

# Химическое осаждение (CVD) пленки нитрида кремния ( $\text{Si}_3\text{N}_4$ ) из смеси $\text{SiF}_4$ and $\text{NH}_3$

## Введение

Точное моделирование химических процессов на поверхности имеет фундаментальное значение для гетерогенного катализа, изготовления полупроводниковых устройств, топливных элементов, самоорганизующихся монослоев и т. д. CWB включает несколько моделей реакторов, которые могут использоваться для моделирования таких процессов. Эти модели предполагают, что химические реакции могут происходить в газовой фазе, на поверхности и в объеме конденсированной фазы. Для описания гетерогенных реакций, которые происходят на поверхности, между поверхностью и газовой фазой, а также между поверхностью и конденсированной фазой был использован формализм поверхностных узлов. В рамках этого формализма поверхностная и конденсированная фазы могут иметь несколько различных типов участков, в которых могут происходить гетерогенные реакции, и скорости этих реакций рассчитываются в соответствии с формальными правилами кинетики. Модели реакторов рассчитывают установившееся состояние или временную зависимость химического состава среды (газовая фаза, конденсированная фаза и поверхность) путем решения набора дифференциальных уравнений для каждого химического компонента и набора уравнений тепло- и массопереноса.

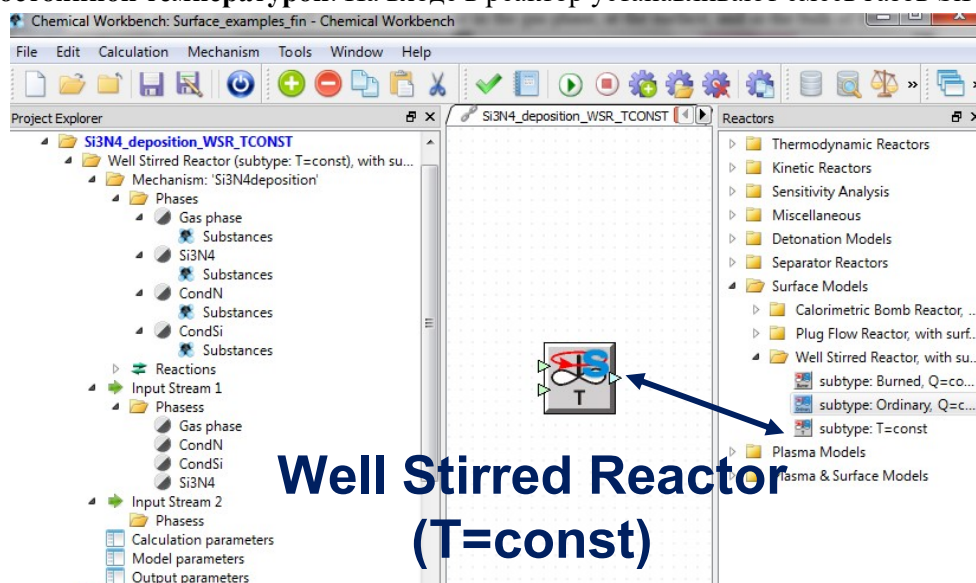
## Постановка задачи

Требуется рассчитать рост пленки нитрида кремния из смеси  $\text{SiF}_4$  и  $\text{NH}_3$  различного состава. Общий процесс можно описать как  $4\text{NH}_3_{\text{g}} + \text{SiF}_4_{\text{g}} = \text{Si}_3\text{N}_{4\text{bulk}} + 12\text{HF}_{\text{gas}}$ . Давление газовой смеси низкое (около нескольких торр), поэтому газофазное разложение реагентов происходит медленно, температура фиксируется на уровне 1440 К (типичное значение для экспериментов химического осаждения из паровой фазы). Мольная доля газообразного тетрафторсилана ( $\text{SiF}_4$ ) варьируется от 5 до 35%.

