# SiC 外延工艺中的气体流体模型。

贾仁需\* 张义门 张玉明 郭 辉

(西安电子科技大学微电子学院,宽禁带半导体材料与器件教育部重点实验室,西安、710071)

摘要:构建了热壁 CVD 法生长 α-SiC 外延的气体流体力学模型,并通过 COMSOL 模拟软件计算对基座的几何形 状进行设计:结果表明基座的几何形状改变,影响衬底表面的气流分布;基座有一定的倾斜角度,可以使其表面气 流分布均匀,有利于得到高质量的 α-SiC 外延片.

关键词: SiC;基座;流体模型; COMSOL
EEACC: 0520F
中图分类号: TN304.2 文献标识码: A 文章编号: 0253-4177(2007)S0-0541-04

## 1 引言

α-SiC 作为宽禁带半导体的代表之一,具有载 流子饱和漂移速度大、临界击穿电场强度高、抗辐射 能力强、热稳定性好等特性<sup>[1]</sup>.但 α-SiC 晶体中存在 大量的缺陷,使其耐磨,耐压,迁移率等性能大大降 低.为了得到性能理想的 SiC 器件,必须生长高质量 的 α-SiC 外延. 仅靠试验优化 SiC 外延生长念数费 时费力,通过软件建立模型能给试验提供有效的辅 助.本文提出了热壁 VCD 法生长 α-SiC 外延的流体 力学模型,通过 COMSOL 软件模拟计算,从理论上 分析基座的几何形状导致的气体流速变化对 SiC 外 延生长的速度和质量的影响.这为正确地确定外延 生长工艺具有重要指导意义.

#### 2 反应室模型

热壁 CVD 反应室由 RF 线圈、石英管、绝热 层、石墨感应腔体和衬底组成,如图1所示.

生长 SiC 材料的典型条件如下<sup>[2,3]</sup>:

 $H_2:100L/min; SiH_4:4mL/min; C_3H_8:4/3 L/min$ 

反应室内气体流速慢,雷诺数相对较低,流体主 要呈现层流状态,气体基本适于连续流体假设;源气 占载气流的比例很低,可以认为源组分的变化不影 响载气的流动和传热,反应室内气体为不可压缩.

控制方程:

$$-\eta \nabla^2 u + \rho(u \nabla) u + \nabla \rho = 0 \tag{1}$$

$$\nabla u = 0 \tag{2}$$

边界条件:



图 1 热壁 CVD 反应室 Fig. 1 Reaction room of hot wall CVD

出口:速度梯度垂直于边界∂φ/∂n=0(n为出 口界面法向分量)

对称轴:速度的 r 方向分量为零.即 u, = 0(r 为对称轴法向分量)

固壁:采用无滑移边界条件.

### 3 模拟结果

COMSOL 软件的流体模型和模拟结果如图 2 所示.

从图 2(b)可以看出,在反应室内气体的流速分 布是不均匀的,人口处速度比较大,反应腔中间气流 平稳,但在衬底表面气体流速接近零.为了更清晰地 看到这一点我们利用 COMSOL 软件模拟出流体流 速的箭头表示图,流线型表示图和等速线图.如图 3 所示.

©2007 中国电子学会

<sup>\*</sup> 通信作者.Email:jiarenxu@163.com 2006-12-04 收到,2006-12-16 定稿





flow rate

结合图 3 可以观察到,在基片表面气体的流速 约为零,而且在基片的头部与后部气体流速的分布 也是不均匀的.这是因为,在气体输运过程中,由于 气体与器壁或基片相对运动产生摩擦,从而导致粘 滞现象的发生,使得基片表面附近的速度不均匀分 布,贴近基座表面的流体速度降至为零.远离基座的 地方,流体受到基座的影响逐渐减弱.

由埃佛斯泰恩粘滞层理论,若假设沿衬底法线 方向分子流密度全部转化成 Si 原子并沉积到衬底 上,则可计算出气流方向上的生长率分布 G(μm/ min)<sup>[4]</sup>,见(3)式.

$$G(x) = 7.23 \times 10^6 P_0 T_s D_0 / R T_0^2 \delta \times$$

$$\exp(-D_0 T_s x/T_0 v_0 b\delta) \qquad (3)$$

其中  $D_0$  是 SiH<sub>4</sub> 在 H<sub>2</sub> 中 300K 的扩散系数;  $P_0$ 是 SiH<sub>4</sub> 的分压,可由 SiH<sub>4</sub> 与总流量的比例计算;  $v_0$ 是在不加热条件下气体平均速率;  $T_.$  是衬底温度;  $T_0 = 300K; h$  是 6H-SiC{10001}面的面间距;  $n_0$  是 原子面密度;  $\delta$  是滞流层的厚度. 外延生长速率 G(x)与沿基座的距离 x有关,产生这一情况的主要 原因是反应剂的浓度随距离 x 的增大而降低. $\delta$ 为 平板表面气流界面层厚度函数,见(4),(5)式.

$$\delta = A / \sqrt{V_{\rm T}} - B \tag{4}$$

$$\delta(x) = \frac{5x}{\sqrt{\operatorname{Re}(x)}} \tag{5}$$

其中 Vr 为反应室中气流的线速度.

