

УДК 533.7: 533.22

## ЗАДАЧА КОНВЕКТИВНОЙ ДИФФУЗИИ ИЗ ГАЗОВОЙ ФАЗЫ К ВРАЩАЮЩЕМУСЯ ДИСКУ

Е. Л. Панкратов, П. Б. Болдыревский

Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского,  
603950 Нижний Новгород, Россия  
E-mails: elp2004@mail.ru, bpavel2@rambler.ru

Предложена методика аналитического расчета скорости потока газовой смеси и концентрации ростового компонента в процессе эпитаксии из газовой фазы, происходящей в реакционной камере с вращающимся диском-подложкодержателем. Проведен анализ зависимости концентрации ростового компонента от ряда технологических параметров процесса эпитаксии.

Ключевые слова: эпитаксия из газовой фазы, конвективная диффузия, диск-подложкодержатель.

DOI: 10.15372/PMTF20160407

**Введение.** В настоящее время одним из основных технологических процессов, применяемых при производстве устройств твердотельной микро- и нанoeлектроники, является формирование полупроводниковых эпитаксиальных слоев с использованием диффузии из газовой фазы и молекулярных пучков [1–8]. Методы выращивания эпитаксиальных слоев постоянно совершенствуются, в то же время имеющиеся математические модели недостаточно точно описывают процессы, происходящие при выращивании эпитаксиальных слоев. Поэтому оценки зависимостей между технологическими параметрами, определяющими кинетику и механизм роста эпитаксиальных слоев, могут иметь существенные погрешности. Основной целью данной работы является развитие методов моделирования физических процессов, имеющих место при эпитаксии из газовой фазы.

В настоящей работе рассматривается установка для осуществления эпитаксии из газовой фазы, представляющая собой вертикальную реакционную камеру с вращающимся диском-подложкодержателем (рис. 1). Данная технологическая схема является основной для эпитаксии из газовой фазы (перспективного метода создания полупроводниковых наногетероструктур) при использовании в качестве исходных веществ металлоорганических соединений (МОС) и гидридов [2, 3]. В установку поступает поток газовой смеси, состоящей из газообразных веществ, вступающих в химическую реакцию при формировании эпитаксиального слоя, и водорода, используемого в качестве газа-носителя.

---

Работа выполнена при финансовой поддержке Правительства РФ (грант № 11.G34.31.0066), Совета по грантам Президента РФ по государственной поддержке ведущих научных школ РФ (грант № НШ-339.2014.2) и в рамках соглашения между Министерством образования и науки РФ и Нижегородским государственным университетом от 27.08.13 г. № 02.В.49.21.0003.

© Панкратов Е. Л., Болдыревский П. Б., 2016

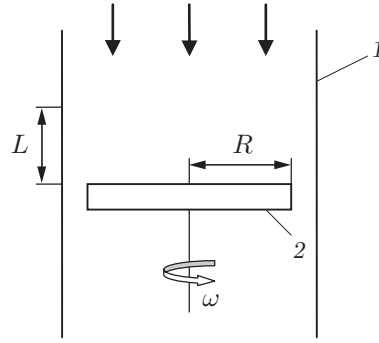


Рис. 1. Схема реакционной камеры для газовой эпитаксии:  
 1 — цилиндрическая реакционная камера, 2 — диск-подложкодержатель

**Методика анализа.** При моделировании физических процессов, происходящих при формировании эпитаксиального слоя, будем считать, что вектор линейной скорости поступающего в реакционную камеру потока перпендикулярен поверхности диска-подложкодержателя, вращающегося с угловой скоростью  $\omega$ . Проведем анализ течения газовой смеси и распределения концентрации ростового компонента. Искомые величины определим из соответствующих уравнений Навье — Стокса и второго закона Фика, включающего конвективный член. При этом будем считать, что распределение концентрации определяется на расстоянии от поверхности диска радиусом  $R$ , сопоставимом с толщиной диффузионного слоя [9]. Температуру на поверхности диска будем считать неизменной, соответствующей параметрам процесса эпитаксии. В этом случае уравнение конвективной диффузии для концентрации ростового компонента при эпитаксии из газовой фазы записывается в следующей форме:

$$\frac{\partial C(r, \varphi, z, t)}{\partial t} = \nabla \{ D \nabla [C(r, \varphi, z, t)] - \mathbf{v}(r, \varphi, z, t) C(r, \varphi, z, t) \}. \quad (1)$$

