



P 掺杂 4H-SiC 超晶胞的第一性原理计算

史茹倩^{1,2}, 吴 一^{1,2}, 刘 红^{1,2}, 刘晨吉^{1,2}, 郑树凯^{1,2,3}, 王晓媛⁴

- (1. 河北大学 电子信息工程学院, 保定 071002;
2. 河北大学 计算材料与器件模拟研究中心, 保定 071002;
3. 河北大学 河北省数字医疗工程重点实验室, 保定 071002;
4. 中国工程物理研究院 总体工程研究所, 绵阳 621900)

摘 要: 采用基于密度泛函理论的第一性原理平面波超软赝势方法, 计算本征以及 P 替位式掺杂, P 间隙式掺杂 4H-SiC 的晶格常数、能带结构、态密度、载流子浓度和电导率。结果表明: P 掺杂减小了 4H-SiC 的禁带宽度, 其中 P 替位 C 原子掺杂的禁带宽度最小。替位式掺杂导致 4H-SiC 的费米能级进入导带, 使其成为 n 型半导体, 间隙式掺杂使 4H-SiC 的费米能级接近导带并在其禁带中引入杂质能级。替位式掺杂后, 4H-SiC 的自由电子主要存在于导带底, 而间隙式掺杂 4H-SiC 中除了导带底外, 禁带中的杂质能级也提供了自由电子, 因此, 电子浓度大幅度增加。掺杂 4H-SiC 的载流子迁移率主要由中性杂质对电子的散射决定, 较本征态的大幅度降低。通过计算 4 种体系的电导率可知, P 替位 Si 原子掺杂 4H-SiC 的电导率最大, 导电性最好。

关键词: 4H-SiC; P 掺杂; 第一性原理; 电导率

中图分类号: O64

文献标志码: A

First-principles calculations of P doped 4H-SiC supercell

SHI Ru-qian^{1,2}, WU Yi^{1,2}, LIU Hong^{1,2}, LIU Chen-ji^{1,2}, ZHENG Shu-kai^{1,2,3}, WANG Xiao-yuan⁴

- (1. College of Electronic and Informational Engineering, Hebei University, Baoding 071002, China;
2. Research Center for Computational Materials and Device Simulations, Hebei University, Baoding 071002, China;
3. Key Laboratory of Digital Medical Engineering of Hebei Province, Hebei University, Baoding 071002, China;
4. Institute of Systems Engineering, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China)

Abstract: The lattice parameters, band structures, density of states, carrier concentrations and electrical conductivities of pure 4H-SiC, P substitutional doped, and P interstitial doped 4H-SiC were calculated using the plan-wave ultra-soft pseudo-potential method based on the density functional theory. The results indicate that the P doping decreases the forbidden band widths of 4H-SiC, and the P substituted for C doped 4H-SiC shows the narrowest band gap. Substitutional doping makes the Fermi energy level introduces into the conduction band of 4H-SiC, and the 4H-SiC becomes an n-type semiconductor. Interstitial doping makes the Fermi energy level near the conduction band of 4H-SiC and introduces impurity energy levels into the forbidden band. The electrons of substitutional doped 4H-SiC mainly exist at the bottom of the conduction band. While the impurity energy levels in the forbidden band also provides electrons except those existing at the bottom of the conduction band of interstitial doped 4H-SiC, so, the electron concentration increases significantly. The carrier mobility of the doped 4H-SiC is mainly depending on the neutral impurity scattering and decreases significantly comparing to the intrinsic state. Through the calculations of the electrical conductivities of the four systems, it is found that the electrical conductivity of 4H-SiC with P substituted for Si is the biggest, and the 4H-SiC shows the best conductivity.

Key words: 4H-SiC; P doping; first-principles; electrical conductivity

基金项目: 国家留学基金资助项目([2014]3012); 国家级大学生创新训练资助项目(201410075002)

收稿日期: 2014-10-27; **修订日期:** 2015-03-13

通信作者: 郑树凯, 副教授, 博士; 电话: 0312-5079368; E-mail: zhshk@126.com

随着社会信息化需求和现代电子技术的迅速发展,越来越多的领域(如航天、航空、军事、石油勘探、核能、通讯等)迫切地需要能够在 250~600 °C 的高温环境下工作的电子器件。这些电子器件的材料主要有第一代半导体材料(Si、Ge)和第二代化合物半导体材料(GaAs、GaP 和 InP 等),但由于受材料性能所限,这些材料制备的电子器件大都只能在 200 °C 以下环境中工作,并且在抗辐射和高击穿电压性能等方面都不能完全满足现代电子技术发展的要求^[1-4]。而以 SiC、GaN、金刚石为代表的第三代半导体材料由于具有禁带宽度大、击穿场强高、电子饱和漂移速度高、抗辐射能力强等特点,使其在光电器件、高频大功率器件、高温电子器件等方面备受青睐。但是,金刚石膜很难实现 n 型材料,所以其应用受到限制;而开发 GaN 器件也存在衬底问题,目前,还不能制备 GaN 晶体,只能制备 GaN 薄膜。因此, SiC 成为最具竞争力的电子器件材料,其导热性比 GaN 高,对改善大功率器件的温度特性大有好处,以 SiC 制备光电器件、高温电子器件等更具优势^[5]。

