

4H-SiC同质外延生长 Grove模型研究*

贾仁需^{1)†} 刘思成¹⁾ 许翰迪¹⁾ 陈峥涛¹⁾ 汤晓燕¹⁾ 杨霏²⁾ 钮应喜²⁾

1) (西安电子科技大学微电子学院, 宽禁带半导体技术国防重点学科实验室, 西安 710071)

2) (国网智能电网研究院, 北京 100192)

(2013年11月26日收到; 2013年12月14日收到修改稿)

本文通过对4H-SiC同质外延化学反应和生长条件的分析,建立了4H-SiC同质外延生长的Grove模型,并结合实验结果进行了分析和验证.通过理论分析和实验验证,得到了外延中氢气载气流量和生长温度对4H-SiC同质外延生长速率的影响.研究表明:外延生长速率在衬底直径上为碗型分布,中心的生长速率略低于边缘的生长速率;随着载气流量的增大,生长速率由输运控制转变为反应速率控制,生长速率先增大而后逐渐降低;载气流量的增加,会使高温区会发生漂移,生长速率的理论值和实验出现一定的偏移;随着外延生长温度的升高,化学反应速率和气相转移系数都会增大,提高了外延速率;温度对外延反应速率的影响远大于对生长质量运输的影响,当温度过分升高后,外延生长会进入质量控制区;但过高的生长温度导致源气体在生长区边缘发生反应,生成固体粒子,使实际参与外延生长的粒子数减少,降低了生长速率,且固体粒子会有一定的概率落在外延层上,严重影响外延层的质量.通过调节氢气流量,衬底旋转速度和生长温度,可以有效的控制外延的生长速度和厚度的均匀性.

关键词: 4H-SiC同质外延, Grove模型, 生长速率

PACS: 71.20.Nr, 68.75.+x, 81.15.Aa

DOI: 10.7498/aps.63.037102

1 引言

SiC作为半导体材料具有许多优良的性能,如宽禁带、高热导率、高饱和漂移速率等,是制备高温、高频、高功率的电子器件的理想材料之一^[1,2].SiC功率器件具有高耐压、大电流、低导通电阻的特性,可以用于制造低功耗电路,减少能源的损耗.如果用SiC器件替代现有的Si器件,可以将电路的功耗降低70%^[3].如果SiC器件广泛用于电力传输,高铁,电动汽车等领域,可以有效的降低能耗,节省能源.SiC功率器件一般具有高击穿电压和高导通电流,比如肖特基二极管、MOSFET反向击穿电压高于1.2 kV,正向导通电流高于20 A^[4].在电力传输领域,甚至要求SiC器件功率器件反向击穿电压高于20 kV.这就对SiC外延材料提出了更高的要求,外延材料掺杂浓度,厚度和缺陷密度直接决

定了SiC功率器件的性能和成品率.SiC高的反向击穿电压必须依赖SiC高质量的厚外延,而外延过程中提高生长速率和延长生长时间都会导致外延层中缺陷密度的增加,使器件反向漏电流增加^[5-7]和少数载流子寿命减少^[8,9].SiC外延生长过程中涉及复杂的物理和化学过程,涉及化学反应,载气流量流速,温度,压力等一系列参数,如果仅通过实验方法对外延过程中的参数进行控制和优化,费事费力.到现在为止,完全描述外延过程的数学模型相当困难,其中Grove提出基于反应物的运输和化学反应的模型,统称为Grove模型.

本文主要通过SiC外延生长中反应物的运输和化学反应,建立了SiC外延生长的Grove模型,研究外延中的各项参数对外延速率的影响机理和趋势,为提高外延生长速率、提高厚度均匀性提供一定的理论指导.

* 国家自然科学基金(批准号: 61006008, 61274079)和国家电网公司科技项目(批准号: SGRI-WD-71-13-004)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: rxjia@mail.xidian.edu.cn

2 4H-SiC 同质外延模型的建立

本反应以硅烷 (SiH₄) 和丙烷 (C₃H₈) 为反应气体, 氢气 (H₂) 为载气, 发生反应生成 SiC. 模型所描述的结果为 EPIGROSS 公司的水平热壁式 CVD VP508GFR 外延炉生长腔.