Здесь  $D$  — коэффициент диффузии ростового компонента в газовой фазе;  $C(r, \varphi, z, t)$  — пространственно-временное распределение концентрации ростового компонента в зоне осаждения;  $r, \varphi, z$  — текущие цилиндрические координаты;  $t$  — время;  $\mathbf{v}$  — скорость потока смеси газов. Поле скоростей описывается уравнением Навье — Стокса. Уравнения для компонент скорости потока смеси газов представляются в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial v_r}{\partial t} &= \nu \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial v_r(r, \varphi, z, t)}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_r(r, \varphi, z, t)}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 v_r(r, \varphi, z, t)}{\partial z^2} \right] - \\ &\quad - v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} - \frac{v_\varphi}{r} \frac{\partial v_\varphi}{\partial \varphi} - v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{P}{\rho} \right), \\ \frac{\partial v_\varphi}{\partial t} &= \nu \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial v_\varphi(r, \varphi, z, t)}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_\varphi(r, \varphi, z, t)}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 v_\varphi(r, \varphi, z, t)}{\partial z^2} \right] - \\ &\quad - v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} - \frac{v_\varphi}{r} \frac{\partial v_\varphi}{\partial \varphi} - v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \frac{P}{\rho} \right), \quad (2) \\ \frac{\partial v_z}{\partial t} &= \nu \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial v_z(r, \varphi, z, t)}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_z(r, \varphi, z, t)}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 v_z(r, \varphi, z, t)}{\partial z^2} \right] - \\ &\quad - v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} - \frac{v_\varphi}{r} \frac{\partial v_\varphi}{\partial \varphi} - v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{P}{\rho} \right). \end{aligned}$$

В (2) наличие компонент  $v_z$ ,  $v_\varphi$ ,  $v_r$  обусловлено влиянием градиента давления вдоль оси  $z$ , вращением подложки и обтеканием подложки газовой смесью соответственно;  $\rho$  — плотность;  $\nu$  — кинематическая вязкость;  $P(z)$  — давление в реакторе. Поскольку давление вдоль реактора изменяется незначительно, его пространственную зависимость в первом приближении можно считать линейной:  $P(z) = 0,5(P_a + P_B) + (P_a - P_B)z/(2L)$  ( $L$  — характерная длина зоны осаждения (см. рис. 1);  $P_a$  — атмосферное давление;  $P_B = 1,2P_a$  — избыточное давление на входе в реакционную камеру). Систему уравнений (2) необходимо дополнить уравнением непрерывности. В данном случае с учетом несжимаемости газа это уравнение имеет вид

$$\frac{1}{r} \frac{\partial(rv_r)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0. \quad (3)$$

Для режима предельного диффузионного потока ростового компонента, когда все приближающиеся к диску частицы ростового вещества осаждаются и упорядочиваются на подложке, что согласуется с экспериментальными данными [5], и с учетом того, что поток на входе в зону реакции является однородным и одномерным, граничные и начальные условия можно представить в виде

$$\begin{aligned} C(r, \varphi, -L, t) &= C_0, & C(r, \varphi, 0, t) &= 0, \\ C(r, 0, z, t) &= C(r, 2\pi, z, t), & C(r, \varphi, z, 0) &= C_0\delta(z + L), \\ \frac{\partial C(r, \varphi, z, t)}{\partial \varphi} \Big|_{\varphi=0} &= \frac{\partial C(r, \varphi, z, t)}{\partial \varphi} \Big|_{\varphi=2\pi}, & \frac{\partial v_r(r, \varphi, z, t)}{\partial r} \Big|_{r=0} &= \frac{\partial v_r(r, \varphi, z, t)}{\partial r} \Big|_{r=R}, \\ \frac{\partial v_\varphi(r, \varphi, z, t)}{\partial \varphi} \Big|_{\varphi=0} &= \frac{\partial v_\varphi(r, \varphi, z, t)}{\partial \varphi} \Big|_{\varphi=2\pi}, & \frac{\partial v_r(r, \varphi, z, t)}{\partial r} \Big|_{r=0} &= \frac{\partial v_r(r, \varphi, z, t)}{\partial r} \Big|_{r=R}, \\ \frac{\partial C(r, \varphi, z, t)}{\partial r} \Big|_{r=R} &= 0, & \frac{\partial v_\varphi(r, \varphi, z, t)}{\partial \varphi} \Big|_{\varphi=0} &= \frac{\partial v_\varphi(r, \varphi, z, t)}{\partial \varphi} \Big|_{\varphi=2\pi}, \\ v_r(r, \varphi, -L, t) &= 0, & v_r(r, \varphi, 0, t) &= 0, & C(0, \varphi, z, t) &\neq \infty, & v_\varphi(r, \varphi, 0, t) &= \omega r, \\ v_r(r, \varphi, L, t) &= 0, & v_r(r, 0, z, t) &= v_r(r, 2\pi, z, t), \\ v_\varphi(r, \varphi, -L, t) &= 0, & v_\varphi(r, \varphi, L, t) &= 0, & v_\varphi(r, 0, z, t) &= v_\varphi(r, 2\pi, z, t), \\ v_\varphi(0, \varphi, z, t) &\neq \infty, & v_r(0, \varphi, z, t) &\neq \infty, \\ v_z(r, \varphi, -L, t) &= V_0, & v_z(r, \varphi, 0, t) &= 0, & v_z(r, \varphi, L, t) &= 0, \\ v_z(r, 0, z, t) &= v_z(r, 2\pi, z, t), & v_z(0, \varphi, z, t) &\neq \infty, \\ v_r(r, \varphi, z, 0) &= 0, & v_\varphi(r, \varphi, z, 0) &= 0, & v_z(r, \varphi, -L, 0) &= V_0, \end{aligned}$$