SiC 具有 250 种同型异构体,最常见的有 3C-SiC、4H-SiC 和 6H-SiC,其中 4H-SiC 是纤锌矿结构,在 3 种常用的晶型中带隙最宽,电子迁移率最高,微管道缺陷密度也较低。实验中科研工作者对 n 型 4H-SiC 进行了深入研究,并将这些研究成果应用于实际生产中。如 Purdue 大学在 n 型 4H-SiC 外延层上注入硼形成 p^- 阱,注入氮形成 n^+ 源和漏区,制成 SiC 横向金属-氧化物-半导体场效应管(MOSFET),其阈值电压为 6V,漏-源阻断电压为 2.6 kV,相当于以前任何 SiC 功率开关器件的 2 倍。Northrop Grumman 公司也制成了 4H-SiC MOSFET,带隙为 2.85 eV,漏电流很小,可在 400 °C 高温下工作^[6]。2004 年, WU 等^[7]研制了基于 4H-SiC 材料的混合 PIN 与肖特基(MPS)二极管,耐压达 900 V,远高于同类硅器件(600 V)。2007 年 5 月份, Cree 公司推出零微管缺陷,直径为 100 mm 的 n 型 4H-SiC 导电衬底^[8]。

随着微电子技术进步,近年来已制备出越来越多的高品质 4H-SiC 器件。日本东芝公司在 2008 年报道了接近材料极限水平的超级肖特基势垒二极管(Super-SBD),该器件采用浮空结技术获得 $2.57 \text{ m}\Omega\cdot\text{cm}^2$ 超低导通电阻和 2.7 kV 阻断电压^[8]。同年, ZHANG 等^[9]制造出了采用外延生长的双层基区结构 4H-SiC 双极型晶体管(BJT),它的击穿电压高达 1300 V,共射极电流增益为 31,具有良好的可靠性,开启电压的漂移小于 2%。2011 年, MIYAKE 等^[10]制造出增益高达 253 和 357 的 4H-SiC BJT,这是目前

4H-SiC 公开报道研发的较高水平。对于 4H-SiC 材料,以上多是通过注入氮离子制备 n^+ 区, Al 和 C 离子共同注入制备 p^- 区。

近年来, IKEDA 等^[11]将 4H-SiC 液浸于磷酸中,使用准分子激光照射对其进行磷掺杂,与液浸于纯水相比, P 掺杂 4H-SiC 电阻减小,实验得到的材料载流子迁移率为 $295 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ 。该实验中, P 掺杂 4H-SiC 存在良好的 n 型导电性,使 P 掺杂制备 n^+ 区成为可能,但文中并未对相关结果进行深入的理论分析。因此,本文作者利用基于密度泛函理论的第一性原理对 P 替位 Si、P 替位 C 和 P 处于间隙位置时的掺杂 4H-SiC 进行了电子结构计算,从计算结果进一步解析掺杂后材料迁移率、电导率等性质变化原理,以期对 P 掺杂 4H-SiC 的进一步发展提供一定理论依据。

1 计算模型

SiC 的基本结构单元是每个 Si 原子分别和 4 个 C 原子成键,构成正四面体结构, Si 原子位于四面体中心, 4 个 C 原子分别位于四面体的 4 个顶角。SiC 多形体就是由这些基本的结构单元在空间密排堆垛而成。4H-SiC 属于六方晶系空间群 $P6_3m$, 4H 代表由 4 层 Si-C 为一周期排列的六角结构。本文作者在 $5\times 5\times 1$ 的 4H-SiC 超晶胞中分别用 P 替位 Si, P 替位 C, 形成原子数为 200 的 $\text{Si}_{100}\text{PC}_{99}$ 、 $\text{Si}_{99}\text{PC}_{100}$ 结构,以及原子个数为 201 的 P 间隙掺杂 4H-SiC 超晶胞。掺杂浓度为 $4.8\times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, 属于高掺杂(当掺杂浓度大于 $3\times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 时被认为是高掺杂的半导体^[12])。其中,间隙式掺杂如图 1 所示。

