材料、结构及工艺

DOI：10.16818/j.issn1001－5868.2022022501

无偏角4H-SiC同质外延温场分布系数的仿真及实验研究

汪久龙[1,2]，赵思齐[1,2]，李云凯[1,2]，闫果果[1,3]，申占伟[1,3]，赵万顺[1]，
王　雷[1]，关　敏[1,2,3]，刘兴昉[1,2,3]*，孙国胜[1,2,3]，曾一平[1,2,3]

（1. 中国科学院半导体研究所 中国科学院半导体材料科学重点实验室，北京 100083；
2. 中国科学院大学 材料科学与光电技术学院，北京 100049；
3. 低维半导体材料与器件北京市重点实验室，北京 100083）

摘　要： 采用化学气相沉积(CVD)方法进行碳化硅(4H-SiC)同质外延生长，生长过程中温场分布是决定外延层质量的关键因素。对CVD系统的温场分布进行了仿真研究，并采用无偏角4H-SiC衬底进行同质外延生长实验验证。结果表明，无偏角4H-SiC外延层中的3C-SiC多型体夹杂与生长室温场分布密切相关。实验数据验证了仿真结果，两者的温度分布具有高度一致性，这也证明了仿真数据的有效性。

关键词： 碳化硅；无偏角衬底；同质外延；温度场

中图分类号： TN304　**文章编号：** 1001－5868(2022)05－0909－05

Simulation and Experimental Study on Coefficient of Temperature Field Distribution for On-Axis 4H-SiC Homoepitaxial Growth

WANG Jiulong[1,2], ZHAO Siqi[1,2], LI Yunkai[1,2], YAN Guoguo[1,3], SHEN Zhanwei[1,3], ZHAO Wanshun[1], WANG Lei[1], GUAN Min[1,2,3], LIU Xingfang[1,2,3], SUN Guosheng[1,2,3], ZENG Yiping[1,2,3]

(1. Key Lab. of Semiconductor Materials Science, Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, CHN; 2. College of Materials Science and Opto-Electronic Technology, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, CHN; 3. Beijing Key Lab. of Low Dimensional Semiconductor Materials and Devices, Beijing 100083, CHN)

Abstract: In the homoepitaxial growth of silicon carbide (4H-SiC) by chemical vapor deposition (CVD), the distribution of its temperature field is crucial for the quality of the epitaxial layer. The CVD temperature field was simulated and experimentally verified using on-axis 4H-SiC homogeneous epitaxy. It is found that the 3C-SiC crystal polytype inclusions in the on-axis 4H-SiC epitaxial layers are closely related to the temperature field distribution in the growth chamber. The results validate the simulation with a high degree of consistency in above two's temperature distributions, which also verify the accuracy of the simulation data.

Key words: SiC; on-axis substrate; homoepitaxial; temperature field

0　引言

碳化硅(SiC)作为当下最热门的第三代宽禁带半导体材料之一，具有击穿场强大、电子饱和漂移速率高以及导热性好等优点[1-5]，在制作大功率耐高温电子器件、高速存储器以及光电探测器等方面独具优势[6-7]。同时，碳化硅材料具有高硬度与高的化学稳定性，可以在高温、高频、高辐射等恶劣条件下稳定工作，成为车规电子器件、航空航天领域、煤山矿

收稿日期：2022－02－25.
基金项目：广东省重点研发计划项目(2021B0101300005)；国家自然科学基金项目(12175236,62104222,61804149).
* **通信作者：**刘兴昉　**E-mail:** liuxf@mail.semi.ac.cn

场等高挑战性工作状况下的最佳选择。随着近年来的技术进步与研究深入，碳化硅功率器件在转换效率、耐压水平等方面已经超过传统的硅(Si)功率器件。使用碳化硅功率器件替代传统功率器件，可以有效降低能源输送损失，缩减用电设备体积，有力推动我国“碳中和”目标、节能减排的实现。但目前国内在研究与发展这一极具价值的领域上，尚处于落后国际先进水平、亟待追赶的阶段。