где  $\delta(z)$  — дельта-функция Дирака [10]. Содержащее дельта-функцию граничное условие означает, что концентрация смеси газов-реагентов на входе в реактор равна  $C_0$ .

Найдем решение системы уравнений (2) с помощью метода осреднения функциональных поправок, разработанного в [11, 12]. В рамках данного метода для определения первого приближения проекций скорости потока газовой смеси заменим их на неизвестные средние значения в правых частях уравнений системы (2):  $v_r \rightarrow \alpha_{1r}$ ,  $v_\varphi \rightarrow \alpha_{1\varphi}$ ,  $v_z \rightarrow \alpha_{1z}$ . В результате получаем уравнения для первых приближений искомых компонент в следующей форме:

$$\frac{\partial v_{1r}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{P}{\rho} \right), \quad \frac{\partial v_{1\varphi}}{\partial t} = -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \frac{P}{\rho} \right), \quad \frac{\partial v_{1z}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{P}{\rho} \right).$$

Решения этих уравнений имеют вид

$$v_{1r} = -\frac{\partial}{\partial r} \int_0^t \frac{P}{\rho} d\tau, \quad v_{1\varphi} = -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \int_0^t \frac{P}{\rho} d\tau, \quad v_{1z} = V_0 - \frac{\partial}{\partial z} \int_0^t \frac{P}{\rho} d\tau.$$

Во втором приближении проекции скорости могут быть получены путем замены искомым проекций в правых частях уравнений системы (2) на суммы:  $v_r \rightarrow \alpha_{2r} + v_{1r}$ ,  $v_\varphi \rightarrow \alpha_{2\varphi} + v_{1\varphi}$ ,  $v_z \rightarrow \alpha_{2z} + v_{1z}$ . Уравнения для данных проекций имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial v_{2r}}{\partial t} &= \nu \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial v_{1r}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_{1r}}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 v_{1r}}{\partial z^2} \right] - \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{P}{\rho} \right) - \\ &\quad - (\alpha_{2r} + v_{1r}) \frac{\partial v_{1r}}{\partial r} - \frac{\alpha_{2\varphi} + v_{1\varphi}}{r} \frac{\partial v_{1r}}{\partial \varphi} - (\alpha_{2z} + v_{1z}) \frac{\partial v_{1r}}{\partial z}, \\ \frac{\partial v_{2\varphi}}{\partial t} &= \nu \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial v_{1\varphi}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_{1\varphi}}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 v_{1\varphi}}{\partial z^2} \right] - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \frac{P}{\rho} \right) - \\ &\quad - (\alpha_{2r} + v_{1r}) \frac{\partial v_{1\varphi}}{\partial r} - \frac{\alpha_{2\varphi} + v_{1\varphi}}{r} \frac{\partial v_{1\varphi}}{\partial \varphi} - (\alpha_{2z} + v_{1z}) \frac{\partial v_{1\varphi}}{\partial z}, \\ \frac{\partial v_{2z}}{\partial t} &= \nu \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial v_{1z}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_{1z}}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 v_{1z}}{\partial z^2} \right] - \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{P}{\rho} \right) - \\ &\quad - (\alpha_{2r} + v_{1r}) \frac{\partial v_{1z}}{\partial r} - \frac{\alpha_{2\varphi} + v_{1\varphi}}{r} \frac{\partial v_{1z}}{\partial \varphi} - (\alpha_{2z} + v_{1z}) \frac{\partial v_{1z}}{\partial z}. \end{aligned}$$