文中计算均由 CASTEP 软件包完成^[13],该软件是

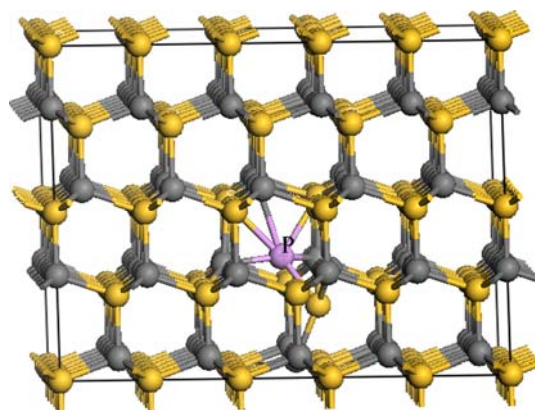


图 1 间隙 P 掺杂 4H-SiC 超晶胞结构

Fig. 1 Structural model of interstitial P doped 4H-SiC supercell

基于密度泛函方法的从头算量子力学程序, 在晶体周期性势场中, 采用周期性边界条件, 将多电子体系用平面波基组展开。离子实与价电子之间的相互作用势由超软赝势来描述, 电子间相互作用的交换关联势由广义梯度近似(GGA)下的 PBE 方案处理^[14]。平面波的截止能量选择为 280 eV, 能量收敛标准设为每原子 1×10^{-5} eV, 第一布里渊区按 $2 \times 2 \times 2$ 进行分格, 对能带结构、态密度等进行计算, 参与计算的价电子为 C $2s^2 2p^2$ 、Si $3s^2 3p^2$ 和 P $3s^2 3p^3$ 。所有计算均在倒易空间中进行。

2 计算结果与讨论

2.1 结构优化

表 1 所列为不同掺杂形式下 4H-SiC 相应模型结构优化结果。表 1 显示, 实验上获得的本征 4H-SiC 的晶格常数与计算得到的 4H-SiC 结构优化后的参数较接近, 说明本研究所选择的模型和计算结果可靠。

表 1 掺杂前后 4H-SiC 超晶胞参数

Table 1 Structural parameters of 4H-SiC before and after doping

System	a/nm	c/nm	Lattice volume/nm ³
Experimental result ^[15]	1.2324	1.0084	—
Intrinsic	1.5455	1.0127	2.0945
P substituting Si	1.5443	1.0120	2.0924
P substituting C	1.5480	1.0145	2.1071
Interstitial doping	1.5512	1.0161	2.1136

不同形式掺杂均造成 4H-SiC 晶格的畸变。与本征 4H-SiC 相比, P 原子替位 Si 时 4H-SiC 晶格常数和体积减小, 替位 C 时则增大。这是因为 P 原子半径(100pm)小于 Si 原子半径(110pm), 大于 C 原子半径(70pm)。当 P 原子位于晶格间隙位置时, 由于体系额外多了一个原子, 4H-SiC 晶格畸变程度较 P 替位 Si 和 C 时更加明显。

2.2 形成能

形成能反映了体系的稳定性, 其值越小, 体系将越稳定。掺杂体系形成能 ΔE ^[16]由下式给出:

$$\Delta E = E' - E_0 - E_p + E_{C(Si)}$$

式中: E' 是含一个杂质原子的超晶胞体系总能量; E_0 为本征超晶胞总能量; E_p 和 $E_{C(Si)}$ 分别为掺杂原子和被替位原子的能量。各种掺杂体系下形成能如表 2 所列。

表 2 不同掺杂形式下形成能

Table 2 Formation energy under different doping conditions

Doped system	Formation energy/eV
P substitutes Si	-3.26
P substitutes C	-2.54
Interstitial doping	3.32

一般形成替位式杂质时, 要求替位式杂质原子的大小与被取代的晶格原子的大小比较相近, 还要求它们的价电子壳层结构比较接近^[12]。P 原子与 Si 原子电子层数一样且属于 V 族元素, 所以 P 原子更容易取代 Si 原子位于晶格点处。间隙式掺杂形成能最高, 故而间隙式 P 掺杂 4H-SiC 很难形成。

2.3 能带结构与态密度

图 2 所示为 4H-SiC 掺杂前后沿第一布里渊区高对称方向的能带结构图, 图中始终将电子能够填充的最高能级作为能量零点。图 2(a)显示, 本征 4H-SiC 的价带顶位于布里渊区的 G 点, 导带底位于布里渊区的 F 点, 为间接带隙半导体, 禁带宽度为 2.215 eV, 较实验值^[17](3.27 eV)偏小。这是由于 GGA 方法低估了模型中激发电子间的交换-关联能, 禁带宽度被低估造成的, 但作为一种有效的近似方法, 计算结果的相对值是非常准确的, 不影响对能带和态密度的分析^[18]。

图 2(b)和(c)所示分别为 P 替位 Si、C 原子后 4H-SiC 的能带结构图, 与未掺杂 4H-SiC 相比, P 掺杂导致导带和价带中产生杂质能带。掺入的 P 原子产生了可提供电子的施主能级, 在导带底附近产生电子, 使导带底与价带顶下移, 费米能级进入导带, 形成 n 型掺杂, 半导体发生简并, 体系呈现金属性。这两种掺杂形式都增加了电子可占据能级的数量, 增大了载流子浓度。不同的是 P 替代 C 原子较替代 Si 原子导致禁带宽度减小幅度更大。

