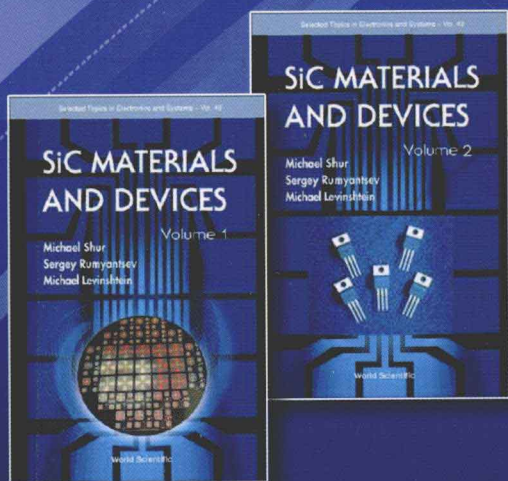


国外电子与通信教材系列



# 碳化硅半导体 材料与器件

SiC Materials and Devices, Volume I & II



[美] Michael Shur  
[美] Sergey Rumyantsev 主编  
[俄] Michael Levinshtein

杨银堂 贾护军 段宝兴 译



电子工业出版社  
PUBLISHING HOUSE OF ELECTRONICS INDUSTRY

<http://www.phei.com.cn>

国外电子与通信教材系列

# 碳化硅半导体材料与器件

SiC Materials and Devices, Volume I & II

[美] Michael Shur

[美] Sergey Rumyantsev 主编

[俄] Michael Levinshtein

杨银堂 贾护军 段宝兴 译

电子工业出版社

Publishing House of Electronics Industry

北京·BEIJING

## 内 容 简 介

本书是一本系统介绍碳化硅半导体材料及器件的专著,主要论述了 SiC 材料与器件中的相关基础理论,内容包括:SiC 材料特性、SiC 同质外延和异质外延、SiC 欧姆接触、肖特基势垒二极管、大功率 PiN 整流器、SiC 微波二极管、SiC 晶闸管、SiC 静态感应晶体管、SiC 衬底材料生长、SiC 深能级缺陷、SiC 结型场效应晶体管,以及 SiC BJT 等。书中涉及 SiC 材料制备、外延生长、测试表征、器件结构与工作原理、器件设计与仿真、器件关键工艺、器件研制与性能测试,以及器件应用等多个方面。在论述这些基础理论的同时,重点总结了近年来 SiC 材料与器件的主要研究成果,以及今后的发展趋势。

本书可作为高等学校电子科学与技术、微电子技术等专业本科高年级学生、研究生的教学用书或辅助教材,也可作为从事 SiC 或其他宽禁带半导体材料与器件研究工作的专业技术人员的参考书。

SiC Materials and Devices-Vol 1

Copyright © 2006 by World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. All rights reserved.

SiC Materials and Devices-Vol 2

Copyright © 2007 by World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. All rights reserved.

These two books, or parts thereof, may not be reproduced in any form or by any means, electronic or mechanical, including photocopying, recording or any information storage and retrieval system now known or to be invented, without written permission from the Publisher.

Simplified Chinese translation arranged with World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore.

本书简体中文版专有出版权由 World Scientific Publishing Co. Pte Ltd. 授予电子工业出版社。未经出版者预先书面许可,不得以任何方式复制或抄袭本书的任何部分。

版权贸易合同登记号 图字:01-2012-5639

### 图书在版编目(CIP)数据

碳化硅半导体材料与器件 / (美) 舒尔 (Shur, M.) 等主编; 杨银堂, 贾护军, 段宝兴译. —北京: 电子工业出版社, 2012. 8

书名原文: SiC Materials and Devices, Volume I & II

(国外电子与通信教材系列)

ISBN 978-7-121-17755-2

I. ①碳… II. ①舒… ②杨… ③贾… ④段… III. ① I—VI 族化合物半导体—半导体材料—高等学校—教材 ② I—VI 族化合物半导体—半导体器件—高等学校—教材 IV. ① TN304.2 ②

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2012)第 180663 号

策划编辑: 陈晓莉

责任编辑: 陈晓莉

印 刷: 北京丰源印刷厂

装 订: 三河市皇庄路通装订厂

出版发行: 电子工业出版社

北京市海淀区万寿路 173 信箱 邮编: 100036

开 本: 787×1092 1/16 印张: 21.5 字数: 550 千字

版 次: 2012 年 8 月第 1 次印刷

定 价: 59.00 元

凡所购买电子工业出版社图书有缺损问题, 请向购买书店调换。若书店售缺, 请与本社发行部联系。联系及邮购电话: (010)88254888。

质量投诉请发邮件至 zltz@phei.com.cn, 盗版侵权举报请发邮件至 dbqq@phei.com.cn。

服务热线: (010)88258888。

# 译者序

半导体科学与技术引发了现代科技许多领域革命性的变革和进步,是计算机、通信和网络技术的基础和核心,已经成为与国民经济发展、社会进步及国家安全密切相关的、重要的科学技术。半导体科技与人们的日常生活息息相关,在产生巨大经济效益的同时,大大提高了人们的生活质量。从 20 世纪 50 年代发展起来的集成电路综合了电子、信息、材料、物理、化学和数学等各门学科的精髓,它的发展速度非常惊人!促使信息、通信和计算机领域发生巨大变革,已经成为一个国家科学技术的“基石”。