化学气相沉积(CVD)技术是碳化硅功率器件制备的关键步骤，外延材料质量直接决定了功率器件的耐压水平，并影响器件成品率和使用寿命。因此，深入研究 CVD 系统，提高外延生长系统工作稳定性与可预见性，对发展碳化硅功率器件具有重要意义[8-9]。

有限元仿真作为一种快速高效的模拟方法，广泛应用于碳化硅 CVD 外延生长仿真研究。通过合理地设置边界条件，获得具有价值的数据，辅助调整外延生长的环境。但是，其准确性与有效性一直受到质疑，亟需科学的验证实验[10-12]。

本文通过对自主研发的低压水平热壁 CVD 系统进行科学仿真，获得了关键的指导性数据。利用此 CVD 系统在无偏角 4H-SiC 衬底上进行同质外延生长，生长过程中的温度生长系数验证了仿真数据的有效性，证明了仿真对于 CVD 系统搭建与使用的指导意义。

1 实验

本实验使用自主研发的低压水平热壁 CVD 系统(LPCVD)，该系统可进行单片 15.24 cm(6 inch)或 4 inch 及多片 2 inch 晶片外延。图 1 为生长腔室内部结构模型，主要分为进气区、导气区、混合区、反应区以及尾气区。

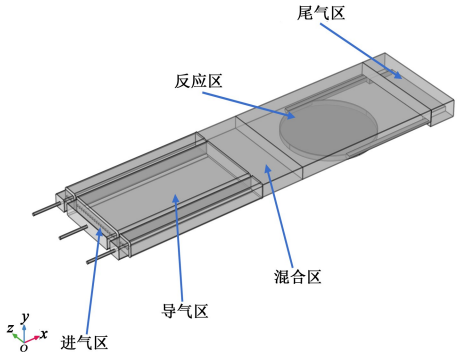


图 1 自主研发的 LPCVD 的生长腔室模型

使用 COMSOL Multiphysics 对生长腔室内部的气流场、温度场分布进行仿真研究。模型依照设备内部结构进行 1∶1 建模，使用“湍流”及“固体和流体传热”模块。为了减少计算量，边界条件使用固定流量和固定热源。

其中，气流场的仿真模型，采用流体力学微分形式的基本方程组：连续性方程、纳斯-斯托克斯方程以及能量守恒方程，即：

质量守恒：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho u)=0 \tag{1}$$

动量守恒：

$$\rho\frac{\partial u}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho u u)=-\nabla p+\nabla\cdot\tau+F \tag{2}$$

能量守恒：

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\rho\left(e+\frac{1}{2}u^2\right)\right]+\nabla\cdot\left[\rho u\left(e+\frac{1}{2}u^2\right)\right]=\nabla\cdot(k\nabla T)+\nabla\cdot(-pu+\tau\cdot u)+u\cdot F+Q \tag{3}$$

式中，ρ 为气体密度，t 为时间，u 为气体速度场，p 为气体压强，F 为系统所受外力，k 为玻尔兹曼常数，e 为气体内能，Q 为外部能量。

对于温度场，使用热平衡方程：

$$\rho C_p u\cdot\nabla T+\nabla\cdot q=Q \tag{4}$$

$$q=-k\nabla T \tag{5}$$

式中，ρ 为气体密度，C_p 为恒压热容，u 为速度场，T 为温度，q 为热通量，k 为玻尔兹曼常数，Q 为热源。

外延实验使用商业化的无偏角 Si 面、n 型 10.16 cm(4 inch) 4H-SiC 衬底。外延生长中使用氢气(H_2)作为载气、硅烷(SiH_4)作为硅源、乙烯(C_2H_4)作为碳源。生长前进行 H_2 原位刻蚀，生长温度变化范围为 1 550～1 650 ℃。除生长温度外，其他参数保持不变，H_2 流量为 50 slm，SiH_4 流量为 40 cm^3/min，C_2H_4 流量为 20 cm^3/min，C/Si 恒定为 1.0。生长腔室压强为 5.333 kPa，生长时间保持在 30 min。

