

01;05.3

## **Расчет градиента температуры в зоне раствора–расплава при электрожидкостной эпитаксии твердых растворов на основе карбида кремния**

© Б.А. Билалов, Г.К. Сафаралиев, Э.И. Идаятов, Г.Д. Кардашова

Дагестанский государственный университет, Махачкала  
E-mail: dgu@dgu.ru, dgu@datacom.ru

Поступило в Редакцию 2 апреля 2001 г.

Проводится анализ распределения температуры в ростовой ячейке, а также градиента температуры в зоне раствора-расплава иттербий-галлий, иттербий-алюминий при выращивании эпитаксиальных слоев твердых растворов на основе карбида кремния методом электрожидкостной эпитаксии с учетом влияния геометрических параметров ростовой ячейки. Решены стационарные уравнения теплопроводности для всех пяти областей стандартной ростовой ячейки. При этом учтены: джоулевый разогрев; Пельтье-разогрев (охлаждение) поверхностей разделов электрод-источник (подложка)-жидкая зона, контактное тепло, выделяющееся на поверхностях разделов электрод-источник (подложка), теплота растворения и теплота кристаллизации. Получены зависимости градиента температуры  $\nabla T$  в жидкой зоне от плотности тока и от геометрических размеров областей ростовой ячейки.

Максимальное время установления стационарной температуры в ростовой ячейке, схема которой приведена в [1], определяется из выражения  $\tau_T = l^2 / (\pi^2 \cdot a)$  и равно  $\approx 0.25$  s. Здесь  $l$  — длина ростовой ячейки,  $a$  — коэффициент температуропроводности,  $a = \chi / \rho \cdot c \sim 10^{-5}$  m<sup>2</sup>/s;  $\chi$  — коэффициент теплопроводности,  $\chi \sim 20$  W/m·K;  $\rho$  — плотность,

$\rho \sim 5 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3$ ,  $c$  — удельная теплоемкость,  $c \sim 400 \text{ J/kg} \cdot \text{K}$ . При временах роста эпитаксиального слоя (ЭС) ( $30 \div 60 \text{ min}$ ) стационарная температура в ростовой ячейке устанавливается мгновенно.

Поэтому достаточно решить стационарное уравнение теплопроводности для каждой из пяти областей ячейки

$$\chi_i \frac{d^2 T_i}{dz^2} + \rho_i j^2 = 0, \quad i = 1, 2, 3, 4, 5, \quad (1)$$

где  $\chi_i$ ,  $\rho_i$ ,  $T_i$  — коэффициент теплопроводности, удельное сопротивление и температура  $i$ -той области соответственно;  $j$  — плотность тока, протекающая через ростовую ячейку. Система уравнений (1) решена при следующих граничных условиях:  $T_1 = T_{ext}$  при  $z = -(d_l + d_{e1})$ ;  $T_1 = T_2$  при  $z = -d_l$ ;  $T_2 = T_3$  при  $z = 0$ ;  $T_3 = T_4$  при  $z = d_m$ ;  $T_4 = T_5$  при  $z = d_m + d_s$ ;  $T_5 = T_{ext}$  при  $z = d_m + d_s + d_{e5}$ ;

$$\begin{aligned} -\chi_1 \frac{dT_1}{dz} - \chi_2 \frac{dT_2}{dz} &= \Pi_{21} j + R_{k1} S j^2 \quad \text{при } z = -d_l, \\ \chi_2 \frac{dT_2}{dz} - \chi_3 \frac{dT_3}{dz} &= \Pi_{32} j + Q_c \quad \text{при } z = 0, \\ \chi_3 \frac{dT_3}{dz} - \chi_4 \frac{dT_4}{dz} &= \Pi_{43} j - Q_m \quad \text{при } z = d_m, \\ \chi_4 \frac{dT_4}{dz} - \chi_5 \frac{dT_5}{dz} &= \Pi_{54} j + R_{k5} S j^2 \quad \text{при } z = d_m + d_s. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь  $T_{ext}$  — температура внешней среды;  $S$  — площадь контакта электрода с источником (подложкой);  $Q_c$  и  $Q_m$  — теплота кристаллизации и теплота растворения соответственно;  $R_{k1}$  и  $R_{k5}$  — контактные сопротивления поверхностей раздела областей 1–2, 4–5;  $d_{l1}$ ,  $d_{l5}$ ,  $d_l$ ,  $d_m$ ,  $d_s$  — толщины электродов, подложки, расплава, источника.  $\Pi_{ik} = \Pi_k - \Pi_i$  будет больше нуля, если при направлении тока от  $k$ -той области к  $i$ -той на поверхности раздела выделяется тепло Пельтье.

