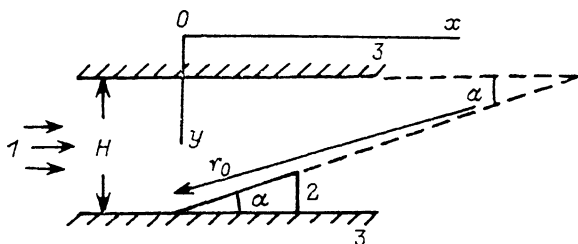


Рис. 1. Схема реактора.

1 — поток ПГС, 2 — подложкодержатель, 3 — стенки реактора.

Задача (4) при малых  $\varepsilon$  порождает решение с ПС. Действительно, в нулевом порядке по  $\varepsilon$  при  $N=1$  удовлетворяется первое краевое условие (4) ( $u=1$ ). В окрестности  $\varphi=1$  образуется ПС, форма которого определяется стандартным образом при замене переменной  $(1-\varphi) \rightarrow \varepsilon h$

$$u'' = u^2 - 1; \quad u(0) = 0, \quad u(h) \rightarrow 1, \quad h \rightarrow \infty. \quad (5)$$

После несложных преобразований вместо (5) получим

$$u' = (1-u)[2(2+u)]^{1/2}, \quad u(0) = 0, \quad (6)$$

откуда, имея в виду неравенство  $0 \leq u \leq 1$ , можно получить оценку

$$1 - \exp - (2h/3^{1/2}) \leq u \leq 1 - \exp - (2^{1/2}h).$$

Таким образом, толщина ПС определяется выражением

$$\delta\varphi = 0.8 (\alpha \text{Re})^{-1/2},$$

и чем меньше угол наклона подложкодержателя  $\alpha$ , тем менее вероятно образование ПС. Обычно эпитаксиальный процесс в реакторах типа представленного на рис. 1 проводят при  $\alpha \leq 10^\circ$ ,  $\text{Re} \approx 1-10$ , что дает  $\alpha \text{Re} \leq 2$ . И даже при  $\text{Re} \approx 100$ , как показывают расчеты, образования ПС не происходит (рис. 2).

Точное решение задач (1), (3) подтверждает сделанные выводы. На рис. 2 представлены функции  $u(\varphi)$ , вычисленные при  $\text{Re}=1, 10, 100$ . Видно, что профили течения газа слабо отличаются от параболического. Вид функции  $q(\varphi)$  также практически не зависит от  $\text{Re}$  и  $\text{Sc}$ , изменяющихся в широких пределах ( $\text{Re} \approx 1-500$ ,  $\text{Sc} \approx 1-1000$ ) (рис. 2), и поле концентраций ОВ целиком определяется значением  $m$ . На рис. 3 представлена зависимость параметра  $a = am\text{ReSc}$  от  $\text{Sc}$  при разных  $\text{Re}$ ,  $\alpha$ , где  $\alpha$  измеряется в градусах. Видно, что с увеличением  $\text{Sc}$   $a$  быстро выходит на насыщение, величина которого неизменна при малых  $\text{Re}$  и слегка уменьшается с ростом  $\text{Re}$ . Следует отметить независимость  $a$  от  $\alpha$ .

Реакторы типа показанного на рис. 1 обычно используются для повышения однородности осаждаемого слоя. Скорость роста не зависит от  $\xi$  при  $m=1$ , что при фиксированных  $Re$  и  $\alpha$  определяет значение  $Sc^*$ . На рис. 3 представлена зависимость параметра  $a^* = \alpha Re Sc^*$  при разных  $\alpha$  от  $Re$ . При  $\alpha \approx 10^\circ$ ,  $Re \approx 10$   $Sc^* \approx 30$  и с уменьшением  $\alpha$  и  $Re$  будет только возрастать. Для атомов галлия в водороде  $Sc \approx 1.5$ , и в случае атомарного переноса галлия в МОС-гидридной системе [3] при  $\alpha = 10^\circ$  пленка GaAs будет однородной при  $Re = 170$ .

Таким образом, приведенное решение полностью проясняет зависимость характеристик осаждения от режимных параметров при диффузионном контроле процесса в реакторе типа (рис. 1). Появляется возможность оценки условий

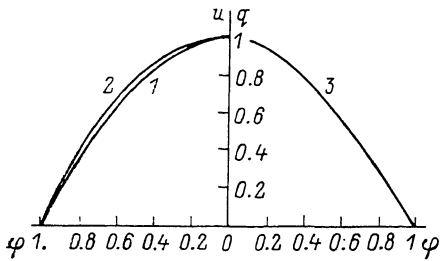


Рис. 2. Зависимости  $u(\varphi)$  при  $Re = 1.10$  (1), 100 (2) и  $q(\varphi)$  (3) при разных  $Sc$ .