以 SiC、GaN 和 ZnO 为代表的第三代宽带隙半导体材料与器件,是发展大功率、高频高温、抗强辐射、蓝光激光器和紫外探测器等技术的核心。由于众所周知的优良材料特性,使第三代半导体技术,包括材料生长与外延、器件设计及工艺、系统封装和可靠性等研究成为近几年半导体研究领域的热点。SiC 具有高热导率、高电子饱和速度和大的临界击穿电场,是电力电子(或功率半导体)领域 Si 材料的首选“继承者”;GaN 材料具有的极化效应,高的禁带宽度( $\geq 3.4$  eV)、高的电子饱和速度( $2.2 \times 10^7$  cm/s)和大的临界击穿电场( $\geq 3$  MV/cm),是军用微波信号放大系统的核心。

这是一本系统介绍碳化硅半导体材料及器件的专著。碳化硅属于第三代半导体材料的代表,是宽禁带半导体研究最广泛的材料之一,也是最早被发现的半导体材料,由于其优越的性能,使其能满足高温、大电流、高频及强辐射环境应用。

本书的内容主要来自 World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd 出版的系列专著之一 *SiC Materials and Devices*, 主编为: Michael Shur; Rensselaer polytechnic Institute, USA; Sergey Rumyantsev; Rensselaer Polytechnic Institute, USA 和 Ioffe Institute of the Russian Academy of Science, Russia 和 Michael Levinshtein; Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences, Russia。原著为两卷,翻译时合并为一。原书第 I 卷为本书的第 1~第 8 章,第 II 卷为本书的第 9~第 12 章。

本书是一本具有广泛参考意义的专著,结合基础理论和碳化硅关键工艺技术,讲述了宽禁带半导体材料与器件所涉及的基本技术问题和常用器件结构,适合于从事碳化硅半导体材料及器件研究的技术人员、科研工作者研读,也可作为高等学校电子科学与技术、微电子学,集成电路设计等学者专业的高年级本科生教材和研究生相关教学用书。对于从事其他宽禁带半导体材料及器件研究工作的人员,本书也具有借鉴意义。由于国际上(包括国内)关于此类专著很少,很多从事碳化硅(包括其他宽带隙半导体材料与器件)的学者强烈建议国内出版或编译国际上关于此方面的优秀教材,本书就是给从事碳化硅材料,尤其是器件方面的学者、技术人员或研究生提供的一个很好的参考。

本书的另一个特点是针对每种器件结构,分别提供了上百篇国际重要期刊和会议的参考文献,是碳化硅材料及器件研究至今最具有代表性的成果。

参加本书编译的人员怀着研修、学心的心情,严谨、认真的态度尽量准确把握作者原意的

原则翻译。参与编译的人员包括:杨银堂教授(第3、第6、第8和第12章);段宝兴副教授(第4、第5和第10章);贾护军副教授(第7、第9和第11章);刘莉老师(第1和第2章)。另外耿振海、余岑、赵光炜、崔培水、成涛、李泳锦等同志也参加了部分内容的翻译和文字工作,译者对他(她)们表示感谢。

从本书的策划、翻译到最后完稿付梓,电子工业出版社给予了很多支持和帮助,特别感谢贵社的陈晓莉编审对本书所做的大量工作。

由于译者水平有限,加之时间紧迫,不妥或错误之处在所难免,请读者指正。

译者  
西安电子科技大学

# 前 言

自从 1907 年 Captain H. J. Round 通过在金属探针和 SiC 晶体之间施加偏压发现黄光和蓝光发射现象以后,就开始了 SiC 技术的相关研究。1923 年,俄罗斯科学家 Oleg Losev 发现了 SiC 材料的两种发光机制,即我们现在称为“预穿前”导致的发光和场致发光。研究人员在半个多世纪前就已经认识到了 SiC 技术在半导体器件方面的应用潜力。SiC 材料特性中最具吸引力的方面包括:

- 宽带隙,不同聚合物可以高达 $(3\sim 3.3)\text{eV}$
- 高的雪崩临界击穿电场, $(2.5\sim 5)\text{MV/cm}$
- 高热导率, $(3\sim 4.9)\text{W/cm}\cdot\text{K}$
- 高工作温度(高达  $1000^\circ\text{C}$ )
- 高化学稳定性和抗辐照特性

然而,正是由于这些独特的优势,导致 SiC 材料在研制过程中遇到了很多技术方面的困难,从而使 SiC 从基础研究到商业化经历了几十年的历程。

20 世纪 90 年代初,SiC 技术研究方面取得的重大突破,使得几乎所有的半导体器件,包括 PN 二极管,肖特基二极管,金属氧化物场效应晶体管(MOSFET),金属半导体场效应(MES-FET)双极型晶体管,晶闸管,IMPATT 二极管,以及太阳能日盲型光电探测器等,都相继研制成功。