P 间隙式掺杂 4H-SiC 的能带结构如图 2(d)所示。相较于本征 4H-SiC, 它们的导带与价带结构相似, 但其带隙略减小, 禁带中引入杂质能级, 费米能级靠近导带且穿过一条杂质能级。该杂质能级上的杂质部分电离, 产生电子。P 作为间隙式杂质使 4H-SiC 产生了两条位于费米能级下的杂质能级, 在 n 型 4H-SiC 中, 费米能级接近导带, 电子基本上填满了杂质能级, 即 P 接受电子成为 P^- , 所以, 在 n 型 4H-SiC 中, 主要是这两条位于费米能级下的受主能级起作用。

图 3 所示为掺杂前后 4H-SiC 的分态密度图。由于掺杂原子对邻近原子态密度影响较大, 因此, 取邻

近掺杂原子的 C 原子和 Si 原子与掺杂原子进行对比。对本征 4H-SiC 而言, 价带顶主要由 Si 的 3p 态和 C 的 2p 态构成, 而导带底主要是 Si 的 3p 轨道贡献的。另外, 在-15~-10 eV 处存在的能带由 Si 的 sp 轨道杂

化后与 C-2s 共同作用形成。

图 3(b)和(c)所示为 P 替位 Si 和 P 替位 C 时 4H-SiC 中各元素的分态密度图。P 替位 Si 时, 在-17 和-10 eV 出现了两个 P 3s 峰, 由于占据 P 3s 态的电子位于 P

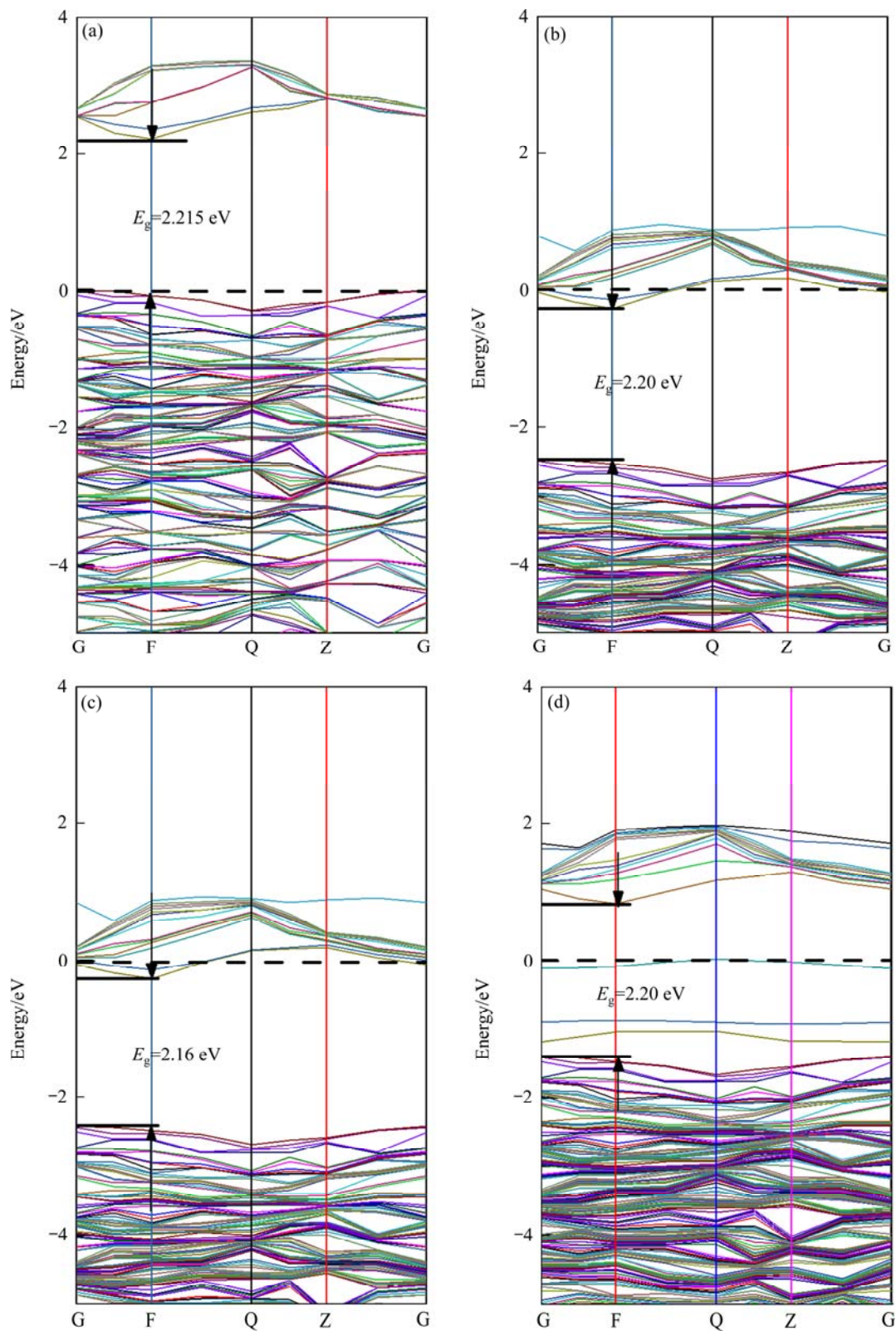


图 2 4H-SiC 的能带结构

Fig. 2 Band structures of 4H-SiC: (a) 4H-SiC; (b) P substituting Si; (c) P substituting C; (d) Interstitial doping