Подчеркнем, что граничные условия (2) написаны для стандартной ростовой ячейки и при условии, что нормали к поверхностям разделов областей выбраны параллельными оси  $Z$ .

Распределение температуры для  $i$ -той области можно представить в виде:

$$T_i(z) = -\frac{1}{2} \frac{\rho_i}{\chi_i} j^2 z^2 + a_i z + b_i, \quad (3)$$

где  $a_i$ ,  $b_i$  — постоянные интегрирования.

В работе найдены явные выражения  $a_i$ ,  $b_i$  для всех пяти областей. Однако ввиду громоздкости этих выражений ниже приведены выражения только для  $a_3$ ,  $b_3$ :

$$\begin{aligned}
 a_3 = & \frac{1}{\chi_3} \left\{ \left( -\frac{d_{e1}}{\chi_1} (\Pi_{21} + \Pi_{32}) - \frac{d_l}{\chi_2} \Pi_{32} + \frac{d_s}{\chi_4} \Pi_{43} + \frac{d_{e5}}{\chi_5} (\Pi_{43} + \Pi_{54}) \right) j \right. \\
 & - \left( \frac{d_{e1}}{\chi_1} + \frac{d_l}{\chi_2} \right) Q_c - \left( \frac{d_s}{\chi_4} + \frac{d_{e5}}{\chi_5} \right) Q_m - \left( \frac{d_{e1}}{\chi_1} R_{k1} - \frac{d_{e5}}{\chi_5} R_{k5} \right) s j^2 \\
 & - \left( \frac{1}{2} \frac{\rho_1}{\chi_1} d_{e1}^2 + \frac{1}{2} \frac{\rho_2}{\chi_2} d_l^2 + \frac{\rho_2}{\chi_1} d_{e1} d_l - \frac{1}{2} \frac{\rho_3}{\chi_3} d_m^2 - \frac{\rho_3}{\chi_4} d_m d_s \right. \\
 & \left. - \frac{\rho_3}{\chi_5} d_s d_{e5} - \frac{1}{2} \frac{\rho_4}{\chi_4} d_s^2 - \frac{\rho_4}{\chi_5} d_s d_{e5} - \frac{1}{2} \frac{\rho_5}{\chi_5} d_{e5}^2 \right) \cdot j^2 \left. \right\} \\
 & \times \left[ \frac{d_{e1}}{\chi_1} + \frac{d_l}{\chi_2} + \frac{d_m}{\chi_3} + \frac{d_s}{\chi_4} + \frac{d_{e5}}{\chi_5} \right]^{-1}; \quad (4)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 b_3 = & T_{ext} + a_3 \left( \frac{\chi_3}{\chi_1} d_{e1} + \frac{\chi_3}{\chi_2} d_l \right) + \left[ \frac{d_{e1}}{\chi_1} (\Pi_{21} + \Pi_{32}) + \frac{d_l}{\chi_2} \Pi_{32} \right] \\
 & + \left( \frac{d_{e1}}{\chi_1} + \frac{d_l}{\chi_2} \right) Q_c + \frac{d_{e1}}{\chi_1} R_{k1} s j^2 + \left( \frac{1}{2} \frac{\rho_1}{\chi_1} d_{e1}^2 + \frac{1}{2} \frac{\rho_2}{\chi_2} d_l^2 + \frac{\rho_2}{\chi_1} d_{e1} d_l \right) j^2. \quad (5)
 \end{aligned}$$

Распределение температуры и ее градиент в области раствора–расплава задаются выражениями

$$T_3(z) = -\frac{1}{2} \frac{\rho_3}{\chi_3} j^2 z^2 + a_3 z + b_3, \quad \nabla T_3(z) = -\frac{\rho_3}{\chi_3} j^2 z + a_3. \quad (6)$$

Для выяснения влияния различных эффектов как на распределение температуры, так и на ее градиент  $\nabla T$  проведен сравнительный анализ вкладов слагаемых в (6) (см. (4), (5)), содержащих коэффициенты Пельтье, тепло Джоуля, контактное тепло и теплоту кристаллизации и растворения. Такой анализ показал, что и тепло Джоуля, и эффект Пельтье, и контактное тепло могут существенно влиять на температуру и ее градиент в рассматриваемой системе. Вклад же  $Q_c$  и  $Q_m$  как минимум на два порядка меньше (если учет этих трех эффектов может привести к  $\nabla T_3 \approx (1 \div 10) \cdot 10^2$  К/м, то учет  $Q_k$  и  $Q_m$  ведет

Значения коэффициентов Пельтье и типы проводимости подложки и источника, использованные при расчетах на ЭВМ