目前 SiC 功率肖特基二极管和高温 SiC MESFET 已经作为首批商品化器件进入市场。

SiC 因其良好的热导率和与外延材料高的晶格匹配已经成为氮化物基器件理想的衬底材料,包括蓝光二极管、激光器等,SiC 已经成为当前半导体研究领域的前沿和热点。

本书的编著者都是 SiC 技术,包括材料和器件研究方面国际公认的权威,他们总结了当前宽带隙半导体技术水平下最新的设计理念。

这本碳化硅丛书包括两卷,第一卷内容包括 SiC 材料特性(第 1 章),SiC 同质和异质外延(第 2 章),SiC 欧姆接触(第 3 章),肖特基势垒二极管(第 4 章),大功率 PiN 整流器(第 5 章),SiC 微波二极管(第 6 章),SiC 晶闸管(第 7 章),以及 SiC 静态感应晶体管(第 8 章)。

第二卷的内容包括 SiC 衬底材料生长(第 9 章),SiC 深能级缺陷(第 10 章),SiC 结型场效应晶体管(第 11 章)和 SiC BJT(第 12 章)。

本书的读者可以是从事 SiC 或其他宽带隙材料和器件研究工作的专业技术人员、科学家、工程师及研究生。同时本丛书也可以作为 SiC 宽带隙半导体技术方面的研究生辅助教材。

Michael Shur  
Sergey Rumyantsev  
Michael Levinshtein

# 各章作者

## 第 1 章 碳化硅材料特性

G. Pensl, F. Ciobanu, T. Frank, M. Krieger, S. Reshanov, F. Schmid, M. Weidner

## 第 2 章 碳化硅同质及异质外延

A. S. Bakin

## 第 3 章 碳化硅欧姆接触

F. Roccaforte, F. La Via, V. Raineri

## 第 4 章 碳化硅肖特基二极管

J. H. Zhao, K. Sheng, R. C. Lebron-Velilla

## 第 5 章 碳化硅功率 PiN 二极管

R. Singh

## 第 6 章 碳化硅微波应用

K. Vassilevski

## 第 7 章 碳化硅晶闸管

M. E. Levinshstein, S. L. Rumyantsev, T. T. Mnatsakanov, A. K. Agarwal, J. W. Palmour

## 第 8 章 碳化硅静电感应晶体管

G. C. DeSalvo

## 第 9 章 SiC 衬底生长

A. Powell, J. Jenny, S. Muller, H. Med. Hobgood, V. Tsvetkov, R. Lenoard, C. Carter, Jr.

## 第 10 章 碳化硅中的深能级缺陷

A. A. Lebedev

## 第 11 章 SiC 结型场效应晶体管

D. Stephani, P. Friedrichs

## 第 12 章 SiC BJT

T. P. Chow, A. K. Agarwal

# 目 录

<b>第 1 章 碳化硅材料特性</b> .....	1
1.1 SiC 材料基本特性 .....	1
1.2 SiC 材料的多型体 .....	2
1.3 SiC 能带结构和有效质量 .....	2
1.4 SiC 材料的热特性 .....	5
1.5 掺杂和自由载流子电荷 .....	7
1.5.1 浅施主和电子 .....	9
1.5.2 浅受主和空穴 .....	13
1.6 SiC 材料掺杂物扩散 .....	14
1.7 SiC 杂质的导电性 .....	15
1.8 SiC 材料少数载流子寿命 .....	18
1.9 SiC/SiO <sub>2</sub> 界面特性 .....	20
参考文献 .....	24
<b>第 2 章 碳化硅同质及异质外延</b> .....	32
2.1 SiC 外延生长技术 .....	32
2.2 SiC 同质外延生长 .....	32
2.2.1 蒸发生长技术 .....	33
2.2.2 分子束外延 .....	34
2.2.3 液相外延 .....	35
2.2.4 CVD 生长技术 .....	35
2.2.5 外延层缺陷 .....	38
2.3 SiC 异质外延生长 .....	44
2.4 总结 .....	48
参考文献 .....	48
<b>第 3 章 碳化硅欧姆接触</b> .....	57
3.1 金属—半导体接触 .....	58
3.2 比接触电阻 .....	60
3.3 n 型 SiC 欧姆接触 .....	62
3.3.1 Ti 和 Ta 基欧姆接触 .....	64
3.3.2 Ni 基欧姆接触 .....	65
3.3.3 硅化物接触的界面形貌 .....	68
3.3.4 键合技术 .....	69
3.4 p 型 SiC 欧姆接触 .....	70
3.4.1 Al/Ti 接触 .....	71