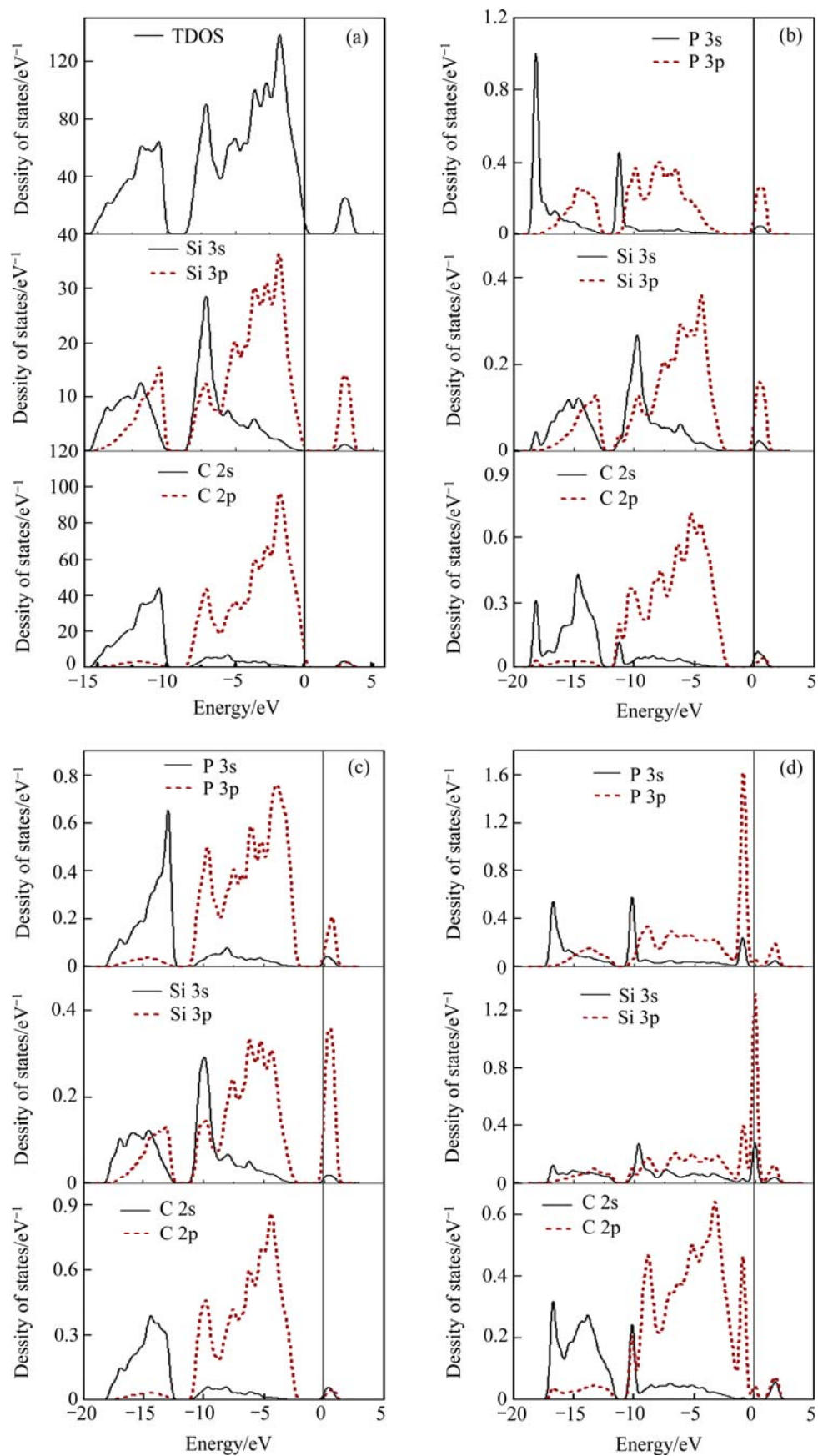


图3 4H-SiC 的态密度

Fig. 3 DOS of 4H-SiC: (a) 4H-SiC; (b) P substituting Si; (c) P substituting C; (d) Interstitial doping

的内层轨道上,呈现出较强的局域性,因此,不参与成键。P 3p 态低能端和 Si 3p 态、C 2p 态轨道杂化构成价带,增加了价带电子态密度。P 3p 态高能段在导带中形成可提供电子的施主能级,在导带底附近产生了电子,使费米能级进入了导带,可增加 4H-SiC 的电导率。P 替位 C 原子时,从图 3(c)中可以看出, P 原子使邻近 Si 原子在费米能级以上的 3p 态态密度较本征时增加 1 倍,但是对邻近 C 原子的影响不大,导带中的杂质能带主要由 Si 3p 态提供。

