

01

Моделирование распределения температуры в зоне сублимационного роста графена на SiC подложке

© С.П. Лебедев, С.Ю. Приображенский, А.В. Плотников, М.Г. Мынбаева, А.А. Лебедев

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе,
194021 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: lebedev.serгей@mail.ioffe.ru

Поступило в Редакцию 3 июля 2022 г.
В окончательной редакции 24 сентября 2022 г.
Принято к публикации 3 октября 2022 г.

Представлены результаты моделирования распределения температуры в зоне роста графеновых слоев методом термического разложения поверхности подложек карбида кремния в установке с индукционным нагревом. Расчеты параметров нагрева элементов установки выполнены с использованием коммерческого пакета COMSOL Multiphysics с учетом электрофизических, тепловых и магнитных свойств материалов, из которых изготовлены элементы ростовой установки. Приведена численная оценка неоднородности нагрева пластин карбида кремния по их площади во время роста графеновых слоев при заданной температуре. Показано, что латеральное распределение температуры по площади пластины имеет радиальную симметрию с уменьшением значений в направлении центра.

Ключевые слова: графен, карбид кремния, моделирование, распределение температуры, сублимационный рост.

DOI: 10.21883/JTF.2022.12.53743.176-22

Введение

На сегодняшний день карбид кремния (SiC) является одним из самых перспективных материалов для полупроводниковой электроники. Высокие механические свойства, высокая теплопроводность, электрическая проводимость, сопротивление температурным нагрузкам, радиационная и уникальная коррозионная стойкость делают этот материал предметом выбора в области создания надежных приборов силовой и высокочастотной микроэлектроники и фотоники [1,2]. Традиционно промышленно выпускаемые пластины SiC используются в качестве подложек в эпитаксиальных технологиях приборных структур на основе широкозонных материалов. В последнее время они также востребованы для получения двумерных слоев графена (ГР). Эпитаксиальное выращивание ГР слоев осуществляется методом термического разложения поверхности пластин SiC в условиях высокочастотного (ВЧ) индукционного нагрева до температур порядка 2000°C [3]. Преимущество этого метода перед известными методами осаждения углерода из внешнего источника заключается в том, что ГР структуры формируются из собственных атомов кристаллической решетки SiC, что обеспечивает их более высокое структурное качество и, следовательно, надежность в условиях дальнейших практических применений [4]. Предварительные исследования показали, что оптимизация распределения температуры в ростовой зоне в значительной степени определяет качество выращиваемых слоев ГР. Однако конструкции современных установок с ВЧ нагревом позволяют производить лишь локальный пирометрический мониторинг температуры

в зоне роста через специально предусмотренные в их корпусе окна. В этой связи оптимизация процессов получения ГР, основанная на методах численного моделирования, является актуальной задачей. Отметим, что моделирование процессов высокотемпературного синтеза монокристаллов SiC методом физического транспорта паров (PVT), также реализуемого в установках с ВЧ нагревом, развивалось начиная с 1990-х годов и уже доказало свою высокую эффективность [5–9]. К настоящему времени разработан ряд коммерческих пакетов программного обеспечения, таких, как Virtual Reactor, COMSOL Multiphysics, ANSYS Fluent, и др., которые позволяют провести моделирование исходя из конкретных особенностей используемого оборудования и задаваемых условий роста. В настоящей работе с использованием численных методов решалась конкретная аналитическая задача: моделирование распределения температуры в зоне роста ГР слоев на подложке SiC.

1. Эксперимент

Схема установки роста ГР на SiC представлена на рис. 1, где показаны основные конструкционные элементы. Ростовая ячейка и нагреватель были изготовлены из мелкозернистого плотного графита, а тепловая изоляция — из пористого графитового материала. Нагрев элементов установки осуществляется индукционным методом при использовании высокочастотного транзисторного генератора с рабочей частотой 66 кГц. Контроль температуры осуществляется в течение всего технологического процесса через смотровое окно, рас-

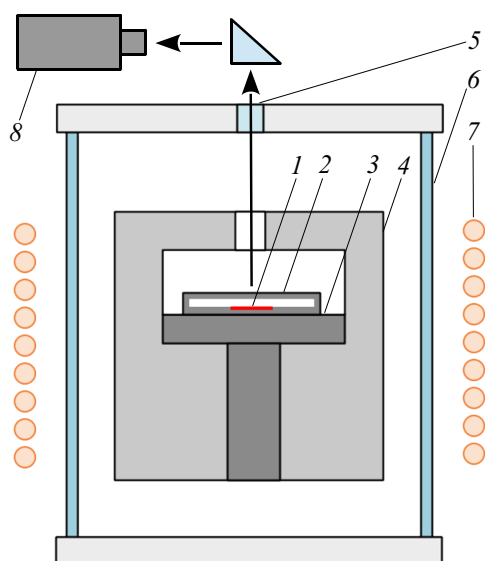


Рис. 1. Схематическое изображение технологической установки для роста ГР, где 1 — SiC подложка, 2 — ростовая ячейка, 3 — нагреватель, 4 — теплоизоляция, 5 — окно пирометрического контроля, 6 — кварцевый реактор, 7 — индуктор, 8 — пирометр.