2 结果分析与讨论

2.1 晶圆区域温度场仿真结果

对有限元模型进行优化后，加上合适的边界条件进行仿真，生长温度为 1 600 ℃、H_2 流量为 50 slm。得到的稳态结果如图 2,3 所示。

图 2 为生长腔室内部的流场分布，在腔室内部，由于进气区与导气区中的气流湍急、腔室构造复杂而

产生了一定程度的紊流甚至回流。当气流进入混合区直至反应区后，气体变得平稳并在前端达到平衡。

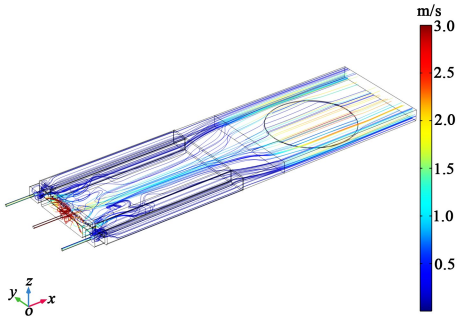
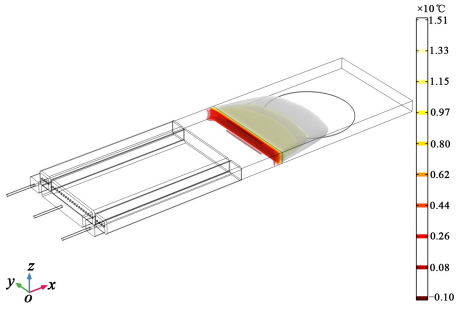
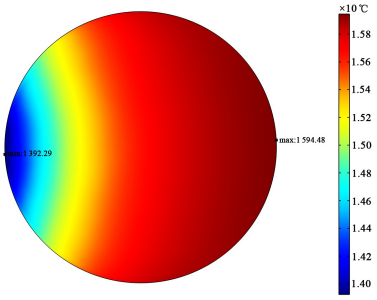


图 2　生长温度为 1 600 ℃、H_2 流量为 50 slm 下的生长腔室内部的流场分布图

图 3(a)展示了腔室内温度场的等温面分布，图 3(b)展示了晶圆所在的区域的静态温度分布。在温度场中，由于发热区域位于反应区，因此在 x 轴方向，温度由低变高。在晶圆所在区域，表面温度最低点为 1 392.29 ℃，随着气流被不断加热，温度快速上升达到接近生长温度，最高值达到了 1 594.48 ℃，这是“Cold Finger”的作用。如图 3(a)中所示，流速较快的中心气流未能被充分加热便进入外延生长区，使得本应达到生长温度的高温气体中出现了由冷气体端延伸过来的长而窄的部分低温区域，导致晶圆表面部分区域温度未达到设定生长温度，其形如手指，因此称为“Cold Finger”[13]。



(a)　等温面三维图



(b)　晶圆区域温度场静态分布图及其最大、最小值

图 3　生长温度为 1 600 ℃、H_2 流量为 50 slm 下的两种图形

在实际外延生长过程中，由于 SiC 材料良好的导热性以及晶圆的旋转使得衬底的温度均匀化，衬底表面温度没有图 3(b)呈现出的那样差异巨大。通过数据处理，将同一圆心距上的温度点采集并均匀化处理，得到如图 4 所示的晶圆表面仿真温度及其拟合曲线与位置的关系曲线。由于仿真精度问题，温度出现了一定的周期性波动，但总体表现出由圆心到边缘逐渐降低的趋势，这一点在进行二次函数曲线拟合后更为明显。