Интегрируя эти уравнения, получаем

$$\begin{aligned} v_{2r} &= \nu \int_0^t \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial v_{1r}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_{1r}}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 v_{1r}}{\partial z^2} \right] d\tau - \frac{\partial}{\partial r} \left( \int_0^t \frac{P}{\rho} d\tau \right) - \\ &\quad - \int_0^t (\alpha_{2r} + v_{1r}) \frac{\partial v_{1r}}{\partial r} d\tau - \int_0^t \frac{\alpha_{2\varphi} + v_{1\varphi}}{r} \frac{\partial v_{1r}}{\partial \varphi} d\tau - \int_0^t (\alpha_{2z} + v_{1z}) \frac{\partial v_{1r}}{\partial z} d\tau, \\ v_{2\varphi} &= \nu \int_0^t \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial v_{1\varphi}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_{1\varphi}}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 v_{1\varphi}}{\partial z^2} \right] d\tau - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \int_0^t \frac{P}{\rho} d\tau \right) - \\ &\quad - \int_0^t (\alpha_{2r} + v_{1r}) \frac{\partial v_{1\varphi}}{\partial r} d\tau - \int_0^t \frac{\alpha_{2\varphi} + v_{1\varphi}}{r} \frac{\partial v_{1\varphi}}{\partial \varphi} d\tau - \int_0^t (\alpha_{2z} + v_{1z}) \frac{\partial v_{1\varphi}}{\partial z} d\tau, \\ v_{2z} &= V_0 + \nu \int_0^t \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial v_{1z}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_{1z}}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 v_{1z}}{\partial z^2} \right] d\tau - \frac{\partial}{\partial z} \left( \int_0^t \frac{P}{\rho} d\tau \right) - \\ &\quad - \int_0^t (\alpha_{2r} + v_{1r}) \frac{\partial v_{1z}}{\partial r} d\tau - \int_0^t \frac{\alpha_{2\varphi} + v_{1\varphi}}{r} (\alpha_{2\varphi} + v_{1\varphi}) \frac{\partial v_{1z}}{\partial \varphi} d\tau - \int_0^t (\alpha_{2z} + v_{1z}) \frac{\partial v_{1z}}{\partial z} d\tau. \end{aligned}$$

Средние значения  $\alpha_{2r}$ ,  $\alpha_{2\varphi}$ ,  $\alpha_{2z}$  определим с помощью соотношений

$$\begin{aligned}\alpha_{2r} &= \frac{1}{\pi\Theta R^2 L} \int_0^\Theta \int_0^R r \int_0^{2\pi} \int_{-L}^L (v_{2r} - v_{1r}) dz d\varphi dr dt, \\ \alpha_{2\varphi} &= \frac{1}{\pi\Theta R^2 L} \int_0^\Theta \int_0^R r \int_0^{2\pi} \int_{-L}^L (v_{2\varphi} - v_{1\varphi}) dz d\varphi dr dt, \\ \alpha_{2z} &= \frac{1}{\pi\Theta R^2 L} \int_0^\Theta \int_0^R r \int_0^{2\pi} \int_{-L}^L (v_{2z} - v_{1z}) dz d\varphi dr dt,\end{aligned}\quad (4)$$

где  $\Theta$  — промежуток времени, в течение которого газовая смесь находится в зоне реакции. Подставляя первые два приближения в соотношения (4), получаем систему уравнений для искомых средних значений компонент вектора скорости

$$A_1\alpha_{2r} + B_1\alpha_{2\varphi} + C_1\alpha_{2z} = D_1, \quad A_2\alpha_{2r} + B_2\alpha_{2\varphi} + C_2\alpha_{2z} = D_2, \quad A_3\alpha_{2r} + B_3\alpha_{2\varphi} + C_3\alpha_{2z} = D_3,$$

где

$$\begin{aligned}A_1 &= 1 + \int_0^\Theta (\Theta - t) \int_0^R r \int_0^{2\pi} \int_{-L}^L \frac{\partial v_{1r}}{\partial r} dz d\varphi dr dt, & B_1 &= \int_0^\Theta (\Theta - t) \int_0^R r \int_0^{2\pi} \int_{-L}^L \frac{\partial v_{1r}}{\partial \varphi} dz d\varphi dr dt, \\ C_1 &= C_2 = \frac{\pi}{2} \Theta^2 R^2 V_0,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}D_1 &= \nu \int_0^\Theta (\Theta - t) \int_0^R r \int_0^{2\pi} \int_{-L}^L \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial v_{1r}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_{1r}}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 v_{1r}}{\partial z^2} \right] dz d\varphi dr dt - \frac{\pi}{8} \Theta^2 R^2 V_0^2 - \\ &\quad - \int_0^\Theta (\Theta - t) \int_0^R r \int_0^{2\pi} \int_{-L}^L v_{1r} \frac{\partial v_{1r}}{\partial r} dz d\varphi dr dt - \int_0^\Theta (\Theta - t) \int_0^R r \int_0^{2\pi} \int_{-L}^L v_{1\varphi} \frac{\partial v_{1r}}{\partial \varphi} dz d\varphi dr dt,\end{aligned}$$

$$A_2 = \int_0^\Theta (\Theta - t) \int_0^R r \int_0^{2\pi} \int_{-L}^L \frac{\partial v_{1r}}{\partial r} dz d\varphi dr dt, \quad B_2 = 1 + \int_0^\Theta (\Theta - t) \int_0^R r \int_0^{2\pi} \int_{-L}^L \frac{\partial v_{1r}}{\partial \varphi} dz d\varphi dr dt,$$

