

ФИЗИЧЕСКИЕ И ТЕХНИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ МИКРО- И ОПТОЭЛЕКТРОНИКИ

УДК 546.281 : 536.244

В. Г. Минкина, В. П. Попов

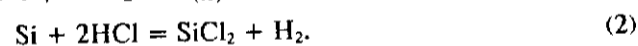
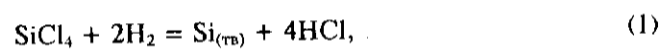
(Минск)

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ СЛОЕВ КРЕМНИЯ В ХЛОРИДНОМ CVD-ПРОЦЕССЕ ПРИ Пониженном давлении

Проведено расчетное исследование процесса получения эпитаксиальных слоев кремния. Показана возможность регулирования технологическими параметрами оптимизировать процесс, при котором могут быть получены однородные осаждаемые слои эпитаксиального кремния. Рассмотрено влияние термодиффузии на скорость осаждения.

Рассматривается процесс получения эпитаксиальных слоев кремния из смеси тетрахлорсилана с водородом в реакторе, представляющем собой вертикальную трубу 1 с расположенной в ней соосно многогранной пирамиды-подложкодержателя 2. Осаждение кремния происходит на поверхности кремниевых подложек 3. Температура охлаждаемых стенок реактора 1 существенно ниже температуры поверхности осаждения (рис. 1).

Химические реакции процесса образования кремния описываются уравнениями



Тепломассоперенос в зоне осаждения при ламинарном течении газовой смеси описывается системой уравнений сохранения в приближении пограничного слоя:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho v) = 0, \quad (3)$$

$$\rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho v \frac{\partial u}{\partial r} = -\frac{dP}{dx} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial u}{\partial r} \right), \quad (4)$$

$$\rho u \frac{\partial H}{\partial x} + \rho v \frac{\partial H}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial H}{\partial r} \right), \quad (5)$$

$$\rho u \frac{\partial c_i}{\partial x} + \rho v \frac{\partial c_i}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \rho D_i \left(\frac{\partial c_i}{\partial r} + \frac{\alpha_T c_i (1 - c_i)}{T} \frac{\partial T}{\partial r} \right) \right], \quad (6)$$

где x, r — проточные и поперечные координаты; u, v — продольная и поперечная составляющие скорости течения газовой смеси; T — температура; ρ — плотность; μ — коэффициент динамической вязкости; c_p — теплоемкость при постоянном давлении; λ — коэффициент теплопроводности; D — коэффициент диффузии; H — энтальпия; P — давление; c_i — весовая концентрация i -го компонента в газовой смеси; α_T — термодиффузионное отношение. Индексы: 1 — SiCl_4 ; 2 — H_2 ; 3 — HCl ; 4 — SiCl_2 ; 5 — Ar .

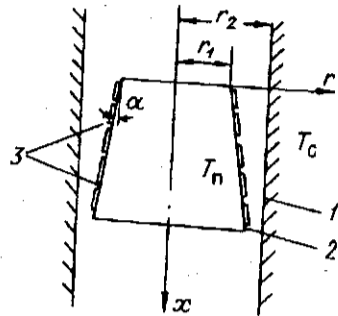


Рис. 1. Схема реакционной камеры вертикального типа:
1 — охлаждаемые стенки, 2 — подложкодержатель,
3 — подложки

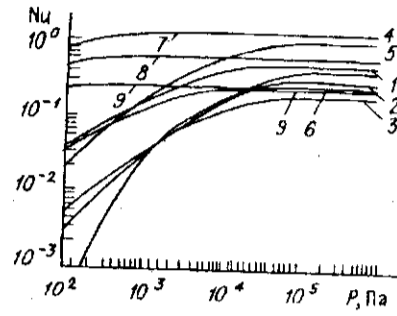


Рис. 2. Зависимость Nu от давления при различных T_n и k на разных \bar{x}_D ($T_C = 373$ К, $T_0 = 293$ К),
 $T = 1373$; $k = 9,4 \cdot 10^{-4}$ (1-3); 1523 ; $5 \cdot 10^{-3}$ (4-6);
 $k = 0,3$ (7-9); $\bar{x}_D = 10^{-3}$ (1, 4, 7), 10^{-2} (2, 5, 8), 10^{-1} (3, 6, 9)

Граничные условия на входе в реактор:

$$x = 0, \quad r_1 < r < r_2, \quad u = u_0, \quad v = 0, \quad T = T_0, \quad c_i = c_{0i}; \quad (7)$$

на охлаждаемой стенке реактора:

$$x > 0, \quad r = r_2, \quad u = v = 0, \quad T = T_C, \quad (8)$$

$$\frac{\partial c_i}{\partial r} + \frac{\alpha_{T_i} c_i (1 - c_i)}{T} \frac{\partial T}{\partial r} = 0; \quad (9)$$