图 3(d)显示, P 以间隙式杂质存在时对邻近原子态密度影响很大。从图 3(d)中可以看出, P 3p 态主要作用于 -0.3~-1.5 eV 区域,即费米能级下的杂质能级由 P 3p 态提供。同时 P 3p 态分为两部分,一部分在 -1.5 eV 附近,一部分在 2 eV 附近,这两部分分别与 Si 3p 态作用,使 Si 3p 态也分裂为两部分,由此产生禁带。费米能级处的 Si 3p 态电子密度幅度增大,产生与费米能级相交叠的能级,从而可以影响电子在各量子态之间的跃迁。

2.4 迁移率与电导率

半导体中存在两种载流子,即带正电的空穴和带负电的电子。在一块均匀半导体两端加以电压,半导体内部形成电场,两种载流子形成的电流都是沿着电场方向,导电的电子是在导带中,而导电的空穴是在价带中,空穴电流实际上是代表了共价键上的电子在价键间运动时所产生的电流。因而,半导体中的导电作用应该是电子导电和空穴导电的总和^[12]。对于两种载流子的浓度相差很悬殊而迁移率差别不太大的杂质半导体来说,其电导率主要取决于多数载流子。

在恒定电场下,载流子可以保持一个稳定的漂移速度,这是因为载流子在运动过程中不断受到散射的结果。4H-SiC 的散射机制包括光学散射、电离杂质散射、导带中中性杂质对电子的散射、载流子之间的散射。通过计算各散射机制下载流子的平均自由时间来确定掺杂 4H-SiC 载流子迁移率主要由某一种或若干种散射作用较强的散射机制决定。光学散射机制下的电子平均自由时间 τ_{opt} ^[19]可表示为

$$\tau_{\text{opt}} = \frac{\mu_n m_e}{e} \quad (1)$$

电离杂质散射机制下的电子平均自由时间 τ_{ion} 表示为

$$\tau_{\text{ion}} = \frac{8\pi(m_e^* \epsilon_0 \epsilon_s)^2 v^3}{n_{\text{ion}} e^4 \ln \left[1 + \left(\frac{2\pi m_e^* \epsilon_0 \epsilon_s v^2}{n_{\text{ion}}^{\frac{1}{3}} e^2} \right)^2 \right]} \quad (2)$$

中性杂质散射机制下的电子平均自由时间 τ_{neu} 表示为

$$\tau_{\text{neu}} = \frac{e^2 m_e^{*2}}{80\pi \epsilon_0 \epsilon_s \hbar^3 n_D} \quad (3)$$

载流子间散射机制下的电子平均自由时间 τ_{car} 表示为

$$\tau_{\text{car}} = \frac{\left(n_{\text{ion}}^{\frac{1}{3}} e^2 + 2\pi m_e^* \epsilon_0 \epsilon_s v^2 \right)^2}{\sqrt{2} n_{\text{ion}} e^4 v} \quad (4)$$

电子平均自由时间 τ_n 与各散射机构单独作用时平均自由时间之间满足如下关系:

$$\frac{1}{\tau_n} = \frac{1}{\tau_{\text{opt}}} + \frac{1}{\tau_{\text{ion}}} + \frac{1}{\tau_{\text{neu}}} + \frac{1}{\tau_{\text{car}}} \quad (5)$$

式中: μ_n 为电子迁移率; m_e 、 m_e^* 分别为本征、掺杂 4H-SiC 电子有效质量; ϵ_0 为真空介电常数; ϵ_s 为 4H-SiC 介电常数; v 为热运动电子速度; $\hbar$ 为约化普朗克常数; 掺杂浓度 N_D 等于施主能级上电子浓度 n_D 与电离施主浓度 n_{ion} 相加。以 P 替位 Si 掺杂 4H-SiC 为例,该掺杂形式下电子为多数载流子,通过电子的平均自由时间判断散射机制强弱。

计算得到的不同散射机制下不同形式掺杂 4H-SiC 中电子的平均自由时间如表 3 所示。计算结果显示,常温下,中性杂质散射机制下电子的平均自由时间较短。由于平均自由时间越短,散射概率越大,对迁移率影响也就越大,所以,掺杂后 4H-SiC 的电子迁移率主要由中性杂质对电子的散射决定。根据电子的平均自由时间求载流子迁移率 μ_n :

$$\mu_n = \frac{e \tau_n}{m_e^*} \quad (6)$$

本征 4H-SiC 中不存在杂质,所以主要受光学散射影响,常温 300 K 下电子和空穴的迁移率分别取 480 和 50 cm²/(V·s)^[19],电导率(σ_i)为

$$\sigma_i = nq\mu_n + pq\mu_p \quad (7)$$

由于 P 掺杂 4H-SiC 为 n 型半导体,载流子浓度 $n \gg p$,空穴对电流的贡献可以忽略,电导率为

$$\sigma = nq\mu_n \quad (8)$$

式中: n 为电子浓度; p 为空穴浓度; q 为载流子电量; μ_p 为空穴迁移率。

计算得到的不同 P 掺杂形式下 4H-SiC 中载流子浓度及电导率如表 4 所示。由表 4 可知,由于替位式掺杂 4H-SiC 的费米能级进入导带,属于 n 型掺杂,