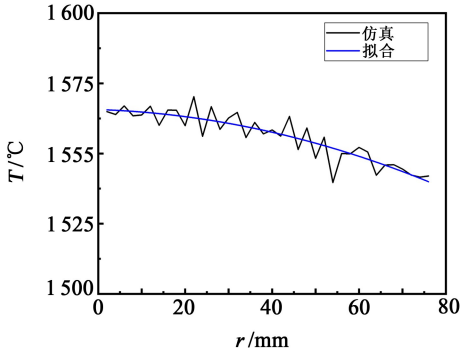


图 4　均匀化后的晶圆表面仿真温度及其拟合曲线与位置的关系曲线，其中黑色线为处理后表面温度场的仿真温度，蓝色线为对其拟合得到的二次曲线

改变生长温度，对模型进行扫描仿真，得到了四组不同的晶圆区域温度，进行模拟处理，得到如图 5 所示的一组曲线，其关键数据见表 1。结果表明，在相同的流量下，晶圆区域温度普遍相较生长温度低约 50 ℃，圆心与边缘的温差也保持在 25 ℃左右。

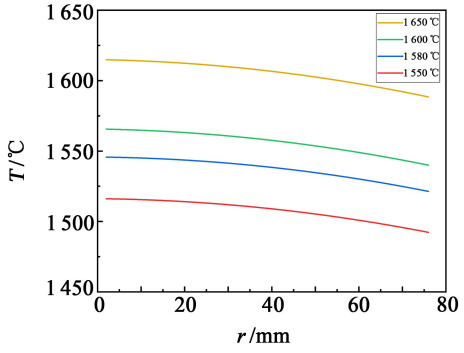


图 5　晶圆区域仿真温度拟合曲线

表 1　不同生长温度的晶圆区域的仿真温度 单位：℃

生长温度	平均温度	最高温度	最低温度	温度差
1 550	1 507.6	1 516.1	1 492.3	23.8
1 580	1 537.0	1 545.7	1 521.4	24.3
1 600	1 556.2	1 565.5	1 539.9	25.6
1 650	1 605.2	1 614.8	1 588.4	26.4

2.2　无偏角衬底外延实验结果

为了验证仿真结果的准确性以及外延效果，我

们进行了无偏角的 4H-SiC 同质外延实验，实验参数与仿真参数完全相同。不同于偏角 4H-SiC 同质外延生长的台阶流生长模式，无偏角外延生长主要受到二维成核岛状生长控制，因而极容易产生 3C-SiC 夹杂缺陷[14]，缺陷密度对温度的变化极其敏感[15]，这有利于我们使用这一特性对晶圆区域的小温差（～25 ℃）进行检测。

如图 6 所示，不同生长温度下，外延层表面形貌发生了极大的变化。相同的是，由于主要发生的是二维岛状成核生长，外延层表面出现了宽度达到约数十至数百微米而长度横跨整个晶圆的巨型台阶。当生长温度从 1 550 ℃升到 1 650 ℃，外延层表面的巨型台阶的宽度发生了明显变化，从数十微米宽扩展到数百微米宽，这是由于更高的温度使原子在外延表面上的迁移速率加快。这一趋势同样出现在同一晶圆上，从边缘到圆心，巨型台阶宽度越来越大，只是这一变化趋势不如片间变化明显。这显然与片间温差（30～50 ℃）大于片内温差（～25 ℃）有关。

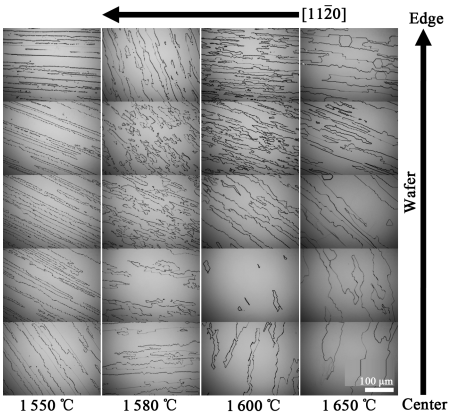


图 6 外延表面 Normaski 形貌

生长速率随温度变化如图 7 所示，随着生长温度的提高，生长速率迅速下降，出现了反的温度生长系数。在通常的 4°偏角 4H-SiC 同质外延中，生长速率应随生长温度升高而升高[16]。这是由于，在硅碳源流量恒定的情况下，无偏角外延中，较低的生长温度下，更易产生 3C-SiC 晶型的岛状生长，其生长速率远高于 4H-SiC 晶型的台阶流生长速率[17]，因此生长速率主要受到外延层中的 3C-SiC 晶型的比例的控制。在无偏角外延生长中，更高的生长速率意味着 3C-SiC 晶型的比例更高。