	Тип проводимости	$\Pi_{21},$ V	$\Pi_{32},$ V	$\Pi_{43},$ V	$\Pi_{54},$ V
1	$n-n$	0.6	-0.7	0.7	-0.6
2	$n-p$	0.6	-0.7	1.2	-1.0
3	$p-p$	1	-1.2	1.2	-1.0
4	$n-n$	-0.6	-0.7	0.7	0.6
5	$p-p$	-0.4	-1.2	1.2	0.4
6	$n-n$	-0.4	-0.5	0.6	0.5

к  $\nabla T_3 \approx 1 \text{ K/m}$ ). Однако и вклады первых трех эффектов в зависимости от соотношения между геометрическими размерами различных областей ростовой ячейки, их коэффициентами теплопроводности Пельтье и удельного электросопротивления могут существенно меняться [2]. Влияние контактного тепла будет существенно, если  $R_{k1} \frac{d_1}{\chi_1} \neq R_{k5} \frac{d_5}{\chi_5}$ . Тепло Джоуля внесет значительный вклад, если  $\chi_2 \neq \chi_4$ ,  $\rho_1 \neq \rho_5$ ,  $\rho_2 \neq \rho_4$ ,  $\chi_1 \neq \chi_5$ .

С помощью ЭВМ рассчитаны температуры на фронте кристаллизации  $T_k$  и растворения  $T_m$  и градиент температуры в зоне раствора-расплава при различных значениях геометрических размеров областей ростовой ячейки, типах проводимости подложки и источника (см. таблицу).

Толщина электродов  $d_{e1}$  и  $d_{e2}$  варьировалась от  $1 \cdot 10^{-3}$  до  $8 \cdot 10^{-4} \text{ m}$ , толщина подложки  $d_l$  — от  $1 \cdot 10^{-4}$  до  $4 \cdot 10^{-4} \text{ m}$ , толщина расплава  $d_m$  — от  $1 \cdot 10^{-3}$  до  $5 \cdot 10^{-4} \text{ m}$ , толщина источника  $d_s$  — от  $1 \cdot 10^{-4}$  до  $4 \cdot 10^{-4} \text{ m}$ . Плотность тока  $j$  изменялась в пределах  $(10 \div 40) \cdot 10^4 \text{ A/m}^2$ . Значения других величин, использованные при расчетах, равны:  $T_{ext} = 1273 \text{ K}$ ;  $\chi_1 = \chi_5 = 33.43 \text{ W/(m}\cdot\text{K)}$ ,  $\chi_2 = \chi_4 = 21.3 \text{ W/(m}\cdot\text{K)}$ ,  $\chi_3 = 65.02 \text{ W/(m}\cdot\text{K)}$ ;  $Q_c = Q_m = 0$ ;  $\rho_1 = \rho_5 = 1.72 \cdot 10^{-6} \Omega\cdot\text{m}$ ,  $\rho_2 = \rho_4 = 8 \cdot 10^{-5} \Omega\cdot\text{m}$ ,  $\rho_3 = 4.74 \cdot 10^{-7} \Omega\cdot\text{m}$ ;  $R_{k1} = R_{k5} = 0.01 \Omega$ .

Величина  $\nabla T$  и разность температур  $\nabla T = T_m - T_k$  существенно зависят от величины  $\Pi = (\Pi_{43} + \Pi_{54}) - (\Pi_{21} + \Pi_{32})$ . Максимальное значение  $\nabla T$ , полученное при расчетах, равно  $10 \text{ 100 K/m}$  при  $j = 50 \cdot 10^4 \text{ A/m}^2$  и  $\Pi = 3.2 \text{ V}$ . При этом разность температур  $\nabla T = 8.4 \text{ K}$ .