表 3 各散射机制下的电子平均自由时间

Table 3 Average free time under different scattering mechanisms

Mechanism	τ_{opt}	τ_{ion}	τ_{neu}	τ_{cor}	τ_{n}
P substituting Si	1.7×10^{-13}	1.3×10^{-14}	1.3×10^{-15}	2.3×10^{-14}	1.12×10^{-15}
P substituting C	—	1.5×10^{-14}	1.3×10^{-15}	2.8×10^{-14}	1.15×10^{-15}
Interstitial doping	—	1.5×10^{-14}	1.5×10^{-15}	2.9×10^{-14}	1.30×10^{-15}

表 4 各体系下载流子浓度及电导率

Table 4 Carrier concentration and electrical conductivity of different systems

System	n/cm^{-3}	p/cm^{-3}	$\mu_{\text{n}}/(\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	Electrical conductivity/S
Intrinsic	6.35×10^{17}	1.58×10^{17}	480	50.03
P substituting Si	1.084×10^{21}	0	2.68	464.8
P substituting C	1.06×10^{21}	0	2.61	442.7
Interstitial doping	0.53×10^{21}	2.54×10^{18}	2.69	228.1

所以计算得出的空穴浓度近似为 0。同时, 由于半导体发生简并, 体系呈现金属性, 电子浓度较未掺杂前有大幅度提高。间隙式掺杂 4H-SiC 空穴主要由费米能级下的受主能级提供, 即 P 3p 态和 Si 3p 态的共同作用。由于间隙式掺杂施主能级与费米能级重合, 施主杂质部分电离, 所以间隙式掺杂 4H-SiC 的电子浓度小于替位式掺杂 4H-SiC 的电子浓度。

由于实验片材表面磷掺杂浓度 $5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 为低掺杂^[11], 而本研究中的计算为重掺杂情况的计算, 导致计算得到的 P 掺杂后 4H-SiC 的载流子迁移率远小于实验值($295 \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$), 但本研究是在相同条件下进行的计算, 计算结果并不会影响对问题的定性讨论。由计算结果可知, 在重掺杂的条件下, 施主能级扩展成杂质能带, 导致禁带变窄, 导带中运动的电子除受到散射外, 还会不断被施主能级俘获, 再释放, 再俘获, 使得电子漂移速度减慢。此外, 导带中有相当一部分电子在杂质带上运动, 从而使电子迁移率降低。但是与本征 4H-SiC 相比, 掺杂后材料的电导率有所提高, 这主要是由于掺杂使材料性质发生变化, 引入大量载流子所致。两种替位式掺杂 4H-SiC 的电导率相近, 而间隙式掺杂 4H-SiC 的电导率小于替位式掺杂 4H-SiC 的电导率。

3 结论

1) 不同形式的 P 掺杂使 4H-SiC 晶格出现畸变, 禁带宽度略减小。其中, 替位式 P 掺杂使 4H-SiC 的

费米能级进入导带, 间隙式 P 掺杂使 4H-SiC 的费米能级接近导带, 掺杂后 4H-SiC 成为 n 型半导体。

2) 不同形式的 P 掺杂 4H-SiC 的载流子迁移率主要由中性杂质对电子的散射决定。

3) 与未掺杂的 4H-SiC 相比, P 掺杂大大增加了电子浓度, 因此, 掺杂提高了材料的电导率。间隙式 P 掺杂 4H-SiC 的施主能级与费米能级重合, 施主杂质部分电离, 掺杂电子浓度小于替位式 P 掺杂 4H-SiC 的电子浓度, 导致间隙式 P 掺杂 4H-SiC 的电导率小于替位式 P 掺杂 4H-SiC 的电导率。

致谢:

感谢河北大学刘保亭教授为本文提供 CASTEP 软件并参与计算结果的讨论。本文得到《河北大学中西部高校提升综合实力工程》专项经费支持。

REFERENCES

[1] WANG De-yin, SONG Yong-cai, LI Yong-qiang. Effect of composition and structure on specific resistivity of SiC fibers[J]. Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 2012, 22(5): 1133-1139.

[2] HIGURASHI E, OKUMURA K, NAKASUJI K, SUGA T. Surface activated bonding of GaAs and SiC wafers at room temperature for improved heat dissipation in high-power semiconductor lasers[J]. Japanese Journal of Applied Physics, 2015, 54(3): 030207.