3.4.2	Al/Ti 接触的替代物	73
3.5	SiC 欧姆接触的热稳定性	75
3.6	SiC 欧姆接触发展新趋势	77
3.7	总结	78
	参考文献	80
<b>第 4 章</b>	<b>碳化硅肖特基二极管</b>	<b>86</b>
4.1	碳化硅肖特基接触	86
4.1.1	碳化硅肖特基接触理论	86
4.1.2	不同金属与 SiC 接触的势垒高度	88
4.2	高压 SiC SBD, JBS 和 MPS 二极管	95
4.2.1	SiC SBD 新技术	96
4.2.2	SiC SBD 终端技术	97
4.2.3	SiC SBD 反向漏电流	98
4.2.4	SiC SBD 正向压降	102
4.3	肖特基二极管在功率电路中的应用	104
4.3.1	功率二极管的重要性与硅极限	104
4.3.2	功率电路中半导体器件的损耗	105
4.3.3	商业化 SiC 和 Si 二极管静态性能比较	106
4.3.4	商业化 SiC 和 Si 二极管动态特性比较	107
4.4	SiC SBD 的其他应用	110
4.4.1	SiC SBD 气敏传感器	110
4.4.2	SiC SBD 微波应用	111
4.4.3	SiC SBD 紫外探测器	111
4.5	SiC SBD 未来发展的挑战	113
4.5.1	总结	113
4.5.2	SiC SBD 发展趋势和挑战	114
	参考文献	115
<b>第 5 章</b>	<b>碳化硅功率 PiN 二极管</b>	<b>126</b>
5.1	PiN 二极管的设计及工作原理	127
5.1.1	高击穿电压外延层设计	127
5.1.2	SiC PiN 二极管终端设计	128
5.1.3	载流子寿命与二极管开态压降	128
5.1.4	SiC PiN 二极管载流子寿命测试	130
5.1.5	超高电流密度 PiN 二极管	132
5.2	PiN 二极管实验	134
5.2.1	PiN 二极管特性测量	134
5.2.2	PiN 二极管的制造过程	134
5.2.3	5kV PiN 二极管	135
5.2.4	9.0mm <sup>2</sup> , 10kV 4H-SiC PiN 二极管	139
5.3	SiC 二极管成品率和可靠性	141

5.3.1	SiC 二极管成品率限制因素	141
5.3.2	SiC PiN 二极管正向电压的退化	141
5.4	总结	146
	参考文献	146
<b>第 6 章</b>	<b>碳化硅微波应用</b>	149
6.1	SiC 二极管微波应用	149
6.2	SiC 点接触探测器	150
6.3	SiC 变容二极管	151
6.4	SiC 肖特基混频二极管	153
6.5	SiC PiN 微波二极管	157
6.6	SiC IMPATT 二极管	160
6.7	总结	167
	参考文献	168
<b>第 7 章</b>	<b>碳化硅晶闸管</b>	172
7.1	引言	172
7.2	晶闸管的导通过程	172
7.2.1	低压晶闸管的导通过程	172
7.2.2	高压晶闸管的导通过程	175
7.2.3	晶闸管的光触发导通	182
7.3	稳态电流—电压特性	183
7.3.1	低压晶闸管稳态电流—电压特性	183
7.3.2	高压晶闸管稳态电流—电压特性	185
7.3.3	SiC 电子—空穴散射(EHS)	189
7.4	关断特性	191
7.4.1	传统的晶闸管关断模式	191
7.4.2	场效应管(FET)控制 GTO 关断模式	194
7.5	频率特性	198
7.6	临界电荷	200
7.6.1	低压晶闸管的临界电荷	201
7.6.2	高压晶闸管中的临界电荷	202
7.6.3	4H-SiC 基晶闸管的临界电荷	205
7.7	结论	208
	参考文献	209
<b>第 8 章</b>	<b>碳化硅静电感应晶体管</b>	215
8.1	静电感应晶体管发展历史	215
8.2	静电感应晶体管结构	216
8.2.1	SIT 器件结构布局图	217
8.2.2	SiC SIT 器件特性优化	219
8.2.3	肖特基和离子注入 SiC SIT	220
8.2.4	静电感应晶体管栅结构	221

8.2.5	垂直型 FET 结构	222
8.2.6	常开型和常关型 SIT 设计	223
8.3	静电感应晶体管 $I-V$ 特性	223
8.3.1	类五极管模式	223
8.3.2	类三极管模式	224
8.3.3	复合模式	227
8.3.4	双极模式	229
8.4	静电感应晶体管的应用	230
8.4.1	SiC 静电感应晶体管高 RF 脉冲功率放大	230
8.4.2	SiC SIT 高射频连续波功率放大	231
8.4.3	SiC SIT 功率转换	232
8.5	总结	234
	参考文献	234
<b>第 9 章</b>	<b>SiC 衬底生长</b>	240
9.1	引言	240
9.2	SiC 体材料生长	240
9.2.1	物理气相传输	240
9.2.2	升华外延	241
9.2.3	液相外延	242
9.2.4	高温化学气相淀积	242
9.3	晶向	243
9.4	晶体直径的增长	243
9.5	衬底缺陷	244
9.5.1	晶型稳定性	244
9.5.2	微管	245
9.5.3	小角晶界	248
9.5.4	位错	250
9.6	SiC 掺杂	251
9.7	用于微波器件的 SiC 衬底	252
9.7.1	浅能级	252
9.7.2	深能级	253
9.7.3	HPSI 材料现状	254
9.8	切片与抛光	254
9.8.1	切片	255
9.8.2	抛光	255
9.9	衬底成本	256
9.10	结论	257
	参考文献	257
<b>第 10 章</b>	<b>碳化硅中的深能级缺陷</b>	260
10.1	引言	260