$$\begin{aligned}D_2 &= \nu \int_0^\Theta (\Theta - t) \int_0^R r \int_0^{2\pi} \int_{-L}^L \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial v_{1\varphi}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_{1\varphi}}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 v_{1\varphi}}{\partial z^2} \right] dz d\varphi dr dt - \\ &\quad - \int_0^\Theta (\Theta - t) \int_0^R r \int_0^{2\pi} \int_{-L}^L v_{1r} \frac{\partial v_{1r}}{\partial r} dz d\varphi dr dt - \frac{\pi}{8} \Theta^2 R^2 V_0^2 - \\ &\quad - \int_0^\Theta (\Theta - t) \int_0^R r \int_0^{2\pi} \int_{-L}^L v_{1\varphi} \frac{\partial v_{1r}}{\partial \varphi} dz d\varphi dr dt,\end{aligned}$$

$$A_3 = \int_0^\Theta (\Theta - t) \int_0^R r \int_0^{2\pi} \int_{-L}^L \frac{\partial v_{1z}}{\partial r} dz d\varphi dr dt, \quad B_3 = \int_0^\Theta (\Theta - t) \int_0^R r \int_0^{2\pi} \int_{-L}^L \frac{\partial v_{1z}}{\partial \varphi} dz d\varphi dr dt,$$

$$C_3 = 1 + \frac{\pi}{2} \Theta^2 R^2 V_0,$$

$$D_3 = \nu \int_0^\Theta (\Theta - t) \int_0^R r \int_0^{2\pi} \int_{-L}^L \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial v_{1z}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_{1z}}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 v_{1z}}{\partial z^2} \right] dz d\varphi dr dt - \frac{\pi}{8} \Theta^2 R^2 V_0^2 -$$

$$- \int_0^\Theta (\Theta - t) \int_0^R r \int_0^{2\pi} \int_{-L}^L v_{1r} \frac{\partial v_{1z}}{\partial r} dz d\varphi dr dt - \int_0^\Theta (\Theta - t) \int_0^R r \int_0^{2\pi} \int_{-L}^L v_{1\varphi} \frac{\partial v_{1z}}{\partial \varphi} dz d\varphi dr dt.$$

Решение данной системы определялось методом Крамера [10]:

$$\alpha_{2r} = \Delta_r / \Delta, \quad \alpha_{2\varphi} = \Delta_\varphi / \Delta, \quad \alpha_{2z} = \Delta_z / \Delta,$$

где

$$\Delta = A_1(B_2C_3 - B_3C_2) - B_1(A_2C_3 - A_3C_2) + C_1(A_2B_3 - A_3B_2),$$

$$\Delta_r = D_1(B_2C_3 - B_3C_2) - B_1(D_2C_3 - D_3C_2) + C_1(D_2B_3 - D_3B_2),$$

$$\Delta_\varphi = D_1(B_2C_3 - B_3C_2) - B_1(D_2C_3 - D_3C_2) + C_1(D_2B_3 - D_3B_2),$$

$$\Delta_z = A_1(B_2D_3 - B_3D_2) - B_1(A_2D_3 - A_3D_2) + D_1(A_2B_3 - A_3B_2).$$

Ниже с использованием метода осреднения функциональных поправок получены выражения для компонент вектора скорости потока газовой смеси во втором приближении. Обычно второго приближения достаточно для выполнения анализа полученного решения и проведения некоторых оценок [11, 12].

Запишем уравнение (1) в цилиндрической системе координат:

$$\frac{\partial C(r, \varphi, z, t)}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r D \frac{\partial C(r, \varphi, z, t)}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( D \frac{\partial C(r, \varphi, z, t)}{\partial \varphi} \right) +$$

$$+ \frac{\partial}{\partial z} \left( D \frac{\partial C(r, \varphi, z, t)}{\partial z} \right) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} [r C(r, \varphi, z, t) v_r(r, \varphi, z, t)] -$$

$$- \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} [C(r, \varphi, z, t) v_\varphi(r, \varphi, z, t)] - \frac{\partial}{\partial z} [C(r, \varphi, z, t) v_z(r, \varphi, z, t)]. \quad (5)$$

Для определения пространственно-временного распределения концентрации ростового вещества в потоке газовой смеси используем метод осреднения функциональных поправок. Для того чтобы определить первые приближения искомых функций, заменим их на неизвестное среднее значение  $\alpha_{1C}$  в правой части уравнения (5). Используя рассмотренный выше алгоритм, получаем распределение концентрации в первом приближении

$$C_1(r, \varphi, z, t) = -\frac{\alpha_{1C}}{r} \int_0^t \frac{\partial [r v_r(r, \varphi, z, \tau)]}{\partial r} d\tau - \frac{\alpha_{1C}}{r} \int_0^t \frac{\partial v_\varphi(r, \varphi, z, \tau)}{\partial \varphi} d\tau -$$

$$- \alpha_{1C} \int_0^t \frac{\partial v_z(r, \varphi, z, \tau)}{\partial z} d\tau + C_0 \delta(z + L).$$