[3] GILARDI G, YAO W M, RABBANI HAGHIGHI H, LEIJTENS X J M, SMIT M K. Deep trenches for thermal crosstalk reduction in InP-based photonic integrated circuits[J]. Journal of

- Lightwave Technology, 2014, 32(24): 4262–4268.
- [4] KHEMKA V, CHOW T P, GUTMANN R J. Voltage Handling Capability and Microwave Performance of a 4H-SiC MESFET-A Simulation Study[J]. Materials Science Forum, 1997, 264: 961–964.
- [5] WU J, LI M, JIANG Y, LI J J, ZHANG Y, GAO H, LI X B, DU J F, ZOU X H, FAN X Q, GAN L, PENG C, LU Y, LEI J R. Performance of a 4H-SiC Schottky diode as a compact sized detector for neutron pulse form measurements[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A, 2015, 771: 17–20.
- [6] 盛柏桢, 程文芳. 碳化硅器件及其应用[J]. 电子元件应用, 2001, 3(5): 19–23, 28.
SHENG Bai-zhen, CHENG Wen-fang. Silicon carbide device and its application[J]. Electronic Component & Device Applications, 2001, 3(5): 19–23, 28.
- [7] WU J, FURSIN L, LI Y, ALEXANDROV P, ZHAO J H. A4308V, 20.9 mΩ·cm² 4H-SiC MPS diodes based on a 30 μm drift layer[J]. Materials Science Forum, 2004, 457/460: 1109–1112.
- [8] 张波, 邓小川, 张有润, 李肇基. 宽禁带半导体 SiC 功率器件发展现状及展望[J]. 中国电子科学研究院学报, 2009, 4(2): 111–118.
ZHANG Bo, DENG Xiao-chuan, ZHANG You-yun, LI Zhao-ji. Development status and prospect of wide band gap semiconductor SiC power devices[J]. Journal of China Academy of Electronics and Information Technology, 2009, 4(2): 111–118.
- [9] ZHANG Jian-hui, LI Xue-qing, ALEXANDROV P, BURKE T, ZHAO J H. Implantation-free 4H-SiC bipolar junction transistors with double base epilayers[J]. IEEE Electron Device Letters, 2008, 29(5): 471–473.
- [10] MIYAKE H, KIMOTO T, SUDA J. 4H-SiC BJTs with record current gains of 257 on (0001) and 335 on (000 $\bar{1}$)[J]. IEEE Electron Device Letters, 2011, 32(7): 841–843.
- [11] IKEDA A, NISHI K, IKENOUE H, ASANO T. Phosphorus doping of 4H-SiC by liquid immersion excimer laser irradiation[J]. Applied Physics Letters, 2013, 102(5): 052104.
- [12] 刘恩科, 朱秉升, 罗晋生. 半导体物理学[M]. 北京: 电子工业出版社, 2011: 86.
LIU En-ke, ZHU Bing-sheng, LUO Jin-sheng. The physics of semiconductors[M]. Beijing: Electronics Industry Press, 2011: 86.
- [13] CLARK S J, SEGALL M D, PICKARD C J, HASNIP P J, PROBERT M J, REFSON K, PAYNE M C. First principles methods using CASTEP[J]. Z Kristallogr, 2005, 220(5/6): 567–570.
- [14] PERDEW J P, BURKE K, ERNZERHOF M. Generalized gradient approximation made simple[J]. Physical Review Letters, 1996, 77: 3865–3868.
- [15] BAUER A, KRÄUBLICH J, DRESSLER L, KUSCHNERUS P, WOLF J, GOETZ K, KÄCKELL P, FURTHMÜLLER J, AND BECHSTEDT F. High-precision determination of atomic positions in crystals: The case of 6H- and 4H-SiC[J]. Physical Review B, 1998, 57(5): 2647–2650.
- [16] 王欣, 王发展, 雷哲锋, 王博, 马姗, 王哲, 吴振. N-M(Cd, Mg)共掺闭口氧化锌纳米管场发射第一性原理研究[J]. 物理学报, 2013, 62(12): 123101.
WANG Xin, WANG Fa-zhan, LEI Zhe-feng, WANG Bo, MA Shan, WANG Zhe, WU Zhen. N-M(Cd,Mg)-codoped closed zinc oxide nanotube field emission research first principle[J]. Acta Physica Sinica, 2013, 62(12): 123101.
- [17] JIANG Z Y, XU X H, WU H S, ZHANG F Q, JIN Z H. Ab initio calculation of SiC polytypes[J]. Solid State Communications, 2002, 123: 263–266.
- [18] 吴国浩, 郑树凯, 刘磊, 贾长江. W-S 共掺杂锐钛矿 TiO₂ 第一性原理研究[J]. 物理学报, 2012, 61(22): 223101.
WU Guo-hao, ZHENG Shu-kai, LIU Lei, JIA Chang-jiang. First principles study on W-S Co-doped anatase titanium dioxide[J]. Acta Physica Sinica, 2012, 61(22): 223101.
- [19] 王君君. 氮和磷掺杂对 3C-SiC 光学性质的影响[D]. 秦皇岛: 燕山大学, 2010.
WANG Jun-jun. Effect of nitrogen and phosphorus doping on the optical properties of 3C-SiC[D]. Qinhuangdao: Yanshan University, 2010.

(编辑 李艳红)