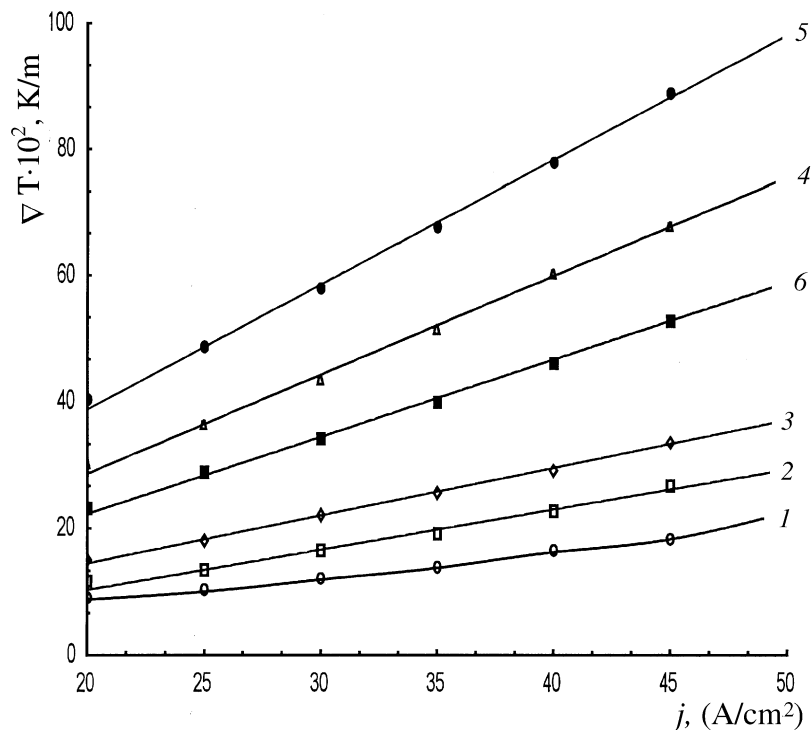
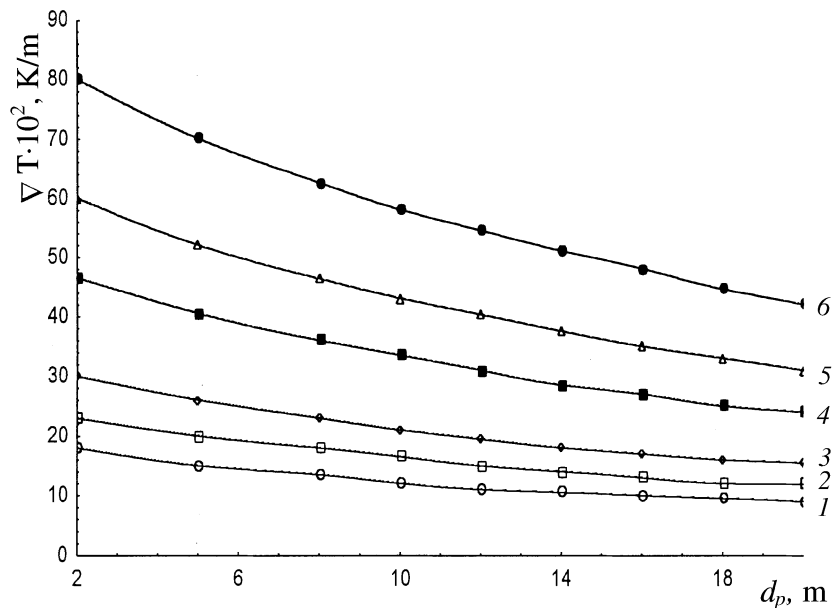


Рис. 1. Зависимость градиента температуры  $\nabla T$  от плотности тока  $j$ .

В соответствии со сказанным основной вклад вносят слагаемые, содержащие коэффициенты Пельтье: во всех рассмотренных случаях  $\nabla T_3$  растет прямо пропорционально плотности тока. Тепло Джоуля незначительно увеличивает  $\nabla T_3$  (рис. 1).

Падение  $\nabla T_3$  с толщиной раствора-расплава обусловлено в основном тем, что увеличение разности температур  $\nabla T = T_m - T_k$  из-за увеличения  $T_m$  и уменьшения  $T_k$  намного меньше роста  $d_m$ . Зависимость  $\nabla T_3$  от  $d_m$  является нелинейной (рис. 2).

Были также исследованы зависимости  $\nabla T$  от толщины подложки источника и электродов. С ростом толщины подложки  $\nabla T$  может увеличиваться или уменьшаться. Это связано с некоторым пониже-



**Рис. 2.** Зависимость градиента температуры от толщины раствора-расплава.

ем (повышением) температуры на фронте кристаллизации вследствие удаления от него поверхности раздела 1–2, на которой происходит выделение тепла Пельтье (поглощение тепла Пельтье). Аналогично, если на поверхности раздела 4–5 происходит выделение (поглощение) тепла Пельтье, то удаление этой поверхности раздела или увеличение  $d_s$  уменьшают (увеличивают)  $\nabla T$ . Точно так же объясняется зависимость  $\nabla T$  от  $d_{e1}$  и  $d_{e5}$ .

## Список литературы

- [1] Демин В.Н., Буждан Я.М., Кузнецов Ф.А. // Электроперенос и его приложения. Новосибирск, 1982. С. 75–79.
- [2] Сафаралиев Г.К., Билалов Б.А., Эфендиев А.З. // ЖТФ. 1984. Т. 54. В. 10. С. 2016–2020.