反应总方程式为 [10,11]



建模时合理的假设如下:

- 1) 通过生长腔的气体密度为常数;
- 2) 气体在生长腔内完全反应;
- 3) 所有气体均视为理想气体, 符合理想气体状态方程;
- 4) 忽略化学反应产生的热量, 生长腔内温度保持恒定.

外延生长分为扩散、吸附/解吸、化学反应等三个主要过程, 其反应速率与三者速率有关, 且受最慢者的控制. 对于常/减压外延来说, 吸附/解吸相对于扩散与化学反应速率要快得多, 因而生长速率将主要取决于扩散与化学过程 [12-14].

生长的化学反应见反应式 (1). 为了外延厚度的均匀性, 衬底在生长过程中自旋, 如图 1 所示. 以托盘左侧边界为 y 轴, 边界中点为原点, 过衬底中心连接原点的直线为 x 轴建立坐标系. 其中红线部分为衬底, ω 代表衬底旋转角速度.

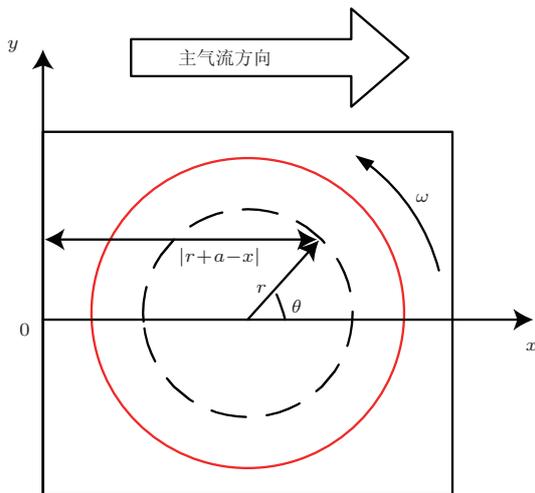


图 1 4H-SiC 外延生长反应室模型结构示意图

衬底表面任意一点气体流速 u 为

$$u = \left[(\omega |r + a - x| \sin \theta + A)^2 \right. \\ \left. + (\omega |r + a - x| \cos \theta)^2 \right]^{1/2}, \quad (2)$$

其中 A 为主气流速, 根据理想气体状态方程可得

$$A = \frac{p_1 V_1}{p_2 S}, \quad (3)$$

其中 p_1 为标准大气压, p_2 为生长气压, V_1 为载气流量 (L/min), S 为生长腔横截面积.

衬底上任意一点 x 距基座头部的距离为

$$L = r + a + |r + a - x| \cos q, \quad (4)$$

其气相转移系数为

$$h_G = D_{G0} \left(\frac{T}{T_0} \right)^d \left(\frac{ru}{mL} \right)^{1/2}, \quad (5)$$

μ 为气体黏滞系数, u 为气体流速, ρ 为气体密度, T_0 为以热力学温度表示的室温, T 为以热力学温度表示的实验温度, D_{G0} 为温下的气体扩散系数, 通常在 0.1—1 cm²/s, d 为常数, 其值为 1.75—2.

由于衬底在生长过程中不断的旋转, 这就使得衬底上除圆心外的任意一点所处的生长环境都是随着衬底的旋转而周期性变化的. 因此我们需要确定衬底上一点的瞬时速率后对其进行积分, 以确定该点旋转一圈后累记生长厚度, 最后在转化为每小时的生长厚度, 即每小时的生长速率. 由此, 根据 Grove 模型, 并考虑衬底在生长过程中不断旋转, 生长速率 v 为

$$v = \frac{216000}{2p} \int_0^{2p} \frac{k_S h_G}{k_S + h_G} \frac{N_T}{N_{\text{SiC}}} Y dq, \quad (6)$$

其中

$$k_S = k_{S0} \exp(-E_\theta/kT), \quad (7)$$

其中 k_S 如 (7) 式所示为表面化学反应生长速率, h_G 为气相质量转移系数, N_T 为单位体积混合气体的分子数, N_{SiC} 为碳化硅晶体的分子密度, Y 为反应剂浓度百分比, E_θ 反应物的活化能.