Определим средние значения для первых приближений искомых функций:

$$\alpha_{1C} = \frac{1}{\pi\Theta R^2 L} \int_0^\Theta \int_0^R r \int_0^{2\pi} \int_{-L}^L C_1(r, \varphi, z, \tau) dz d\varphi dr dt. \quad (6)$$

Подставляя выражения для первого приближения концентрации в соотношение (6), получаем [10]

$$\alpha_{1C} = \frac{C_0}{L} \left( 1 + \frac{1}{\pi\Theta RL} \int_0^\Theta (\Theta - t) \int_0^R \int_{-L}^L v_r(R, \varphi, z, t) dz d\varphi dt + \frac{\Theta V_0}{RL} \right).$$

Второе приближение концентрации определяется с использованием метода осреднения функциональных поправок [11–14], т. е. путем замены искомой функции  $C$  в правой части уравнения (5) на сумму  $\alpha_{2C} + C_1$ . В данном случае выражение для второго приближения искомой функции записывается в следующем виде:

$$\begin{aligned} C_2(r, \varphi, z, t) = & \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \int_0^t r D \frac{\partial C_1(r, \varphi, z, \tau)}{\partial r} d\tau + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \varphi} \int_0^t D \frac{\partial C_1(r, \varphi, z, \tau)}{\partial \varphi} d\tau + \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \int_0^t D \frac{\partial C_1(r, \varphi, z, \tau)}{\partial z} d\tau - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \int_0^t [\alpha_{2C} + C_1(r, \varphi, z, \tau)] v_r(r, \varphi, z, \tau) d\tau \right) - \\ & - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \int_0^t [\alpha_{2C} + C_1(r, \varphi, z, \tau)] v_\varphi(r, \varphi, z, \tau) d\tau + C_0 \delta(z + L) - \\ & - \frac{\partial}{\partial z} \int_0^t [\alpha_{2C} + C_1(r, \varphi, z, \tau)] v_z(r, \varphi, z, \tau) d\tau. \end{aligned}$$

Среднее значение второго приближения концентрации ростового вещества  $\alpha_{2C}$  определяется с помощью соотношения

$$\alpha_{2C} = \frac{1}{\pi\Theta R^2 L} \int_0^\Theta \int_0^R r \int_0^{2\pi} \int_{-L}^L (C_2 - C_1) dz d\varphi dr dt. \quad (7)$$

Подставляя выражения для первого и второго приближений концентрации газовой смеси в соотношение (7), получаем уравнение для искомого среднего значения в виде

$$\begin{aligned} \alpha_{2C} = & \frac{1}{\pi\Theta R^2 L} \int_0^\Theta (\Theta - t) \int_0^R r \int_0^{2\pi} D \left( \frac{\partial C_1(r, \varphi, z, t)}{\partial z} \Big|_{z=L} - \frac{\partial C_1(r, \varphi, z, t)}{\partial z} \Big|_{z=-L} \right) d\varphi dr dt - \\ & - \frac{1}{\pi\Theta R^2 L} \int_0^\Theta (\Theta - t) \int_0^{2\pi} \int_{-L}^L \{ r [\alpha_{2C} - \alpha_{1C} + C_1(R, \varphi, z, t)] v_r(R, \varphi, z, t) \} dz d\varphi dt - \\ & - \frac{V_0}{\pi\Theta R^2 L} \int_0^\Theta (\Theta - t) \int_0^R r \int_0^{2\pi} (\alpha_{2C} - \alpha_{1C} + C_0) dz d\varphi dr dt. \end{aligned}$$