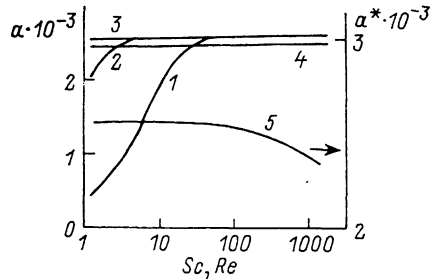


Рис. 3. Зависимости  $a(Sc)$  при  $Re = 1$  (1), 10 (2), 100 (3), 500 (4) и  $a^*(Re)$  (5).

газофазной кристаллизации для получения однородных структур. Численное исследование плоских течений в канале приведенного вида (рис. 1) подтвердило адекватность рассмотренной модели динамики газа. Величину переходной области можно к тому же оценить аналитически (см. Приложение). В заключение заметим, что зависимость толщины осадка от продольной координаты при  $\alpha \neq 0$  имеет степенной характер (2) и лишь при  $\alpha \rightarrow 0$  становится экспоненциальной. Степенная зависимость характеристик осаждения получается также в моделях, основанных на ПС [2]. Это, по-видимому, и является причиной их частого применения для обработки экспериментальных данных, несмотря на то, что ПС в обычных условиях осаждения в реакторе (рис. 1) не реализуется.

## Приложение

Для оценки величины переходной области рассмотрим полную систему уравнений Навье—Стокса в переменных функция тока—завихренность [7], которая в декартовых координатах  $0xy$  (рис. 1) имеет вид

$$\begin{aligned} \omega_{xx} + \omega_{yy} + Re(\Psi_y \omega_x - \Psi_x \omega_y) &= 0; \quad \Psi(\Gamma_1) = 1, \quad \Psi(\Gamma_2) = 0, \\ \Psi_{xx} + \Psi_{yy} + \omega &= 0; \quad \nabla_n \Psi(\Gamma_{1,2}) = 0, \end{aligned} \quad (\text{П1})$$

где  $\Psi$  — функция тока;  $\omega = u_y - v_x$  — завихренность;  $(u, v) = (-\Psi_y, \Psi_x)$  — компоненты скорости газа;  $\Gamma_{1,2}$  — соответственно верхняя и нижняя стенки рассматриваемого реактора (рис. 1).

Преобразуем область течения газа при  $x > 0$  из суживающейся (рис. 1) в прямоугольную. С этой целью рассмотрим замену переменной  $y \rightarrow y/\chi(x)$ , где  $\chi(x) = 1$  при  $x < 0$ ,  $\chi(x) = 1 - \varepsilon x$ ,  $\varepsilon = \text{tg } \alpha$  при  $x > 0$ . Вместо (П1) получим задачу

$$\begin{aligned} \chi^2 \omega_{xx} + \omega_{yy} + Re(\Psi_y \omega_x - \Psi_x \omega_y) &= 0; \quad \Psi(0) = 1, \quad \Psi(1) = 0. \\ \chi^2 \Psi_{xx} + \Psi_{yy} + \chi^2 \omega &= 0; \quad \Psi_y(0) = \Psi_y(1) = 0. \end{aligned} \quad (\text{П2})$$

Уравнения (П2) при  $x < 0$  допускают решение, не зависящее от  $x$ . При этом получается система уравнений

$$\Psi_{yy} + \omega = 0, \quad \omega_{yy} = 0, \quad (\text{П3})$$

которая определяет течение Пуазейля (ТП)

$$\Psi_0 = 1 - 3y^2 + 2y^3, \quad \omega_0 = 6 - 12y. \quad (\text{П4})$$

При  $x > 0$  на основе замены  $\omega \rightarrow \omega/\chi^2$  можно также получить систему с решением, не зависящим от  $x$ ,

$$\Psi_{yy} + \omega = 0, \quad \omega_{yy} + 6\varepsilon^2\omega + 2\varepsilon \operatorname{Re} \omega \Psi_y = 0. \quad (\text{П5})$$

Очевидно, что (П5) определяет автомодельное течение в конфузоре (ТК), рассмотренное в полярных координатах выше. Граничные условия (ГУ) для (П3), (П5) составляют с ГУ для (П2).