## Решение задачи в Chemical Workbench

Этот пример включает расчёт осаждения пленки  $\text{Si}_3\text{N}_4$  в зависимости от состава газовой фазы. Процесс протекает при низком давлении  $\sim 2$  Торр и высокой температуре 1440 К, поэтому можно предположить, что процессы тепло- и массообмена внутри реактора настолько быстры, что обеспечивают равномерное распределение реагентов и газа. продукты фазовых реакций, что делает возможным аппроксимировать эту систему моделью **Реактора идеального смешения** (Well-Stirred Reactor, WSR). Эта модель описывает процесс осаждения из газовой фазы в проточном 0-мерном реакторе. В результате гетерогенных химических реакций рассчитываются стационарный химический состав газовой, конденсированной и поверхностной фаз, а также стационарная скорость роста пленки.

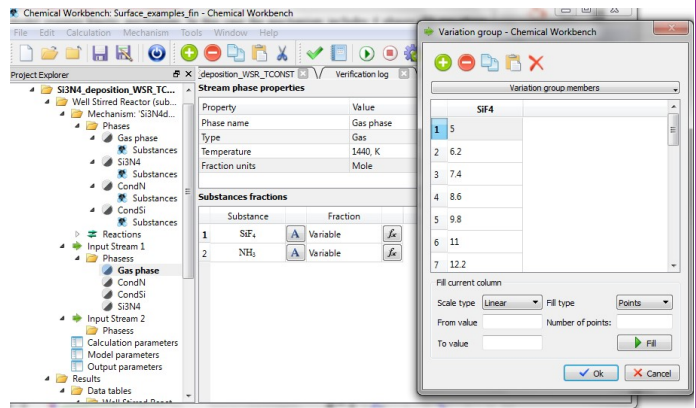
Этот пример представляет собой моделирование с фиксированной температурой, демонстрирующее эффекты изменения отношения  $\text{SiF}_4/\text{NH}_3$  во входящем газе, поэтому используется **Реактор идеального смешения с постоянной температурой**. На входе в реактор устанавливается смесь газов  $\text{SiF}_4$  и  $\text{NH}_3$ .



Реактор идеального смешения (Well-Stirred Reactor, WSR) требует введения следующих параметров:

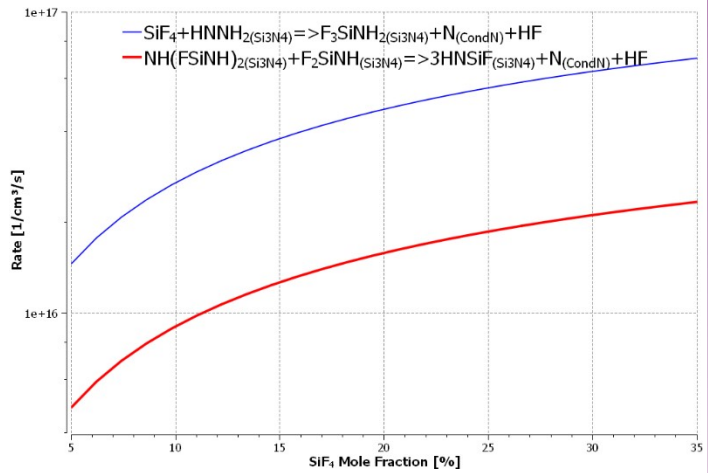
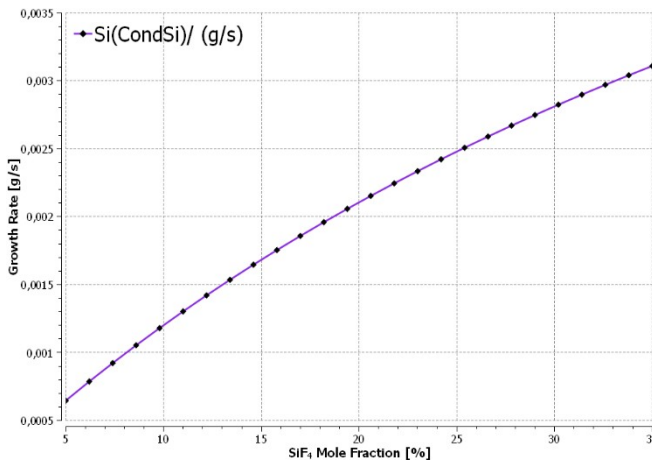
- Кинетический механизм,
- Входной поток,
- Параметры расчёта,
- Параметры модели.