通过研究外延层中不同部位的 Raman 峰，即可得出 3C-SiC 晶型的比例。因为在 Raman 谱线中，位于 798 cm^{-1} 的峰为 3C-SiC 晶型的相对最强峰，但在 4H-SiC 晶型中，位于 776 cm^{-1} 处的峰为相对最强峰，而位于 798 cm^{-1} 的峰的相对强度很低（<3%）[18]，所以拉曼谱图中位于 798 cm^{-1} 处的峰的相对强度便代表了 3C-SiC 的比例。

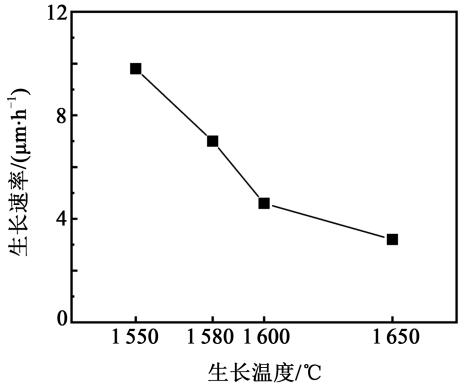


图 7 生长温度与生长速率关系曲线

在图 8 中，通过将不同外延层不同位置得到的 Raman 谱图中 798 cm^{-1} 代表的相对峰强提取出来，与对应位置，即不同生长温度的外延片，如图 5 中不同位置获得的仿真温度结合起来，发现其趋势与图 7 中的生长速率曲线高度相似。即在使用不同点上获得的 3C-SiC 晶型的比例，与仿真获得的假定的温度而获得的 3C-SiC 的比例，通过生长速率测试数据，达到了高度一致。因此，可推断出仿真获得的片间与片内温差数据是高度可信的。

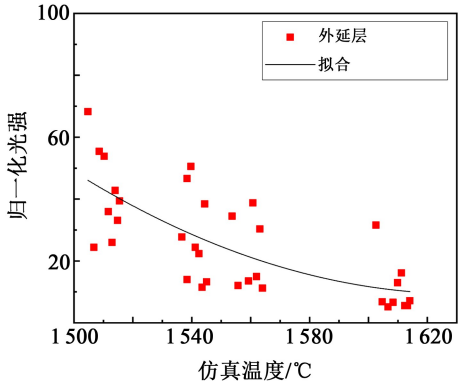


图 8 外延层不同圆心距测量得到的 Raman 谱图中，798 cm^{-1} 处的相对强度与仿真温度的关系

3 结论

通过对自主研发水平热壁 CVD 设备进行有限元仿真，获得了详实的气流场与温度场数据后，发现了“Cold Finger”效应对晶圆区域的温度场的局部降温影响。对数据进一步处理后发现，片上平均温度相较设定生长温度降低约 50 ℃，片内温差达到了

约 25 ℃，这一现象出现在了所有设定的生长温度的仿真结果中。利用无偏角 4H-SiC 外延层中 3C-SiC 晶型对生长温度敏感的特点，改变生长温度进行无偏角外延生长实验，对仿真结果进行验证。最终得到的反-温度生长速率曲线，与 3C-SiC 晶型在不同温度点的晶型比例曲线高度吻合，证明了仿真数据的高可置信。本文验证了仿真模拟对外延实验的辅助与改进意义，有利于降低成本并提高实验效率。

参考文献：

[1] Matsunami H. Fundamental research on semiconductor SiC and its applications to power electronics[J]. Proc. of the Japan Academy Series B-Physical and Biological Sciences, 2020, 96(7): 235-254.