3 结果分析

3.1 生长速率延载气气流方向的分布

由 (2) 式可知, 从衬底边缘到衬底圆心相对速度 u 逐渐减小. 由 (5), (6) 式可知, 相对速度减小会导致生长速率的逐渐降低. 而且, 由于在生长过程中托盘是不断旋转的, 外延层上以衬底中心为圆心的圆周上各点有着完全相同的周期性变化的生长条件, 因此外延层上以衬底中心为圆心的圆周上的

外延速率和外延层厚度是相同的, 所以外延层的厚度分布为边缘厚、中心薄的“碗形”, 与实验结果基本符合, 如图2所示. 其中 r 代表衬底上点到衬底圆心的距离, d 代表外延层厚度, 虚线部分为理论数据, 实线部分为实际测得的厚度分布. 但在中心与边缘之间的一部分区域中, 实际厚度远高于理论值. 我们认为, 在模型中假设温度场是均匀的, 而实际中高温区受主气流的影响会向气流下游方向偏移, 使该位置生长速率有一定的增加. 而这一区域的存在也可以标定生长腔内最高温度点所处的位置, 综合考虑主气流对高温点和厚度分布的影响, 提高外延层的厚度均匀性.

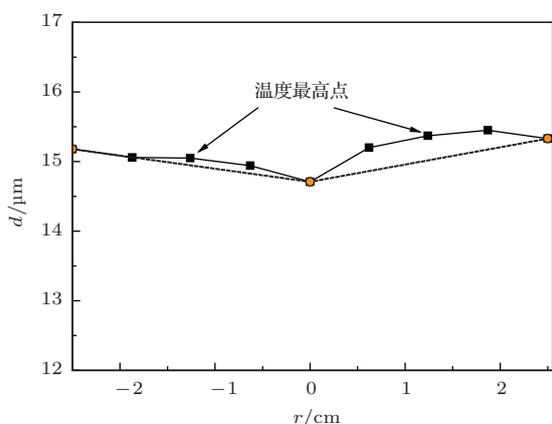


图2 外延层上的厚度分布图

3.2 载气流量对外延速率及厚度均匀性的影响

根据(2), (3)式随着载气流量的增加相对速度 u 不断增大, 进而提高外延速率. 当 u 增大到使气相转移系数 $h_G \gg k_S$ 时, (6)式可化简为

$$v = 3600 \frac{\omega}{2\pi} \int_0^{2\pi} k_S \frac{N_T}{N_{SiC}} Y d\theta. \quad (8)$$

此时外延进入反应控制区, 如(8)式所示, 此时外延速率与相对速度 u 无关, 继续提高载气流量也不会增大外延速率. 而且增大载气流量不仅影响相对速度 u , 同时会降低反应剂浓度 Y , 根据(8)式, 此时如果继续增大载气流量外延速率反而会逐渐减小. 在实验中, 载气流量从40 L/min逐步提高到120 L/min. 在此过程中, 当载气流量超过60 L/min时, 外延速率便逐渐降低, 结果如图3所示.

同时, 在温度不变的情况下, 影响衬底上厚度分布的因素就只有气相转移系数 h_G , 因此我们可

以认为 h_G 的均匀性就在一定程度上反映了外延层厚度的均匀性. 根据(5)式, 主气流速 A 和衬底旋转速度 ω 将直接影响外延均匀性. 理论计算结果如图4所示. 图4(a)表明随主气流速的增加, 外延层的厚度不均匀性不断恶化. 实验结果表明, 当主气流从75 L/min逐步提高到85 L/min时, 外延层的厚度不均匀性逐步由2.7%恶化到3.1%. 计算的出的厚度均匀性好, 这是因为有如图2所示的最高温度点的存在, 这一区域大大改善了外延层的厚度均