10.2	SiC 中深能级的参数	260
10.2.1	SiC 中的主要掺杂	260
10.2.2	SiC 中其他类型的杂质能级	263
10.2.3	碳化硅中的本征缺陷	267
10.2.4	SiC 的辐照掺杂	270
10.3	杂质对碳化硅外延层生长的影响	273
10.3.1	碳化硅异质外延	273
10.3.2	SiC 竞位外延	274
10.4	碳化硅中的深能级及其复合过程	275
10.4.1	6H-和 4H-SiC pn 结结构中的深能级及辐照复合	275
10.4.2	深能级对 6H-SiC pn 结结构中少子扩散长度和少子寿命的影响	277
10.4.3	SiC pn 结结构中的深能级以及击穿电压的负温度系数	278
10.5	结论	280
	参考文献	282
<b>第 11 章</b>	<b>SiC 结型场效应晶体管</b>	<b>295</b>
11.1	引言	295
11.1.1	历史回顾	295
11.1.2	SiC JFET 的半导体物理基础	296
11.1.3	正向导通还是正向截止	299
11.2	横向 SiC-JEFT	300
11.3	垂直 JFET(VJFET)	301
11.3.1	完全的 VJFET	301
11.3.2	具有横向沟道的 VJFET	303
11.3.3	限流器	306
11.4	基于 SiC VJFET 的功率开关	307
11.4.1	共源共栅方法	307
11.4.2	单模 VJFET	308
11.4.3	SiC VJFET 的应用	309
11.4.4	高温工作	309
	参考文献	311
<b>第 12 章</b>	<b>SiC BJT</b>	<b>313</b>
12.1	引言	313
12.2	品质因数	314
12.3	双极型功率晶体管	315
12.3.1	双极型晶体管(BJT)	316
12.3.2	达林顿管	326
12.4	商业化面临的挑战	329
	参考文献	329
<b>附录</b>	<b>符号列表</b>	<b>332</b>

# 第 1 章 碳化硅材料特性

本章总结了宽带隙半导体 SiC 与器件制造有关材料特性,主要讨论了具有优越电学和热学性能并且可以作为单晶重复生长的 4H-、6H-和 3C-SiC 等几种 SiC 多型体。碳化硅材料的导电类型由掺杂的施主和受主性能决定。本章包括杂质扩散、杂质导电、少数载流子寿命,以及热生长 SiC/SiO<sub>2</sub>界面的陷阱类型。

## 1.1 SiC 材料基本特性

SiC 材料具有悠久的历史, Si-C 键的首次发现者是斯德哥尔摩 Karolinska 大学化学实验室的 Jöns Jakob Berzelius 教授<sup>[1,1]</sup>。1823 年, Berzelius 教授发现了一种未知的化合物, 并在这种化合物材料中发现了相等数量的 Si 原子和 C 原子。SiC 材料现在已经发展成为主要的宽带隙半导体材料之一, 主要表现在以下几个方面:

- 3 英寸 SiC 衬底材料已经可以用于商业用途。
- 避免晶格不匹配的 SiC 材料已经可以进行同质外延生长。
- n 型和 p 型 SiC 材料可以通过晶体生长掺杂或材料的离子注入实现。
- SiC 材料的氧化层可以通过在 Si 面或 C 面热生长获得。

SiC 材料具有优越的电学性能, 包括宽禁带[(2.3~3.3)eV]、高击穿电场[(0.8~3.0)×10<sup>6</sup>V/cm]、高饱和漂移速度(2×10<sup>7</sup>cm/s)和高热导率(4.9Wcm<sup>-1</sup>K<sup>-1</sup>)(参考表 1.1 和参考文献[1, 2]), 这些特性可以使 SiC 器件工作在高温、高功率和高频特殊条件。

下面介绍 SiC 材料的性能(主要集中在与器件有关的特性): 禁带宽度、有效质量、热特性、浅施主/受主掺杂和自由载流子、杂质的扩散、杂质的导电性, 少数载流子寿命和 SiC/SiO<sub>2</sub> 界面特性, 这些特性对于金属-氧化物-半导体晶体管非常重要。表 1.1 给出了 3C-、6H-和 4H-SiC 多型的重要电学特性。

表 1.1 3C-、6H-和 4H-SiC 多型的重要电学特性

材料参数	3C	6H	4H
六角形比 $H^{\text{①}}$	0	0.33	0.5
室温(300K)间接带隙宽度 $E_G$ (eV)	2.35	3.08	3.28
室温(300K)晶格常数( $\text{\AA}$ ) <sup>②</sup> (a 轴晶向)	4.349	3.081	3.076
(c 轴晶向)	—	15.079	10.05
密度 $\rho$ (g/cm <sup>3</sup> )	3.21	3.21	3.21
击穿电场 $E_B$ (MV/cm)( $2.0 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$ 掺杂)	0.8	1	3
室温(300K)介电常数 $\epsilon_s$ (c 轴垂直方向)	9.72	9.66	9.76
(c 轴平行方向)	—	10.03	10.32
饱和电子漂移速度 $v_s$ ( $\times 10^7 \text{cm/s}$ )( $4.8 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$ 掺杂)	$2.7 \times 10^7$	$2 \times 10^7$	$2 \times 10^7$
热导率 $\kappa$ (Wcm <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )	4.9	4.9	4.9