Оценку величины переходной области проведем на основе поиска решения (П2) такого, что при  $x \rightarrow -\infty$  оно переходит в ТП, а при больших  $x > 0$  — в ТК, определяемое (П5). Область существенного отличия данного решения от ТП при  $x < 0$  и ТК при  $x > 0$  и будет определять область переходного течения. При этом мы ограничимся рассмотрением переходного течения в окрестности подложкодержателя ( $x > 0$ ). Заметим, что при  $x \rightarrow 0$  ТК (П5) отличается от ТП (П3), (П4) на функцию порядка  $\varepsilon^2$  при малых  $\operatorname{Re}$  и  $\varepsilon \operatorname{Re}$  при больших  $\operatorname{Re}$ . Данная функция определяет порядок величины начального возмущения для ТК. Степень затухания данного возмущения вдоль подложкодержателя получим из рассмотрения уравнений, возникающих в первом порядке по  $\varepsilon$  при линеаризации (П2) в окрестности решения (П5)

$$\begin{aligned} \omega_{yy} + \chi^2 \omega_{xx} + \chi \operatorname{Re} (-\Psi_x \omega'_0 + \omega_x \Psi'_0) = 0, \quad \Psi(0) = \Psi(1) = 0, \\ \Psi_{yy} + \chi^2 \Psi_{xx} + \omega = 0; \quad \Psi_y(0) = \Psi_y(1) = 0. \end{aligned} \quad (\text{П6})$$

Так как  $\omega'_0 = -12$ , то для упрощения выкладок можно положить величину  $\Psi'_0$  также постоянной и равной  $\Psi'_0 = -u$ , где значение  $u > 0$  определяется величиной продольной компоненты скорости.

Поиск решения (П6) в виде поля  $\simeq \exp(-\lambda \int \chi) \exp(iky)$  дает дисперсионное соотношение

$$(\lambda^2 - k^2)^2 + \lambda \operatorname{Re}[(\lambda^2 - k^2)u + 12] = 0, \quad (\text{П7})$$

которое через параметр  $\lambda$  определяет степень затухания возмущения потока вдоль подложкодержателя. При  $\operatorname{Re} = 0$  решение (П7) тривиально —  $\lambda = k$ . Для малых  $\operatorname{Re}$  будем искать  $\lambda$  в виде разложения по степеням  $\operatorname{Re}^{1/2}$ . Получим выражение

$$\lambda = k + i(3 \operatorname{Re}/k)^{1/2} - u \operatorname{Re}/4 + \dots \quad (\text{П8})$$

Наименьшее значение  $k$  определяется ГУ в (П6) —  $k = 2\pi$ .

Первый член разложения (П8) является чисто мнимой величиной, что говорит о возникновении при малых  $\operatorname{Re}$  в потоке стационарной затухающей структуры, аналогичной наблюдаемым экспериментально [9]. И лишь следующий член влияет на затухание, характерная длина которого определяется как обратная к действительной части  $\lambda$  величина

$$l \simeq [1 + \operatorname{Re}(u - 3/k^2)/k] \simeq 0.16 \mp 0.04 \operatorname{Re}. \quad (\text{П9})$$

Следует отметить, что оценка (П9) определяет скорость экспоненциального затухания возмущения вдоль потока и с учетом малости начального значения возмущения представляется завышенной. Но даже несмотря на это, мы видим, что область переходного течения достаточно мала, что и наблюдалось нами в численных экспериментах.

#### Список литературы

- [1] *Herenden-Harker W. G., Williams R. H.* // GaAs for Devices and Integrated Circuits. New York, 1986. P. 58—75.  
 [2] *Schlichting H.* Boundary Layer Theory. New York: McGraw Hill, 1972.  
 [3] *Жмакин А. И., Ипатова И. П., Макаров Ю. Н.* // ЖТФ. 1986. Т. 56. Вып. 9. С. 1700—1708.

- [4] Герасимов Б. П., Лесуновский А. В., Митин В. В. и др. // Математическое моделирование. Получение монокристаллов и полупроводниковых структур. М.: Наука, 1986. С. 112—132.
- [5] Крупкин П. Л., Гаврищук Е. М., Даданов А. Ю., Яшина Э. В. // Высокочистые вещества. 1987. Вып. 5. С. 79—82.
- [6] Девятых Г. Г., Гаврищук Е. М., Крупкин П. Л. // Высокочистые вещества. 1988. Вып. 6. С. 60—69.
- [7] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Гидродинамика. М.: Наука, 1986.
- [8] Крупкин П. Л., Николаев А. П., Даданов А. Ю. // Тез. VIII Всесоюз. конф. по методам получения и анализа высокочистых веществ. Т. I. С. 132—133.
- [9] Джозеф Д. Устойчивость движения жидкости. М.: Мир, 1981.

Институт химии высокочистых веществ  
Н. Новгород

Поступило в Редакцию  
2 февраля 1990 г.