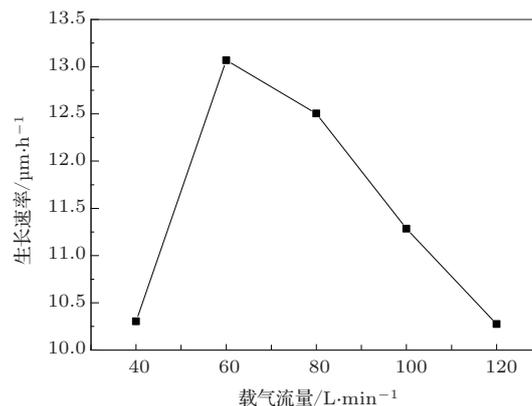


图3 外延速率随载气流量变化图

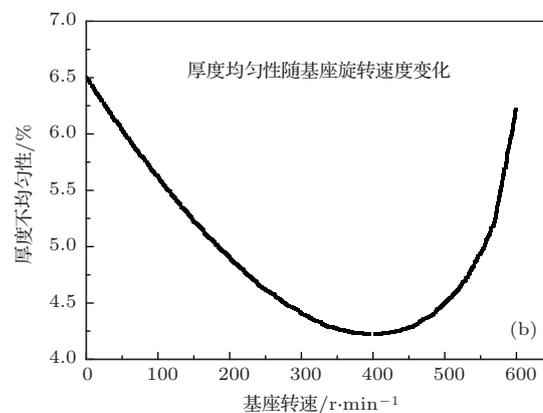
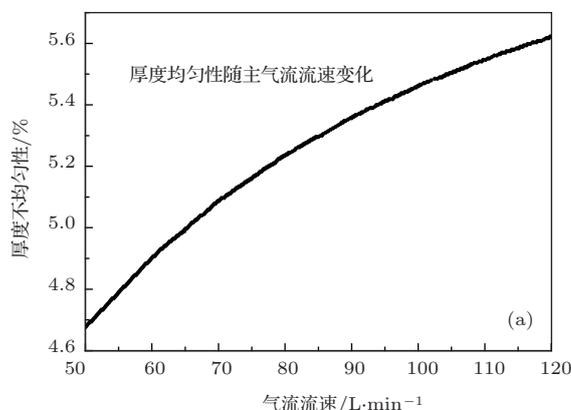


图4 (a) 主气流速对外延均匀性的影响; (b) 衬底转速 ω 对外延均匀性的影响

匀性. 图 4(b) 显示, 旋转速度小于 400 r/min 时, 随着衬底转速的增大, 均匀性则不断提高. 实验结果比理论事实上, 衬底的旋转速度是远不可能达到 400 r/min 的. 图中, 大于 400 r/min 的部分表明, 虽然采用气悬浮技术可以提高外延均匀性, 但是当衬底转速相对主气流速过大时, 外延层的均匀性也会逐渐变差.

3.3 温度对外延速率的影响

从 (5), (6) 式可以看出, 外延速率是温度的增函数. 随着温度的升高, 化学反应速率和气相转移系数都会增大, 进而提高外延速率. 但是, 温度对 K_s 的影响较 h_G 大得多, 因此当温度过分升高后会使得 k_s 远远大于 h_G 使生长进入质量控制区. 此时 (6) 式可简化为

$$v = 3600 \frac{\omega}{2\pi} \int_0^{2\pi} h_G \frac{N_T}{N_{SiC}} Y d\theta. \quad (9)$$

从 (5) 式和 (9) 式可以看出此时如果继续提高温度, 外延速率将不会有明显提高. 这一点已有实验予以证明^[9]. 不过, 在实验中, 当我们固定其他条件不变, 将温度从 1580 °C 提高到 1650 °C 时, 生长速率却从 10.0214 $\mu\text{m}/\text{h}$ 降低到了 9.5262 $\mu\text{m}/\text{h}$. 排除实验误差等的影响, 这是由于过高的温度导致化学原料在空气中反应产生固体粒子 (产物不一定为 SiC), 导致用于外延生长的粒子数减少, 从而降低了反应速率. 气相反应产生的固体粒子有一定的概率落在外延层上, 会严重影响外延层质量, 因此在外延过程中应适当控制温度避免反应处于气相成核区.

4 结 论

本文通过对 4H-SiC 同质外延化学反应和生长条件的分析, 建立了 4H-SiC 同质外延生长的 Grove 模型. 通过定量计算得出外延层厚度在衬底直径上为碗型分布, 中心的生长速率略低于边缘的生长速率, 以衬底中心为圆心的圆周上厚度相同. 随着载气氢气流量的增大, 生长速率由输运控制转变为反应速率控制, 生长速率先增大而后逐渐降低; 且

载气流量的增加, 会使高温区会发生漂移, 生长速率的理论值和实验出现一定的偏移; 随着外延生长温度的升高, 化学反应速率和气相转移系数都会增大, 提高了外延速率; 温度对外延反应速率的影响远大于对生长质量输运的影响, 当温度过分升高后, 外延生长进入质量控制区; 但过高的生长温度导致源气体在生长区边缘发生反应, 生成固体粒子, 导致实际参与外延生长的粒子数减少, 降低了生长速率, 且固体粒子会有一定的概率落在外延层上, 严重影响外延层的质量. 通过调节氢气流量, 衬底旋转速度和生长温度, 可以有效的控制外延的生长速度和厚度的均匀性.