на поверхности осаждения слоя:

$$x > 0, \quad r = r_1, \quad u = v = 0, \quad T = T_n, \quad (10)$$

$$\rho D_1 \left[\frac{\partial c_1}{\partial r} + \frac{\alpha_{T_1} c_1 (1 - c_1)}{T} \frac{\partial T}{\partial r} \right] = Z c_1, \quad (11)$$

$$4j_1 + j_3 + 2j_4 = 0, \quad j_i = \frac{\rho D_i}{M_i} \left[\frac{\partial c_i}{\partial r} + \frac{\alpha_{T_i} c_i (1 - c_i)}{T} \frac{\partial T}{\partial r} \right]. \quad (12)$$

Уравнение (11) предполагает, что химическая реакция (1) идет по гетерогенному механизму, где $Z = kP/(1 + 10^{-4}P)/\sum c_i/M_i$. Уравнение (12) указывает на наличие баланса потоков по хлору хлорсодержащих компонентов (SiCl_4 , HCl , SiCl_2) газовой смеси. Из (2) имеем

$$K = P_2 P_4 / P_3^2, \quad (13)$$

и так как общее давление газовой смеси P постоянно, то

$$P = \sum_{i=1}^5 P_i, \quad (14)$$

где P_i — парциальное давление i -го компонента.

Константа скорости для реакции гетерогенного образования кремния k и константа K из выражения (13) определены согласно данным [1].

Изменения скорости осаждения кремния по длине реактора представлены на рис. 2—5 в безразмерных переменных Nu , \bar{x}_D , где $\bar{x}_D = \frac{x}{\text{Re}_D h}$, $\text{Nu} = \frac{28,08h}{\rho_0 D_0 c_{01}} j_1$, $h = r_2 - r_1$, M — молекулярная масса i -го компонента, Re_D — диффузионный критерий Пекле. Индексы: 0 — на входе в реактор.

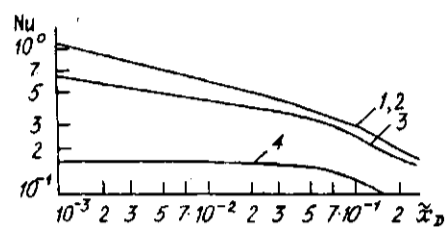


Рис. 3. Зависимость Nu от \tilde{x}_D при разных давлениях ($T_n = 1523$, $T_c = 373$ К):
1 — $P = 101$ кПа; 2 — 10,1; 3 — 1,01; 4 — 0,101

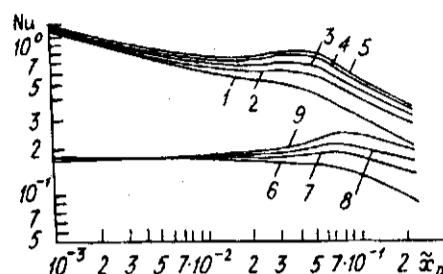


Рис. 4. Изменение Nu с \tilde{x}_D в зависимости от T_c и давления ($T_n = 1523$, $T_0 = 293$ К):
 $P = 101$ кПа (1—5); 0,101 (6—9); $T_c = 373$ (1, 6), 673 (2, 7), 873 (3, 8), 1073 (4), 1173 К (5, 9)

Указанная система уравнений (3) — (6) с граничными условиями (7) — (14) решалась численно методом конечных разностей [2].

Согласно результатам моделирования при атмосферном давлении и температуре подложки 1200—1250 °С, эпитаксия кремния протекает в промежуточном (диффузионно-кинетическом) режиме, что соответствует экспериментальным данным многих авторов. С понижением давления и температуры подложки T_n режим осаждения переходит из промежуточного в кинетический (см. рис. 2). Параметры, при которых реализуется этот переход, зависят от расхода газовой смеси, ее физических свойств, размеров реактора и расстояния от входной кромки подложкодержателя.

Из рис. 2 следует, что чем меньше это расстояние, тем при больших значениях давления и температуры подложкодержателя осуществляется переход к кинетическому режиму с характерной для него сильной зависимостью скорости осаждения от температуры и давления.

Для анализа кривых $Nu(P)$ при переходе из промежуточной в диффузионную область (см. рис. 2, кривые 7—9) использовалось значение константы скорости $k = 0,3$ см/с, которое значительно больше, чем для реально протекающего процесса. Понижение давления приводит к уменьшению скорости осаждения кремния (см. рис. 3), но в то же время усиливает влияние кинетики поверхностных процессов, что существенно влияет на качественные характеристики образующегося эпитаксиального слоя и улучшает его равномерность.

Большое влияние на скорость осаждения в рассматриваемом процессе оказывает термодиффузия, а следовательно, все факторы, которые влияют на градиенты температуры в реакторе.

На кривой зависимости Nu от \tilde{x}_D , вместо монотонного убывания скорости осаждения по мере выработки тетрахлорсилана (см. рис. 4, 5), появляется максимум, наличие которого можно объяснить уменьшением роли термодиффузии по мере прогревания газовой смеси.