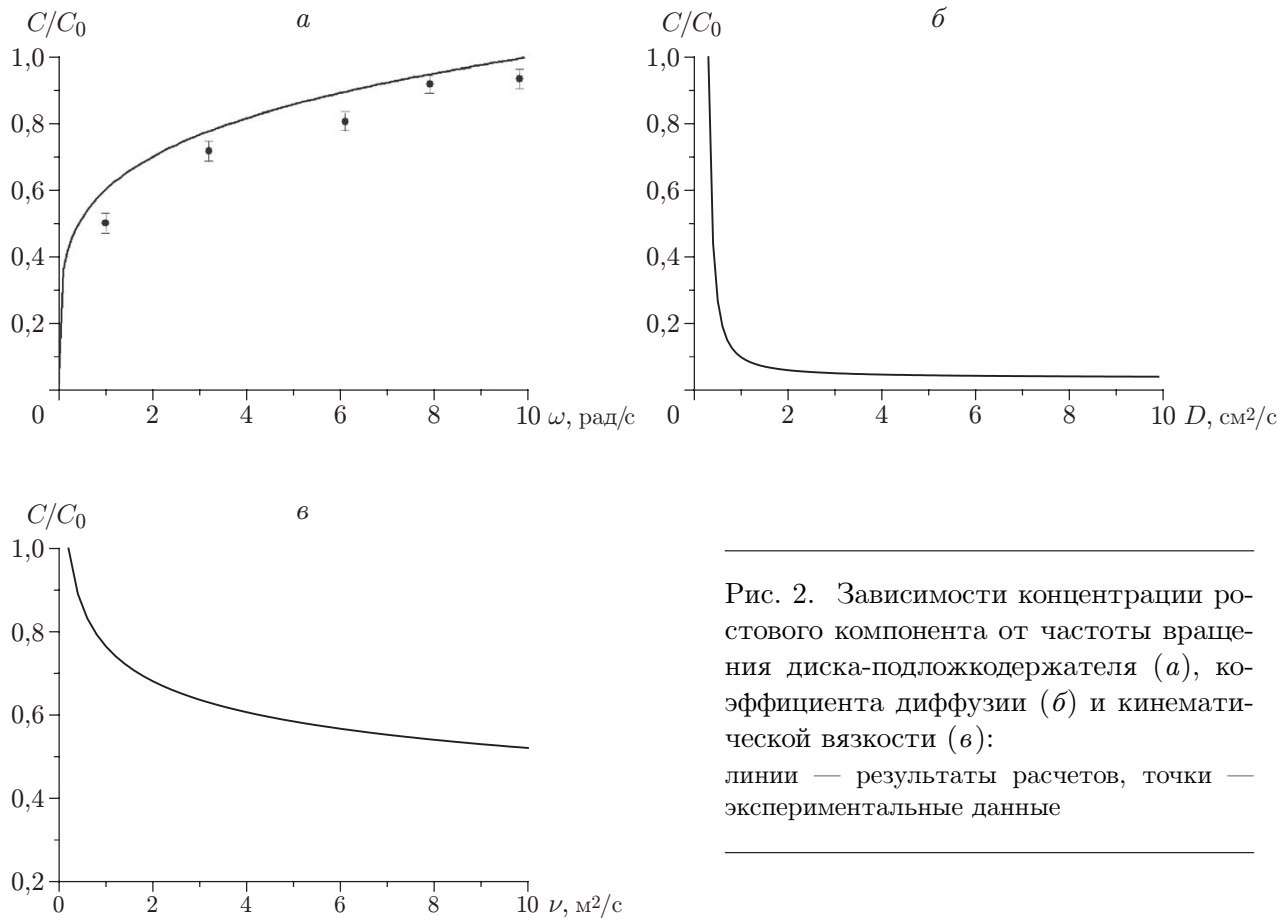


Рис. 2. Зависимости концентрации ростового компонента от частоты вращения диска-подложкодержателя (а), коэффициента диффузии (б) и кинематической вязкости (в):  
 линии — результаты расчетов, точки — экспериментальные данные

В данной работе концентрация ростового компонента и проекции скорости потока газовой смеси определены во втором приближении с использованием метода осреднения функциональных поправок.

**Результаты анализа.** С помощью полученных выше соотношений проведен анализ зависимости концентрации ростового компонента в потоке газовой смеси от частоты вращения диска-подложкодержателя  $\omega$ , коэффициента диффузии  $D$  и кинематической вязкости  $\nu$ . На рис. 2 представлены результаты, полученные для случая, когда в качестве газа-носителя используется водород, диаметр реакционной камеры равен  $d = 200$  мм, диаметр диска-подложкодержателя  $d_1 = 160$  мм, средний расход газа  $1,33 \cdot 10^{-4}$  м<sup>3</sup>/с, частота вращения  $\omega = 1/3$  рад/с, характерная длина реакционной камеры  $L = 500$  мм. На рис. 2,а видно, что при неизменной концентрации на входе в зону осаждения  $C_0$  концентрация  $C$  монотонно увеличивается. Это приводит к увеличению скорости эпитаксиального роста. На рис. 2,а приведены также экспериментальные данные, полученные с использованием измеренных значений скорости увеличения толщины эпитаксиального слоя и частоты вращения подложкодержателя и с учетом линейной зависимости скорости роста от концентрации ростового компонента газовой смеси  $C_0$  (триметилгаллий, арсин) [5, 6]. Расчетная зависимость достаточно хорошо согласуется с полученной в эксперименте. Некоторое различие экспериментальных и теоретических данных, по-видимому, обусловлено наличием побочных реакций в газовой фазе [5], вследствие чего не весь объем арсенида галлия переходит в твердую фазу. Подобная экспериментальная зависимость  $C/C_0$  от  $\omega$  получена в работе [15].