[2] Fraga M, Pessoa R. Progresses in synthesis and application of SiC films: From CVD to ALD and from MEMS to NEMS[J]. Micromachines (Basel), 2020, 11(9): 799.

[3] Wellmann P J. Review of SiC crystal growth technology[J]. Semiconductor Science and Technology, 2018, 33(10): 1-21.

[4] Tsuchida H, Kamata I, Miyazawa T, et al. Recent advances in 4H-SiC epitaxy for high-voltage power devices [J]. Materials Science in Semiconductor Processing, 2018, 78: 2-12.

[5] Koubaa M, Roselló-Soto E, ŠicŽlabur J, et al. Current and new insights in the sustainable and green recovery of nutritionally valuable compounds from stevia rebaudiana bertoni[J]. J. of Agricultural and Food Chemistry, 2015, 63(31): 6835-6846.

[6] Shen Z W, Zhang F, Yan G G, et al. High-frequency switching properties and low oxide electric field and energy loss in a reverse-channel 4H-SiC UMOSFET[J]. IEEE Trans. on Electron Devices, 2020, 67(10): 4046-4053.

[7] Kimoto T, Watanabe H. Defect engineering in SiC technology for high-voltage power devices[J]. Appl. Phys. Express, Bristol: 2020, 13(12): 120101.

[8] Fujibayashi H, Ito M, Ito H, et al. Development of a 150 mm 4H-SiC epitaxial reactor with high-speed wafer rotation[J]. Appl. Phys. Express, 2013, 7(1): 015502.

[9] Hu J C, Jia R X, Xin B, et al. Effect of low pressure on surface roughness and morphological defects of 4H-SiC epitaxial layers[J]. Materials, 2016, 9(9): E743.

[10] Guan K, Gao Y, Zeng Q F, et al. Numerical modeling of SiC by low-pressure chemical vapor deposition from methyltrichlorosilane[J]. Chinese J. of Chemical Engin., 2020, 28(6): 1733-1743.

[11] Sukkaew P, Danielsson O, Kordina O, et al. Ab initio study of growth mechanism of 4H-SiC: Absorption and surface reaction of C_2H_2, C_2H_4, CH_4, and CH_3[J]. J. of Physical Chemistry C, 2017, 121(2): 1249-1256.

[12] Ito M, Fujibayashi H, Ito H, et al. Simulation study of high-speed wafer rotation effects in a vertical reactor for 4H-SiC epitaxial growth on 150 mm substrates[J]. Materials Science Forum, 2014, 778-780: 171-174.

[13] Leone S, Beyer F C, Henry A, et al. Chloride-based SiC epitaxial growth toward low temperature bulk growth[J]. Crystal Growth & Design, 2010, 10(8): 3743-3751.

[14] Neudeck P G, Trunek A J, Spry D J, et al. CVD growth of 3C-SiC on 4H/6H mesas[J]. Chemical Vapor Deposition, 2006, 12(8-9): 531-540.

[15] Si W, Dudley M, Shuangkong H, et al. Investigations of 3C-SiC inclusions in 4H-SiC epilayers on 4H-SiC single crystal substrates [J]. J. of Electronic Materials, 1997, 26(3): 151-159.

[16] La Via F, Camarda M, La Magna A. Mechanisms of growth and defect properties of epitaxial SiC[J]. Appl. Phys. Rev., 2014, 1(3): 031301.1-36.

[17] Seki K, Harada S, Ujihara T. Bulk 3C-SiC crystal by top seeded solution growth method [J]. Materials Science Forum, 2013, 740/742: 311-314.

[18] Nakashima S, Harima H. Raman investigation of SiC polytypes[J]. Physica Status Solidi A: Appl. Research, 1997, 162(1): 39-64.

作者简介：

汪久龙(1997—)，男，江苏省扬州市人，硕士研究生，主要从事大尺寸 SiC 同质外延生长研究；

刘兴昉(1975—)，男，江西省万安市人，副研究员，硕士生导师，主要从事 SiC 半导体、石墨烯及相关设备研究开发。