

大直径 6H-SiC 晶体 PVT 法生长感应加热系统 有限元分析*

张群社† 陈治明

(西安理工大学自动化与信息工程学院, 西安 710048)

摘要: 采用有限元分析法系统地研究了大尺寸 6H-SiC 晶体 PVT 法生长装置中感应加热线圈的不同高度和匝间距对生长腔、粉源以及生长晶体温度场的影响; 分析比较了线圈取不同匝间距时晶体生长面径向温度梯度的变化。结果表明, 在中频电源的输出功率和频率固定, 盲孔内径不变的情况下, 通过适当调整线圈匝间距和高度可以减小晶体生长面径向温度梯度, 提高晶体的质量, 同时又有比较高的生长率。

关键词: PVT 法; SiC 粉源; 温度场; 温度梯度
EEACC: 0510

中图分类号: TN304.2 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-4177(2007)S0-0225-05

1 引言

与第一代半导体 Si 和第二代半导体 GaAs 等单晶材料相比, 第三代半导体(即宽禁带半导体, 禁带宽度大于 2.2eV)材料的杰出代表 SiC 材料具有高电流击穿电场(4×10^6 V/cm)、高饱和电子漂移速率(2×10^7 cm/s)和高热导率(4.9 W/(cm·K))等特性, 已日益引起人们的关注。这些优异的特性使其在研制高温、高频、大功率、抗辐射器件以及紫外探测器、短波发光二极管等方面, 具有广阔的应用前景^[1]。

1955 年, 飞利浦实验室的 Lely^[2] 提出了一种生长高质量单晶的方法——升华法。由于此种方法是升华气体随机地在容器内壁结晶成核, 因此生长的晶体尺寸小、产率低, 难以控制成核, 有各种多型结构, 而且温度过高。1978 年, 前苏联科学家 Tairov 和 Tsvetkov^[3,4] 提出在坩埚中加设籽晶, 使成核的过程得以控制, 温度从 1800~2600℃, 氩气压力从 0.0133 到 101325 Pa。这种方法称为改进 Lely 法(modified Lely method), 也叫做物理气相传输(physical vapor transport, PVT)法。当前, SiC 体单晶的生长主要采用这种方法。生长的商用 SiC 晶片尺寸也已达到 $\Phi 100$ mm。但大量的微管(micropipe)和位错(dislocation)等缺陷的存在严重影响着晶体

的品质, 成为其实际应用的一个巨大瓶颈制约因素。

产生上述缺陷的一个重要因素就是坩埚内部温度分布的不合理。由于升华气体是利用坩埚内部温度梯度进行质量运输的, 通常的做法是在坩埚的上方开设较大内径的盲孔, 使生长腔内形成较大的轴向温度梯度^[5,6], 以促进升华气体的质量运输。采用这种方法的弊端是在生长腔内形成较大轴向温度梯度的同时, 也在晶体生长面上产生较大的径向温度梯度, 这并不利于高质量 SiC 晶体的生长。

数值计算表明, 在测温盲孔内径相对较小的情况下, 通过调整中频感应线圈的高度以及匝间距可以显著改变坩埚内的温度场。本文系统地研究了 5 匝 RF 线圈的高度和匝间距对生长腔及粉源内温度场的影响, 并分析比较了晶体生长面径向温度梯度的变化规律, 获取了欲实现坩埚内相对合理的热场分布 RF 线圈的高度和匝间距的优化设计方案。

2 生长装置

我们自主研制的大直径 SiC 晶体 PVT 法生长装置的示意图如图 1 所示。考虑到生长装置的几何对称性(y 轴), 图中只给出了其右半部分的二维几何模型。它由采用水冷の中频感应加热铜线圈、石英管、绝热层、石墨坩埚、6H-SiC 籽晶和 SiC 粉源等构成。几何尺寸如表 1 所示。

* 陕西省重大科技创新基金(批准号: 2004K07-G9)和西安理工大学优秀博士学位论文研究基金资助项目

† 通信作者。Email: zhangqunshc@sina.com

2006-11-30 收到

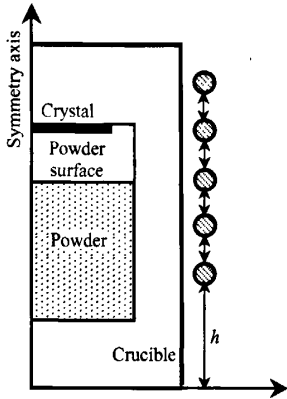


图 1 生长装置示意图

Fig.1 Schematic drawing of the growth setup

表 1 生长装置的几何模型尺寸

Table 1 Dimensions of the growth setup

Parameter	Value
Crucible inner diameter	60mm
Crucible outer diameter	100mm
Insulation thickness	35mm
Susceptor length	146mm
Growth chamber height	20mm
Growth chamber inner diameter	60mm
Top blind hole diameter	20mm
Bottom blind hole diameter	5mm
Coil square area	3.14mm × 0.5 ² mm
Number of turns	5