В этом примере отношение  $\text{SiF}_4/\text{NH}_3$  варьируется в Input Stream 1,  $T = 1440 \text{ K}$ ,  $P = 2 \text{ Torr}$ , расход  $0.2268 \text{ g/s}$ , объём реактора  $2000 \text{ cm}^3$  и площадь поверхности  $950 \text{ cm}^2$ .



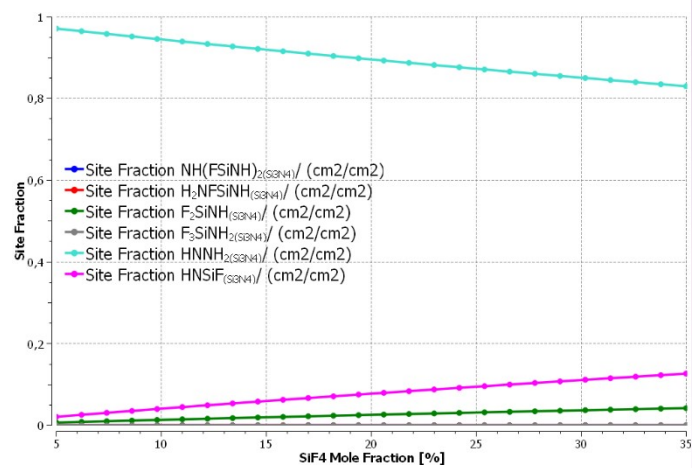
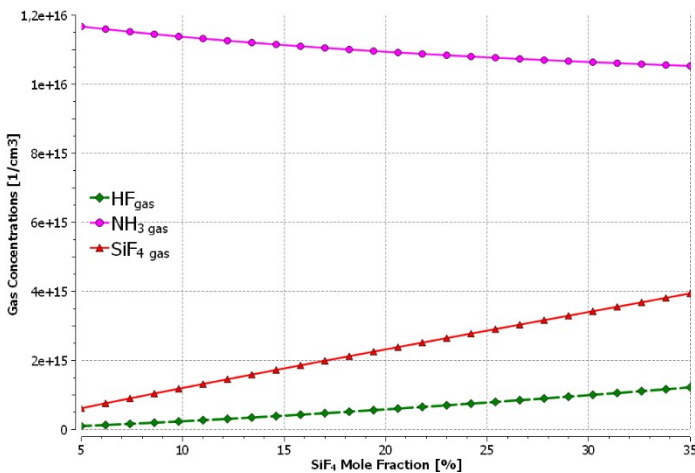
Кинетический механизм химического осаждения плёнки  $\text{Si}_3\text{N}_4$  взят из литературы (M. E. Coltrin et al J. Phys. Chem. 98:10138 (1994) and J. A. Miller et al, Comb. Sci. Technol. 34:149 (1983)). Он включает 4 фазы, 33 газофазные реакции и 6 необратимых реакции на поверхности.

## Результаты



Предсказанная скорость роста плёнок (г/сек) растёт с увеличением мольной доли  $\text{SiF}_4$ .

Анализ чувствительности показывает наибольшее влияние на скорость роста нитрида оказывает поверхностная реакция с  $\text{SiF}_4$ .



Концентрации газовых веществ (слева) и веществ на поверхности (справа): реагенты  $\text{SiF}_4$  и  $\text{NH}_3$  истощаются, образуется основной газовый продукт HF; доля веществ на поверхности меняется для различных газов.

## Следующие шаги

Этот пример может быть исследован далее:

1. Изменить параметры реактора, например объём, площадь поверхности, входная температура и др
2. Для интересующих условий сравнить предсказания различных химических механизмов.