положенное в верхнем фланце реактора. Для измерения температуры использовался инфракрасный оптический пирометр „Raytek Marathon MR1S“, погрешность измерений которого составляет $\pm 0.5\%$. Пирометрический контроль проводился на поверхности ростовой ячейки.

В ходе проведенных экспериментов были изучены временные зависимости температуры при нагреве ростовой ячейки от 1000 до 2050 °C и ее охлаждении при значениях мощности генератора в диапазоне 3–10 kW. Установлено, что в диапазоне 1000–1700 °C при мощности свыше 6 kW временно изменение температуры ростовой ячейки имеет характер, близкий к линейному (рис. 2, а). На основе полученных зависимостей были определены скорости нагрева при различных мощностях. На рис. 2, б приведены временные зависимости температуры при охлаждении ячейки. Как можно видеть, зависимость температуры ячейки от времени охлаждения в диапазоне температур от 2050 до 1000 °C имеет почти линейную зависимость. Средняя скорость охлаждения ячейки была определена как 2.3 °C/s. В дальнейшем полученные данные были использованы для верификации построенной расчетной модели.

Численное моделирование проводилось с использованием коммерческого пакета конечно-элементного анализа COMSOL Multiphysics. Данный пакет является средой моделирования физических процессов любой сложности с возможностью связывания физических интерфейсов в мультифизическую систему. Для построения модели с использованием COMSOL Multiphysics было применено осесимметричное приближение, позволяющее получить объемную модель установки на основе ее двумерной

проекции [10,11]. Также были учтены все электрофизические, тепловые и магнитные свойства материалов, используемых в конструкции установки. Моделирование физических процессов, протекающих внутри ростовой ячейки, проводилось с использованием следующих интерфейсов: „магнитные поля“, „теплопроводность“, „излучение“ и „конвекция“.

2. Результаты моделирования

На рис. 3, а представлена модель установки в разогретом состоянии, полученная в программе COMSOL Multiphysics. Экспериментальные данные температурных измерений, проведенных на поверхности ростовой ячейки при различных значениях мощности генератора, и результат моделирования изменения температуры в той же области приведены на рис. 3, б. Можно видеть, что расчетные кривые хорошо согласуются с экспериментальными, что свидетельствует о правильном задании всех параметров модели и адекватном связывании всех интерфейсов в мультифизическую систему.

С учетом физических свойств различных материалов, из которых изготовлены конструкционные части установки, было проведено моделирование распределения температуры нагрева в ростовой зоне, которая ограничивается внутренними стенками теплоизоляции. Результаты приведены на рис. 4.

Из полученных результатов следует, что основная часть тепла выделяется в зоне расположения тигля, что указывает на эффективности использованных теплоизолирующих материалов и выбранной конструкции ростовой зоны. Полученные расчетные результаты распределения температуры на стенках и внутри ростовой ячейки представлены на рис. 5. Как следует из рис. 5, а, латеральное распределение температуры внутри ячейки имеет радиальную симметрию с уменьшением значений в направлении центра. В частности, при температуре разогрева поверхности ячейки до 1750 °C изменение полученных значений на расстоянии 1 см от ее центра составляет 5–7 °C. На рис. 5, б представлены кривые изменения температуры на поверхности крышки и дна ячейки. Показано, что температура крышки ячейки и температура дна ячейки, на которой располагается подложка, различаются на 5–8 °C.

На основе результатов моделирования была проведена количественная оценка разброса значения температуры в центральной области дна ростовой ячейки с учетом геометрических параметров пластин SiC (рис. 6). Как следует из рисунка, для квадратной пластины SiC со стороной 5 mm разница температур между его центральной частью и периферией составляет 1–2 °C. Для пластины со стороной 11 mm эта разница составляет 7–8 °C.