3 理论模型

在生长腔内,除载气 Ar 以外,普遍认为主要有 Si, SiC₂, Si₂C 和 SiC 等气相组分.对腔内流体(混合气体)应用热力学第一定律,可以推出^[6]:

$$\rho_{gas} c_{gas} \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_{gas} c_{gas} v_{gas} \frac{\partial T}{\partial x_i} + p_{gas} \frac{\partial v_{gas}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\kappa_{gas} \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - r_{gas} + \rho_a c_a \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i} (\kappa_a \text{grad} T) = \rho_{crucible} h_{crucible} \quad (1)$$

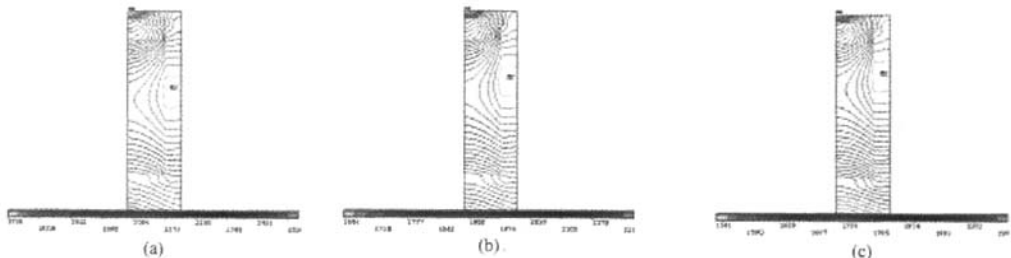


图 2 不同匝间距下坩埚中的温度分布 (a)1mm;(b) 1.5mm;(c) 2mm

Fig.2 Temperature distribution in the crucible for different spaces for turns (a)1mm;(b) 1.5mm;(c) 2mm

假设整个系统的热能耗损主要是圆柱形绝热层外壁以及测温盲孔对周围介质的热辐射.假设周围介质都是灰体,温度为恒温,应用 Stefan-Boltzman 定律可以写出:

$$q_{insulation} n_{insulation} = \epsilon_{insulation} (T)(T^4 - T_{env}^4) \quad (2)$$

其中 $q_{insulation}$, $n_{insulation}$ 和 $\epsilon_{insulation}$ 分别为绝热层中的热流率、外表面的法向量和有效热辐射系数,它们是温度的函数.

(1)和(2)式即为 PVT 法生长 SiC 晶体系统中温度分布的瞬态方程和边界条件.在瞬态方程的基础上代入边界条件和初始条件,进行单元变分计算;对区域进行单元剖分,最后对单元进行总体合成,计算出温度场的一级近似,然后反复迭代可求出所需精度的温度场.

4 计算结果与讨论

采用表 1 所示生长装置的几何尺寸作为二维轴对称有限元分析几何模型(如图 1 所示)的输入参数,定义各材料的物理属性、网格剖分,设定边界和初始条件进行计算.线圈施加的功率为 13kW,频率为 25kHz,计算时充分考虑了温度变化对系统各组件材料的电磁学及热学等物理量^[7,8]的影响.设线圈匝间距为 w ,线圈下沿与坩埚底部的距离为 h .

4.1 RF 线圈不同匝间距对系统温度场的影响

图 2 和图 3 为当线圈和坩埚的相对位置 h 取 0,匝间距 w 分别为 1,1.5 和 2mm 时,坩埚和生长腔的温度分布曲线.生长腔由坩埚内壁、晶体生长面和粉源表面构成.从计算结果可以看到,当线圈和坩埚的相对高度固定不变时,随着线圈匝间距的增大,石墨坩埚内的高温加热区域也随之上移,特别是当匝间距等于 2mm 时,坩埚内的高温加热区更接近粉源的表面(见图 2(c)),这非常有利于 SiC 粉料的有效升华;但是,另一方面,从模拟结果也可以看到,增大线圈匝间距,系统的加热效率会降低,这使得腔内的生长温度下降,轴向温度梯度减小,