注① 六角形比  $H = (\text{六角形晶格格点数}) / (\text{非对称晶格格点总数})$ 。

②  $\text{\AA}$ (埃)是半导体工艺中常用的长度单位,  $1\text{nm} = 10\text{\AA}$ 。

## 1.2 SiC 材料的多型体

SiC 材料的一个显著特点就是同质多型<sup>[1,3,1.4]</sup>,在垂直于 c 轴方向包括双层 Si-C 键(如图 1.1 所示)。根据堆垛次序不同,将立方型称为 3C-或  $\beta$ -SiC,六方结构标记为 2H-、4H-、6H-SiC 等,菱面体标记为 15R-、21R-、27R-SiC(如图 1.2 所示),虽然可以由 Laue Pattern 区分 200 多种不同的 SiC 多型体,将六方型和菱面体归结为  $\alpha$ -SiC。另外,立方和六方体中存在一些非平衡晶格,3C:立方位(k),4H:立方位(k)和六方位(h),6H:两个立方位( $k_1, k_2$ )和六方位(h)。六方体中由于 Kohn-Luttinger 效应<sup>[1,5]</sup>,导致存在于非平衡晶格位完全相同的施主杂质具有不同的离化能。纤锌矿型结构(2H-SiC)以虚线形式出现。制作器件最常用的 SiC 材料是 4H-、6H-和 3C 结构。

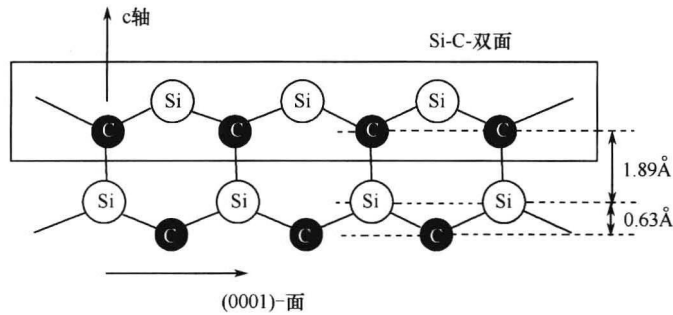


图 1.1 双层 Si-C 键结构:形成多型体的基本成分

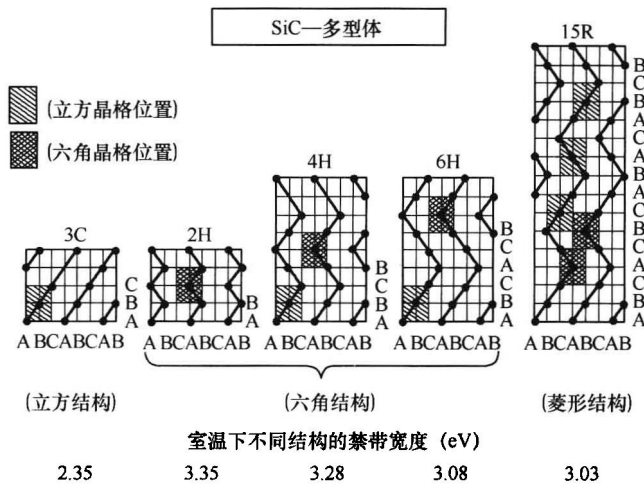


图 1.2 SiC 多型体:非平衡晶格位由阴影部分表示

## 1.3 SiC 能带结构和有效质量

虽然 SiC 化合物属于四面体结构,但是电子电荷密度  $n(r)$  的空间分布与共价半导体不同。Churcher 等人<sup>[1,6]</sup>指出价带电荷主要集中在 C 原子附近(如图 1.3 所示)。这种键的“电

离性”并不是因为 Si 和 C 原子价带电子差异产生,而是因为它们原子核之间的差异所致。

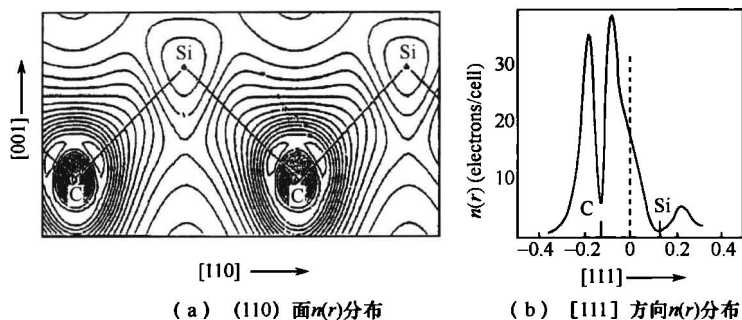


图 1.3 3C-SiC 电荷密度  $n(r)$

(C 格点位置和 Si 格点位置按照 Churcher 等人<sup>[1,6]</sup>的方法标注)