Таким образом, получены расчетные зависимости распределения температуры в зоне роста ГР на подложках SiC при различных временах и мощностях индукционного нагрева. Определены основные параметры тем-

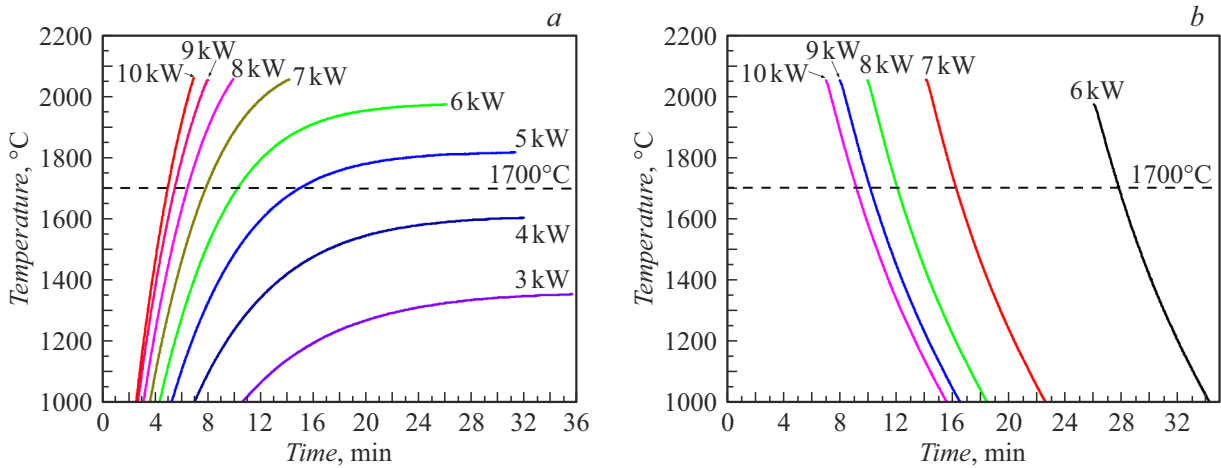


Рис. 2. Зависимость температуры ростовой ячейки при различных задаваемых значениях мощности генератора: *a* — от времени нагрева, *b* — от времени охлаждения.

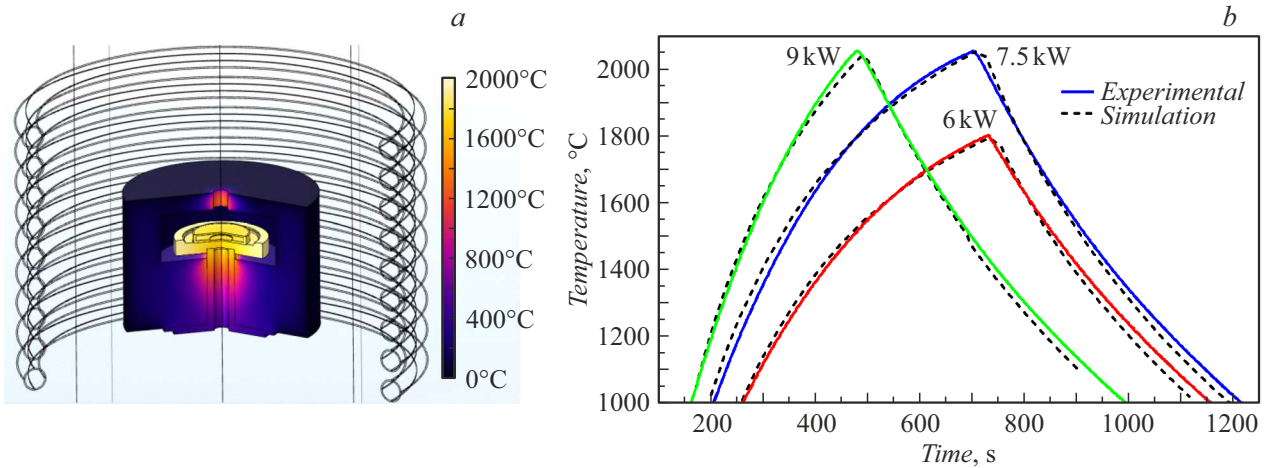


Рис. 3. *a* — 3D-изображение установки, получаемое в программе COMSOL Multiphysics; *b* — экспериментальные и расчетные временные зависимости изменения температуры поверхности ростовой ячейки для различных циклов ее нагрева–охлаждения, полученные при различных значениях мощности ВЧ генератора.