В области малых \tilde{x}_D Nu практически не зависит от температуры стенки (см. рис. 4). Начиная с $\tilde{x}_D \geq 0,01$, происходит расслоение кривых и рост Nu с

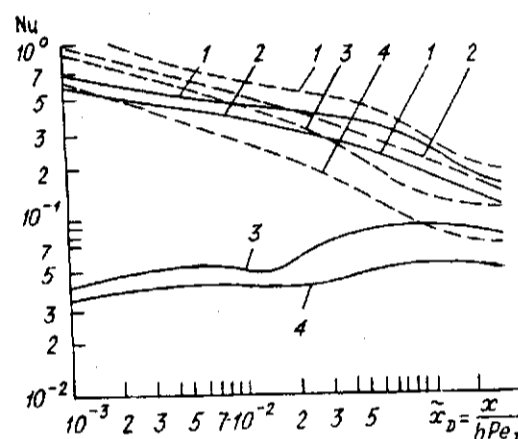


Рис. 5. Изменение Nu с \tilde{x}_D в зависимости от температурных параметров ($P = 1,01$ кПа):
 $T_n = 1523$ (1, 2), 1273 (3, 4); $T_c = 373$ (1, 2), 1173 (3, 4);
 $T_0 = 293$ (1, 3), 673 К (2, 4). Штриховые линии — без вклада термодиффузии

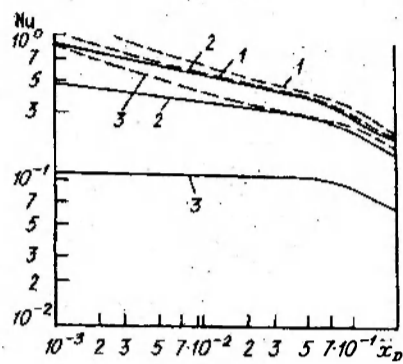


Рис. 6. Зависимость Nu от \bar{x}_D при разных условиях осаждения ($T_n = 1473$ К):
 $P = 101$ (1); $1,01$ (2); $0,101$ кПа (3). Штриховые линии — без вклада термодиффузии

повышением температуры стенки T_c , которое связано с понижением вклада термодиффузии. Повышение входной температуры газовой смеси T_0 от 293 до 673 К приводит к понижению Nu (см. рис. 5). Скорость осаждения v_p с повышением T_0 , наоборот, возрастает. В граничных условиях на поверхности осаждения (II) учтена кинетика гетерогенной реакции (1). С понижением температуры подложек T_n происходит переход в кинетическую область, вследствие чего, несмотря на уменьшение перепада температур $T_n - T_c$ (при постоянной T_c), вклад термодиффузионной составляющей в Nu возрастает (см. рис. 5). С понижением давления вклад термодиффузии в Nu увеличивается (рис. 6).

На рис. 7 представлены зависимости распределения скорости осаждения кремния от технологических параметров и геометрических размеров реактора.

Варьирование технологическими (расход газовой смеси, температура в зоне осаждения и на стенке, входная температура газовой смеси и т. д.) и геометрическими (угол наклона пирамиды α , кольцевой зазор на входе в реактор h и т. д.) факторами позволяет рассчитать оптимальную область параметров, в которой могут быть получены однородные осаждаемые слои эпитаксиального кремния.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Juza J., Cermak J. Phenomenological model of the CVD epitaxial reactor // J. Electrochem. Soc.—1978.—129, N 7.—Р. 1627.
2. Патанкар С., Сполдинг Д. Тепло- и массообмен в пограничных слоях /Под ред. А. В. Лыкова.—М.: Энергия, 1971.

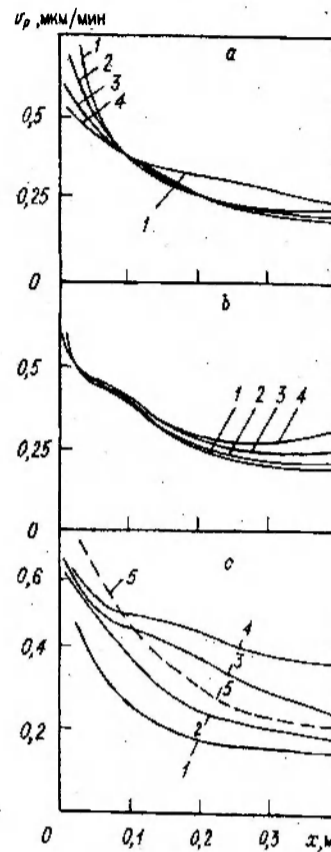


Рис. 7. Зависимость скорости роста кремния v_p по длине канала от разных факторов ($T_n = 1523$ К, $T_c = 373$ К, $T_0 = 293$ К, $P = 1,01$ кПа, $\bar{x}_1 = 0,005$),
 $h = 1$ (1а), 2 (2а), 3 (3а, 1б, 2с, 5с), 4 см (4а); $\alpha = 0$ (1 — 4а, 1б, 1 — 3с, 5с), 1 (2б), 2 (3б), 3* (4б, 4с); $G = 3$ (1с), 6 (1 — 4а, 1 — 4б, 2с, 5с), $12 \text{ м}^3/\text{ч}$ (3 — 4с), $P = 101$ кПа (5с)