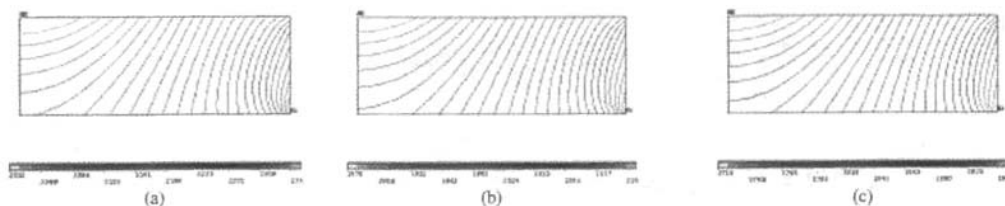


图3 不同匝间距下生长腔的温度分布 (a) 1mm;(b)1.5mm;(c) 2mm

Fig. 3 Temperature distribution in the growth chamber for different spaces between turns (a) 1mm;(b)1.5mm;(c) 2mm

而较低的生长温度和较小的轴向温度梯度对于以物质质量运输为特征的PVT法晶体生长显然是不利的,这直接影响晶体的质量和生长率.

因此,在设计感应线圈匝间距时应折中考虑粉料有效升华和晶体的生长率这两个方面的因素.

4.2 RF线圈不同高度对系统温度场的影响

图4和图5为线圈匝间距 w 等于1.5mm,线圈高度 h 分别取-25(负号表示线圈下沿比坩埚底低)、0和25mm时,粉料以及生长腔中的温度分布云图.可以看到,晶体的生长温度随着线圈的上移而

减小,这主要是因为线圈上升,系统热阻增大的缘故.进一步分析图4和图5可知,随着线圈的逐渐升高,尽管粉料的温度会有所降低,但高温加热区域也随之上移(见图4),当 $h=25\text{mm}$ 时,坩埚中的高温区几乎位于粉料表面附近,这非常有利于粉由表及里、由上至下地渐进升华,这提高了料的利用率.从图5看到,生长腔内的轴向温度梯度随线圈的升高却在减小,这会降低晶体的生长速率.

因此,在确定线圈高度时,也要综合考虑粉料的有效升华和晶体的生长率两方面问题.

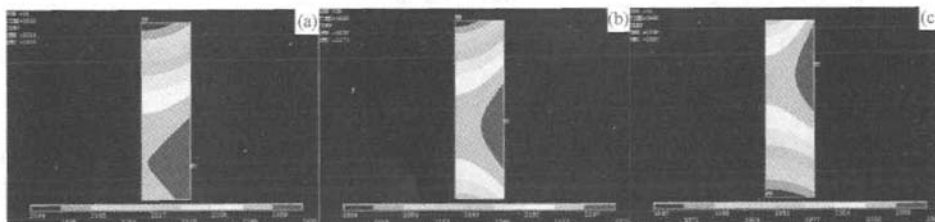


图4 SiC粉料的温度分布 (a) $h = -25\text{mm}$; (b) $h = 0$; (c) $h = 25\text{mm}$

Fig. 4 Whole temperature distribution in the SiC powder for different heights of coil (a) $h = -25\text{mm}$; (b) $h = 0$; (c) $h = 25\text{mm}$

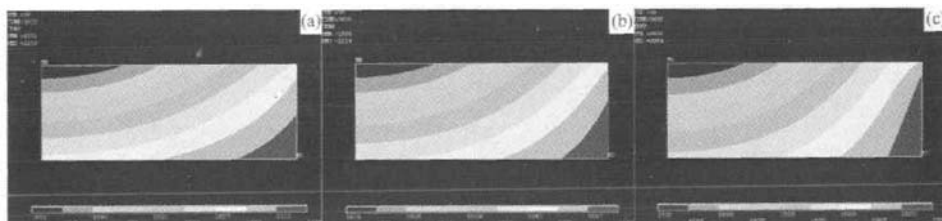


图5 生长腔的温度分布 (a) $h = -25\text{mm}$; (b) $h = 0$; (c) $h = 25\text{mm}$

Fig. 5 Whole temperature distribution in the growth chamber for different heights of coil (a) $h = -25\text{mm}$; (b) $h = 0$; (c) $h = 25\text{mm}$

4.3 对晶体生长面径向温度梯度的影响

图6为线圈和坩埚的相对位置为0,匝间距分

别为1和2mm时晶体生长面径向温度分布曲线.从图中明显看到,当线圈匝间距为1mm时,晶体生长面的径向温度梯度比较大(约 $10\text{C}/\text{cm}$),依据文

献[4,5,7],生长表面过大的径向温度梯度会增大晶体内的热应力,更容易诱发微管、位错等结构性缺陷的产生,严重影响晶体质量.