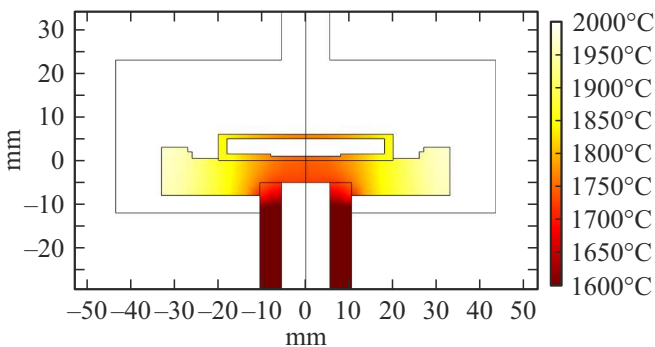


Рис. 4. Распределение температуры в ростовой зоне.

пературного поля, которые могут влиять на процесс формирования и свойства ГР слоев. К таким параметрам относятся различные температуры, измеренной

в области проведения пирометрического контроля, и реальной температуры нагрева подложки, а также наличие температурного градиента по ее площади. Данные моделирования позволяют скорректировать показания пирометра на указанную разницу и более точно задавать температуру роста ГР, а также определить условия для повышения однородности ее распределения по площади подложки и влиять на степень однородности свойств получаемых ГР слоев. В работах [12,13] представлены результаты исследований, демонстрирующих высокое структурное совершенство и электрофизические свойства слоев ГР на SiC, выращенных в рассматриваемой технологической установке. Совокупность ранее полученных экспериментальных результатов и новых данных численного моделирования определяет новые возможности для дальнейшего прогресса рассмотренной лабораторной технологии. В перспективе можно ожидать, что использование численного моделирования

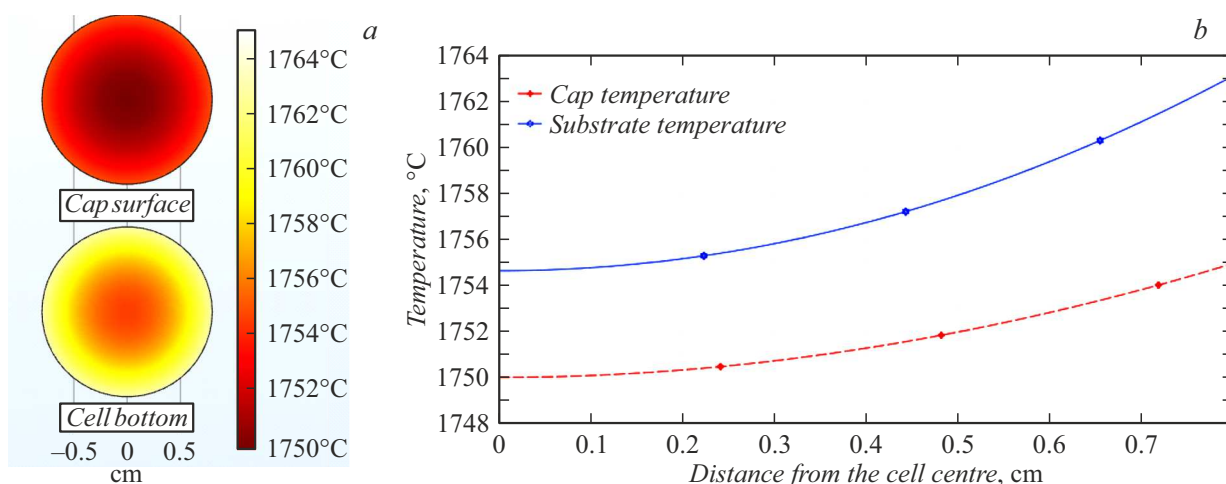


Рис. 5. *a* — распределение температуры в ростовой ячейке, *b* — график распределения температуры на поверхности крышки и по поверхности подложки SiC.

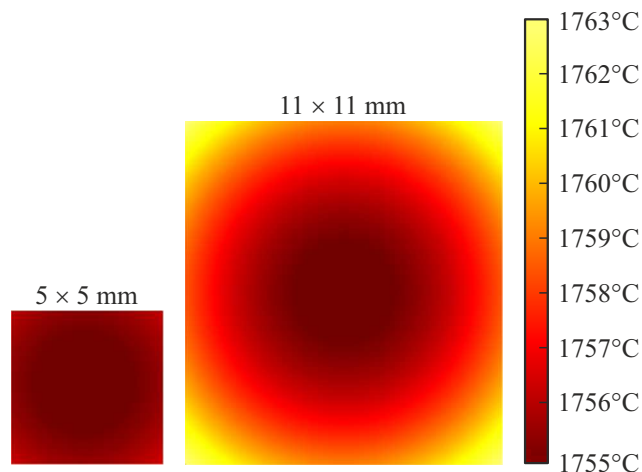


Рис. 6. Распределение температуры на дне ростовой ячейки под пластиной SiC с размерами 5 × 5 и 11 × 11 mm.