所有的 SiC 多型体都是间接带隙半导体,价带顶最大值位于布里渊区中点( $\Gamma$  点)。早期针对立方晶体的能带结构进行了研究<sup>[1,7,1,8]</sup>,由于 4H-和 6H-靠近布里渊区边缘的导带弱散射,所以并不清楚这些多型体导带最小值是位于布里渊区边缘还是位于内部其他位置。图 1.4 给出了 4H-SiC 的布里渊区及导带底最小值的可能位置(F 或 M),导带底最小值的数目很不相同( $M_c=12$  或  $M_c=3$ )。根据局部密度近似(LDA)的密度函数理论(DFT),六方 SiC 的从头计算结果与内部能带结果能够很好地吻合<sup>[1,9,1,10]</sup>。图 1.5 给出的 4H-SiC 能带结构,已经证明这三种多型体 SiC 材料的导带最小值正好位于布里渊区边缘(见表 1.2)。比较特别的是 6H-SiC 导带最低端存在大约 6meV 高度的“驼背”,从最小值到 M 和 L 的中点位置。但是 DFT-LDA 计算得到的导带和价带的能带差非常小,大约为 1eV。为了纠正带隙(见表 1.1),采用 GW 近似的准离子纠正方法。然而这种方法使得导带朝着价带相反的方向偏移,但是并不影响内部能带结构。Van Haeringen 等人<sup>[1,11]</sup>认为这种偏移的物理原因与 SiC 的多型体有关。而理论得到的能带结构与实验结果吻合非常好<sup>[1,9,1,10,1,12]</sup>。

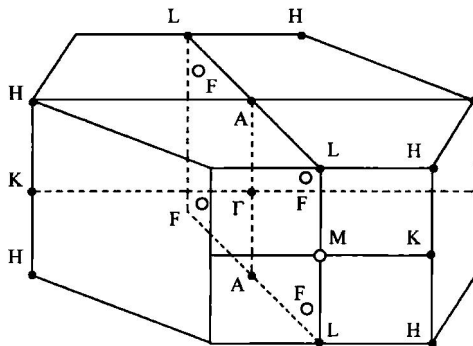


图 1.4 4H-SiC 布里渊区及导带底最小值的可能位置(F 或 M)

表 1.2 SiC 多型体布里渊区参数和能带结构

多形体	单元原子数	空间群	非对称格点数	对称导带	
				位置	数目
3C-SiC	2	$\Gamma_3^2$	1	X	3
6H-SiC	12	$C_{6v}^4$	3	U(L-M 连线上)	6
4H-SiC	8	$C_{6v}^4$	2	M	3

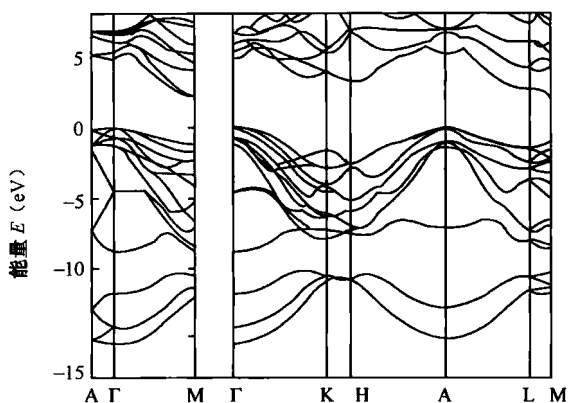


图 1.5 4H-SiC 的能带结构

经过 UV 二极管量子光谱所得长波截止波长,可以测得 6H-SiC 带隙在(295~673)K 温度范围内随温度的变化,即

$$\Delta E_G / \Delta T = -3.8 \times 10^{-4} \text{ eV/K}^{[1.13, 1.14]}$$

器件的电学特性主要受从杂质态通过热激发或者光激发进入导带的电子影响。这些电子态靠近导带边缘,它们的有效质量可以通过能带结构获得。表 1.3 对电子有效质量的理论值和实验值进行了比较<sup>[1.9, 1.15~1.20]</sup>。

表 1.3 3C-、6H-和 4H-SiC 的电子有效质量

多型体	理论电子有效质量( $m_0^{-1}$ )		多型体	实验电子有效质量( $m_0^{-1}$ )	
3C-SiC:			3C-SiC:		
$m_{\parallel X-\Gamma}$	0.68 <sup>[1.9]</sup>	0.70 <sup>[1.15]</sup>	$m_{\parallel X-\Gamma}$	0.667 <sup>[1.16]</sup>	0.67 <sup>[1.17]</sup>
$m_{\perp X-\Gamma}$	0.23	0.23	$m_{\perp X-\Gamma}$	0.247	0.22
6H-SiC:			6H-SiC:		
$m_{\parallel M-\Gamma}$	0.75	0.78	$m_{\perp}$	0.35 <sup>[1.18]</sup>	0.42 <sup>[1.19]</sup>
$m_{\parallel M-K}$	0.24	0.23	$m_{\parallel}$	1.4	2.0
$m_{M-L}$	1.83	1.2~2.0			
4H-SiC:			4H-SiC:		
$m_{M-\Gamma}$	0.57	0.66	$m_{M-\Gamma}$	0.58 <sup>20</sup>	
$m_{M-K}$	0.28	0.31	$m_{M-K}$	0.31	
$m_{M-L}$	0.31	0.30	$m_{M-L}$	0.33	