На рис. 2,б приведена зависимость концентрации  $C/C_0$  от коэффициента диффузии  $D$ . Видно, что увеличение коэффициента диффузии приводит к увеличению скорости переноса частиц ростового вещества, в результате чего происходит уменьшение концентрации частиц ростового компонента в зоне осаждения. В общем случае коэффициент диффузии газов-реагентов зависит от их концентрации. Однако в данной работе рассматривается эпитаксия в потоке водорода, для которого коэффициент диффузии слабо зависит от концентрации ростового компонента в широком диапазоне значений технологических параметров. С учетом данных работ [5, 6] будем считать, что

$$D(C) \approx \frac{v_z(r, \varphi, z, t)C(r, \varphi, z, t) + L \partial C(r, \varphi, z, t)/\partial t}{\partial C(r, \varphi, z, t)/\partial z}.$$

При данных условиях процесса эпитаксии зависимость концентрации газовой смеси от кинематической вязкости  $\nu$  является более слабой (см. рис. 2,в) по сравнению с ее зависимостями от других параметров. Представленные зависимости справедливы для масштабов, сопоставимых с толщиной диффузионного слоя или незначительно превышающих ее.

**Заключение.** В работе предложен аналитический метод моделирования физических процессов, происходящих в условиях эпитаксии из газовой фазы с учетом вращения диска-подложкодержателя. Получены пространственно-временные распределения концентрации ростового компонента в потоке газовой смеси и проведен анализ влияния на них основных технологических параметров. Представленные результаты могут быть использованы для оптимизации параметров установок, в которых осуществляется газофазная эпитаксия.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. **Молекулярно-лучевая эпитаксия и гетероструктуры** / Под ред. Л. Ченг, К. Плога. М.: Мир, 1989.
2. **Herman M. A.** Epitaxy-physical principles and technical implementation / M. A. Herman, W. Richter, H. Sitter. Berlin: Springer, 2004.
3. **Stringfellow G. B.** Organometallic vapor-phase epitaxy: Theory and practice. Boston: Acad. Press, 1989.
4. **Болдыревский П. Б., Коровин А. Г., Денисов С. А. и др.** Исследование однородности толщин слоев кремния, выращенных в процессе молекулярно-лучевой эпитаксии из сублимационного источника // Журн. техн. физики. 2014. Т. 84, № 11. С. 155–158.
5. **Болдыревский П. Б., Хрыкин О. И.** Влияние переходных процессов в газовой фазе на электрофизические свойства субмикронных структур, полученных МОС-гидридной эпитаксией // Изв. АН СССР. Неорган. материалы. 1990. Т. 26, № 10. С. 2215–2217.
6. **Фролов И. А., Болдыревский П. Б., Друзь Б. Л., Соколов Е. Б.** Механизм эпитаксиального роста GaAs // Изв. АН СССР. Неорган. материалы. 1977. Т. 13, № 5. С. 773–775.
7. **Talalaev R. A., Yakovleva E. V., Karpova S. Yu., Makarov Yu. N.** On low temperature kinetic effects in metal-organic vapor phase epitaxy of III–V compounds // J. Cryst. Growth. 2001. V. 230. P. 232–238.
8. **Лундин В. В., Сахаров А. В., Заварин Е. Е. и др.** Влияние несущего газа и профиля легирования на морфологию поверхности сильно легированных слоев GaN:Mg, выращенных методом МО ГФЭ // Физика и техника полупроводников. 2009. Т. 43, № 7. С. 996–1001.
9. **Левич В. Г.** Физико-химическая гидродинамика. М.: Наука, 1962.
10. **Корн Г.** Справочник по математике для научных работников и инженеров / Г. Корн, Т. Корн. М.: Наука, 1974.

11. **Pankratov E. L.** Decreasing of depth of  $p$ - $n$ -junction in a semiconductor heterostructure by serial radiation processing and microwave annealing // J. Comput. Theor. Nanosci. 2012. V. 9. P. 41–49.
12. **Pankratov E. L., Bulaeva E. A.** About controlling of regimes of heating during growth a heterostructures from gas phase // Universal J. Materials Sci. 2013. V. 1. P. 180–200.
13. **Соколов Ю. Д.** Об определении динамических усилий в шахтных подъемных канатах // Прикл. механика. 1955. Т. 1, № 1. С. 23–35.
14. **Лучка А. Ю.** Теория и применение метода осреднения функциональных поправок. Киев: Изд-во АН УССР, 1963.
15. **Zhanh P., Wei H., Cong G., et al.** Effects of disk rotation rate on the growth of ZnO films by low-pressure metal-organic vapor deposition // Thin Solid Films. 2008. V. 516. P. 925–928.

*Поступила в редакцию 31/III 2014 г.,  
в окончательном варианте — 28/V 2015 г.*

---