в программе COMSOL Multiphysics позволит оптимизировать конструкцию сублиминационной установки для решения актуальной технологической проблемы получения ГР на основе промышленно выпускаемых пластин SiC диаметром до 6 дюймов. Это обеспечит переход разрабатываемой лабораторной технологии получения ГР структур, а также технологий создания приборов на их основе на уровень промышленного производства.

Заключение

Решена задача мультифизического моделирования распределения температуры в зоне эпитаксиального роста ГР на подложках SiC. Определены основные параметры распределения температурного поля для конкретной конфигурации технологической установки, используемой для роста слоев ГР. Продемонстрировано

соответствие экспериментальных данных и расчетных параметров, что подтверждает достоверность модели, построенной с использованием программного пакета COMSOL Multiphysics.

Благодарности

Работа выполнена при частичной поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (договор № 075-15-2021-1349).

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликте интересов.

Список литературы

- [1] H. Matsunami, 12th International Symposium on Power Semiconductor Devices & ICs. Proceedings (Cat. № 00CH37094), 2000, p. 3–9, DOI: 10.1109/ISPSD.2000. 856762
- [2] S. Castelletto, A. Peruzzo, C. Bonato, B.C. Johnson, M. Radulaski, H. Ou, F. Kaiser, J. Wrachtrup. ACS Photonics, **9** (5), 1434 (2022). DOI: 10.1021/acsp Photonics.1c01775
- [3] A.A. Lebedev, V.Yu. Davydov, D.Yu. Usachov, S.P. Lebedev, A.N. Smirnov, I.A. Eliseyev, M.S. Dunaevskiy, E.V. Gushchina, K.A. Bokai, J. Pezold. Semiconductors, **52** (14), 1882 (2018).
- [4] J.C. Zhang, L. Lin, K.C. Jia, L.Z. Sun, H.L. Peng, Z.F. Liu. Adv. Mater., **32**, 1903266 (2020). DOI: 10.1002/adma.201903266
- [5] S.Y. Karpov, Y.N. Makarov, M.S. Ramm. Phys. Status Solidi B, **202** (1), 201 (1997). DOI: 10.1002/1521-3951(199707)202:1<201::AID-PSSB201>3.0.CO;2-T
- [6] Y.E. Egorov, A.O. Galyukov, S.G. Gurevich, Y.N. Makarov, E.N. Mokhov, M.G. Ramm, M.S. Ramm, A.D. Roenkov, A.S. Segal, Y.A. Vodakov, A.N. Vorob'ev, A.I. Zhmakin. Mater. Sci. Forum, **264–268**, 61 (1998). DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.264-268.61

- [7] M.S. Ramm, E.N. Mokhov, S.E. Demina, M.G. Ramm, A.D. Roenkov, Yu.A. Vodakov, A.S. Segal, A.N. Vorob'ev, S.Y. Karpov, A.V. Kulik, Yu.N. Makarov. *Mater. Sci. Eng. B*, **61–62**, 107 (1999). DOI: 10.1016/S0921-5107(9800456-5)
- [8] M. Selder, L. Kadinski, Yu. Makarov, F. Durst, P. Wellmann, T. Straubinger, D. Hofmann, S. Karpov, M. Ramm. *J. Cryst. Growth*, **211**, 333 (2000). DOI: 10.1016/S00220248(99)00853-2
- [9] M.T. Ha, S.M. Jeong. *J. Korean Ceram. Soc.*, **59** (2), 153 (2022). DOI:10.1007/s43207-022-00188-y
- [10] M. Horii, N. Takahashi, T. Narita. *IEEE Transactions on Magnetics*, **36** (4), 1085 (2000), DOI: 10.1109/20.877629
- [11] M. Streblau. *TEM J.*, **3** (2), 162 (2014).
- [12] S.P. Lebedev, D.G. Amel'chuk, I.A. Eliseyev, I.P. Nikitina, P.A. Dementev, A.V. Zubov, A.A. Lebedev. *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*, **28** (4), 321 (2020). DOI: 10.1080/1536383X.2019.1697684
- [13] E. Lähderanta, A.A. Lebedev, M.A. Shakhov, V.N. Stamov, K.G. Lisunov, S.P. Lebedev. *J. Phys.: Condens. Matter.*, **32** (11), 115704 (2020). DOI: 10.1088/1361-648X/ab5bb6