为了使整个衬底上沉积均匀,我们将基座倾斜 一定角度,示意图如图4所示.



图 3 (a)箭头表示图;(b)流线型表示图;(c)等速线图 Fig. 3 (a) Arrow chart of flow rate;(b) Streamline chart of flow rate;(c) Isovels chart of flow rate



图 4 倾斜衬底结构 Fig. 4 Structure of acclivous susceptor

此时的 
$$G(x)$$
,见(3),(4)式.  
 $G(x) = 7.23 \times 10^6 \times \frac{D_0 T_s P_0}{R T_0^2 \delta(x)} \times \exp\left\{-\frac{2D_0 T_s T_m}{4g T_0^2 \tan \varphi} (\delta(0) - \delta(x))\right\}$  (6)

鉴于以上分析,将模型中的基座几何模型做了 改进,模型和模拟结果如图 5 所示.

在图 5(b)速度场模拟图中可以看到,在基片头



图 5 (a)改进的流体模型;(b)流体的速度场模拟结果 Fig. 5 (a) Improved model of fluid;(b) Simulation result of flow rate

部与后部气体流速分布相对均匀,这既符合流体力 学的特征也有效地避免了反应气体在基片表面分布 不均而引起的生长不均匀的发生.图 6 中分别为箭 头表示图,流线型表示图和等速线图.从这三个图可 以更清楚地看出在基座表面气流分布是均匀的.

## 4 结论

本文通过 COMSOL 软件的流体模型模拟,分 析了流体模型中基座的几何形状对 CVD 法生长 SiC 外延的速率和质量的影响.可以看出只有在基 座有一定的倾斜角度时,在其表面的气流分布比较 均匀,可以得到高质量的外延片.而与实际工艺参数 变化相结合,可以得出相应的倾斜角度,为模拟工作 提供参考.

#### 参考文献

[1] Wang Chao, Zhang Yuming, Zhang Yimen. Characteristics of semi-insulating 4H-SiC layers by vanadium ion implantation. Chinese Journal of Semiconductors, 2006, 27(8); 1397 (in Chinese)[王超,张玉明,张义门. 钒注人 4H-SiC. 半绝缘 特性的研究.半导体学报, 2006, 27(8); 1397]



图 6 (a)箭头表示图;(b)流线型表示图;(c)等速线图 Fig. 6 (a) Arrow chart of flow rate;(b) Streamline chart of flow rate;(c) Isovels chart of flow rate

- [2] Lofgren P M, Ji W, Hallin C, et al. Modeling of silicon carbide growth in hot-wall chemical vapor deposition processes. J Electrochemical Society, 2000,147(1),164
- [3] Veneroni A, Omarina F, Moscatelli D, et al. Modeling of epitaxial silicon carbide deposition. J Cryst Growth, 2005, 275, 295
- [4] Hao Yue, Peng Jun, Yang Yintang. Technique of wide bandgap semiconductor SiC. Beijing: Science Press, 2000(in Chinese)[郝跃,彭军,杨银堂.碳化硅宽禁带半导体技术.北京: 科学出版社, 2000]

# Gas Fluid Modeling of SiC Epitaxial Growth in Chemical Vapor Deposition Processes

Jia Renxu<sup>†</sup>, Zhang Yimen, Zhang Yuming, and Guo Hui

(Microelectronics Institute, Xidian University, Key Laboratory of Ministry of Education for Wide Band-Gap Semiconductor Materials and Devices, Xi'an 710071, China)

Abstract: A gas fluid model for chemical vapor deposition processes is presented. Geometrical shape of susceptor has been designed based on the calculation and simulation with COMSOL program. The results show that the changes of susceptor shape have obvious effects on the distribution of gas fluid on the substrate. Gas fluid on the surface is uniformly distributed when the susceptor has a certain angle. This result is helpful for obtaining the high quality silicon carbide epitaxial layers.

Key words: SiC; susceptor; model; COMSOL EEACC: 0520F Article ID: 0253-4177(2007)S0-0541-04

<sup>†</sup> Corresponding author. Email: jiarenxu@163.com Received 4 December 2006, revised manuscript received 16 December 2006