参考文献

- [1] Jawedul H, Henry A, Bergman J P, Janzen E 2006 *Thin solid film* **515** 460
- [2] Jia R X, Zhang Y M, Zhang Y M 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 6649 (in Chinese) [贾仁需, 张义门, 张玉明 2008 物理学报 **57** 6649]
- [3] <http://www.mitsubishi.com/news/2012/0523.html>
- [4] www.cree.com
- [5] Hirokazu F, Hideki N, Masaki K 2012 *Appl. Phys. Lett.* **100** 242102
- [6] Jia R X, Zhang Y M, Zhang Y M 2012 *Journal Wuhan University of Technology Materials Science Edition* **27** 415
- [7] Jia R X, Zhang Y M, Zhang Y M 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 4456 (in Chinese) [贾仁需, 张义门, 张玉明 2008 物理学报 **57** 4456]
- [8] Bin C, Matsuhata H, Sekiguchi T, Kinoshita A, Ichinoseki K, Okumura H 2012 *Appl. Phys. Lett.* **100** 132108
- [9] Bergman J P, Lendenmann H, Nilsson P A, Lindefeit U, Skytt P 2001 *Mater. Sci. Forum* **299** 353
- [10] Lofgren P M, Ji W, Hallin C Gu C Y 2000 *Electro. Soc* **147** 164
- [11] Veneroni A, Omarini F Moscatelli D, Maurizio M, Stefano L, Marco M, Giuseppe P, Giuseppe A 2005 *J. Cryst. Growth* **275** 295
- [12] Meziere J, Ucar M, Blanquet E, Pons M, Ferret P, Cioccio L D 2004 *J. Cryst. Growth* **267** 436
- [13] Young J L, Doo J Ch, Sung S K, Hong L L, Hae D K 2004 *Surface and Coatings Technology* **177** 415
- [14] Govindhan D, Michael D, Yi C, Balaji R, Wu B, Zhang H 2006 *J. Cryst. Growth* **287** 344

Study on Grove model of the 4H-SiC homoepitaxial growth*

Jia Ren-Xu^{1)†} Liu Si-Cheng¹⁾ Xu Han-Di¹⁾ Chen Zheng-Tao¹⁾ Tang Xiao-Yan¹⁾
Yang Fei²⁾ Niu Ying-Xi²⁾

1) (School of Microelectronics, Xidian University, Xi'an 710071, China)

2) (State grid smart grid research institute, Beijing 100192, China)

(Received 26 November 2013; revised manuscript received 14 December 2013)

Abstract

In this paper, A Grove model on the homoepitaxial growth of 4H-SiC is presented, based on the structure and growth conditions of CVD system. According to the model analysis, the growth rate of 4H-SiC is quiet influenced by carrier gas flow rate and temperature, which is verified by experiments. Growth rate along the substrate has a bowl-shaped distribution, and the growth rate on the center is slightly lower than on the edge. As the carrier gas flow rate increases, the growth rate controlled by the transport changes into the reaction rate control, the growth rate first increases and then decreases. The position of highest temperature in the actor will be drifted with the carrier gas flow increasing. The reaction rate and the mass transport coefficient increase with the rise of growth temperature, which can cause the increase of growth rate. But the effect of temperature on reaction rate is much greater than on the mass transport. When the temperature rises excessively, the epitaxial growth will be determined by the mass transport. But the high reaction temperature results in forming some particles at the edge of reactor, which can reduce the growth rate, and the particles will have a chance to fall on the epitaxial layer, thus seriously affecting the quality of the epitaxial layer. All the above shows that the growth rate and thickness uniformity can effectively controlled by adjusting the flow rate of hydrogen, the rotational speed of the substrate and the growth temperature.

Keywords: the homoepitaxial growth of 4H-SiC, modified Grove model, growth rate

PACS: 71.20.Nr, 68.75.+x, 81.15.Aa

DOI: 10.7498/aps.63.037102

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61006008, 61274079), and the Science Project of State Grid (Grant No. SGRI-WD-71-13-004).

† Corresponding author. E-mail: rxjia@mail.xidian.edu.cn