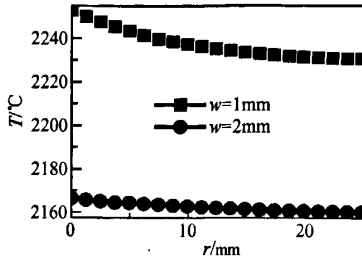


图 6 线圈取不同高度和匝间距时晶体生长面径向温度分布曲线

Fig.6 Radial temperature profiles along growth surfaces for different heights and spaces between turns of coil

综上所述,我们知道,线圈采用不同的高度和匝间距,各有其优缺点.因此,在确定 RF 线圈高度及其匝间距时,必须折中考虑粉源的升华率、晶体的生长率及其品质等方面因素.图 7 为采用线圈相对位置为 0,匝间距为 1.5mm,利用我们自主研发的生长设备制备的 6H-SiC 晶体.

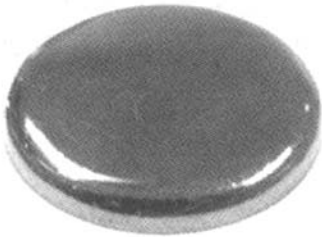


图 7 生长的 6H-SiC 晶体
Fig.7 Grown 6H-SiC crystal

5 结论

采用有限元方法分析了 RF 线圈不同的高度和匝间距对生长系统内温度场的影响.计算结果表明,增加线圈的高度和匝间距会降低系统的加热速率,降低晶体的生长速率,但同时却有助于料的有效升华和晶体质量的改善.在确定线圈高度和匝间距时,应折中考虑系统的加热效率、晶体的生长速率和 SiC 粉料的升华率等因素的影响.

参考文献

- [1] Wellmann P J, Herro Z, Winnacker A, et al. In situ visualization of SiC physical vapor transport crystal growth. *J Cryst Growth*, 2005, 275: 1807
- [2] Egorov Y E, Galyukov A O, Gurevich S G, et al. Modeling analysis of temperature field and species transport inside the system for sublimation growth of SiC in tantalum container. *Mater Sci Forum*, 1998, 264: 61
- [3] Pons M, Anikin M, Chourou K, et al. State of the art in the modelling of SiC sublimation growth. *Mater Sci Eng*, 1999, B61: 18
- [4] Ramm M S, Mokhov E N, Demina S E, et al. Optimization of sublimation growth of SiC bulk crystals using modeling. *Mater Sci Eng*, 1999, B61: 107
- [5] Bubner N, Klein O, Philip P, et al. A transient model for the sublimation growth of silicon carbide single crystals. *J Cryst Growth*, 1999, 205: 294
- [6] Zhang Qunsheng, Chen Zhiming, Pu Hongbin, et al. A hydrodynamics model of silicon carbide single crystal growth by PVT and finite element analysis. *Journal of Synthetic Crystals*, 2005, 34: 828 (in Chinese) [张群生, 陈治明, 蒲红斌, 等. SiC 晶体 PVT 生长系统的流体力学模型及其有限元分析. *人工晶体学报*, 2005, 34: 828]
- [7] Klein O, Philip P. Transient numerical investigation of induction heating during the sublimation growth of silicon carbide single crystals. *J Cryst Growth*, 2003, 247: 219
- [8] Lide D R. *CRC handbook of chemistry and physics*. Boca Raton: CRC Press, 1995: 267

Effects of Different Heights and Spaces of a Multi-Turn Inductive Coil on Temperature Distribution in the Large-Size 6H-SiC Growth System *

Zhang Qunshe[†] and Chen Zhiming

(*Department of Electronic Engineering, Xi'an University of Technology, Xi'an 710048, China*)

Abstract: The influences of different spaces between turns of the induction coil and different relative positions between the coil and the crucible on the temperature distribution of the growth chamber, SiC powder, growing crystal and the radial temperature gradients of crystal growth surfaces are investigated systematically for the large size 6H-SiC growth. All simulations results indicate that the temperature field in the growth system can be optimized by adjusting the height and spaces between turns of inductive coil, assuming that the output power and frequency, as well as inner radius of blind hole are constant.

Key words: PVT method; SiC powder; temperature distribution; temperature gradient

EEACC: 0510

Article ID: 0253-4177(2007)S0-0225-05

* Project supported by the Key Program of Technical Innovation of Shanxi Province (No. 2004K07-G9) and the Excellence Doctor's Degree Paper Research Foundation of XAUT

[†] Corresponding author. Email: zhangqunshe@sina.com

Received 30 November 2006

©2007 Chinese Institute of Electronics