实验获得空穴有效质量如下。

3C-SiC:  $m_h = 0.45m_0$ <sup>[1.21]</sup>

6H-SiC:  $m_{h\parallel} = 1.85m_0$ ,  $m_{h\perp} = 0.66m_0$ <sup>[1.22]</sup>

4H-SiC:  $m_{h\parallel} = 1.75m_0$ ,  $m_{h\perp} = 0.66m_0$ <sup>[1.23]</sup>

参考文献<sup>[1.21]</sup>数据由高场共振所得,参考文献<sup>[1.22]</sup>和<sup>[1.23]</sup>数据通过光方法检测共振获得。

对霍尔效应获得的自由电子空穴浓度随温度变化的方程进行最小平方拟合,以及通过电



子器件进行仿真,必须知道导带  $m_e^d$  和价带  $m_h^d$  的态密度有效质量。根据表 1.3 给出的有效质量,3C-SiC 中  $m_e^d$  由下式决定:

$$m_e^d = (m_{\perp}^2 m_{\parallel})^{1/3} = 0.35m_0$$

Wellenhofer 和 Rössler<sup>[1.9]</sup>对 4H 和 6H 中  $m_e^d$  和  $m_h^d$  随温度的变化进行了计算(见图 1.6 和图 1.7)。4H-SiC 结构中, $T=0$  时能带边缘值从  $m_e^d=0.394m_0$  开始,并且因为导带的二次占据而逐渐增加,见图 1.6(a)。图 1.6(b)观察到的峰值是因“驼背”结构产生的。在图 1.7 (a)和(b)中  $m_h^d$  随温度的变化相似,低温下, $m_h^d$  由价带最顶端  $\Gamma$  点的能带边缘曲线曲率决定,并且因更大的  $k$  矢量随温度升高而趋于饱和。

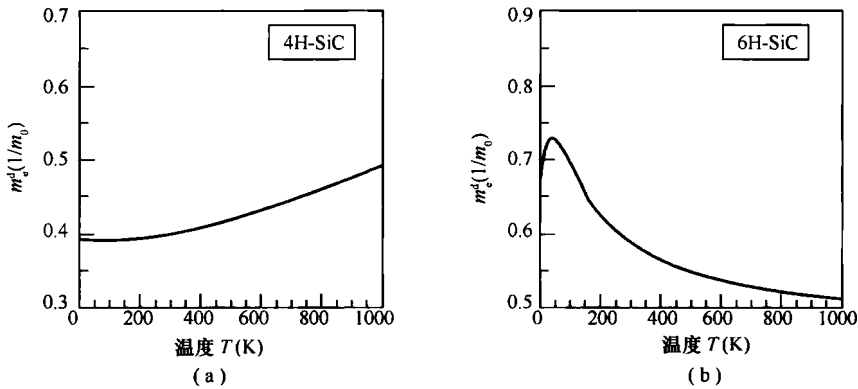


图 1.6 电子态密度有效质量与温度的关系

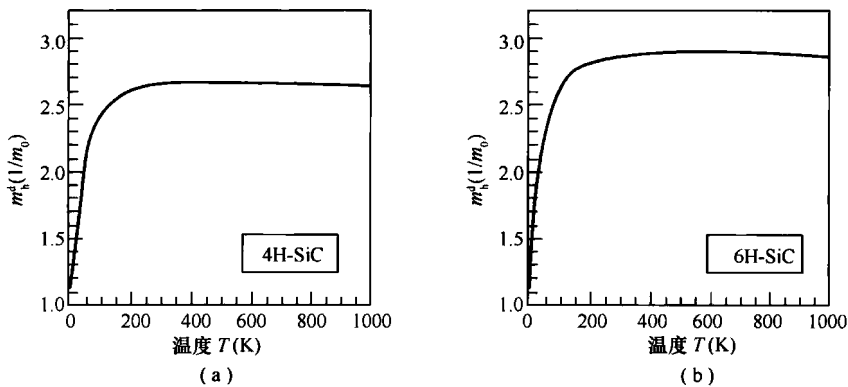


图 1.7 空穴态密度有效质量与温度的关系

## 1.4 SiC 材料的热特性

Nilsson 等人<sup>[1.24]</sup>对 6H-SiC 的热容进行了测量,如图 1.8 所示。对于器件制造过程,热膨胀和热导率是两个非常重要的物理量。尤其当 SiC 材料作为衬底材料或者异质外延层在材料系统处于高/低温循环工作时,材料的热膨胀显得尤其重要。由于 SiC 材料具有高热导率(比铜高 70%),所以可以作为热沉或散热材料。

参考文献[1.25~1.27]对垂直于  $c$  轴( $\alpha_{11}$  轴)和平行于  $c$  轴( $\alpha_{33}$  轴)的 SiC 材料热膨胀系数进行了测试。图 1.9 给出了 3C-、4H-和 6H-SiC 在  $\alpha_{11}$  和  $\alpha_{33}$  轴向热膨胀系数在 20~1000°C 范