

[文章编号] 1004- 0609(2002)S1- 0083- 04

# 拓扑法计算硅/碳化硅材料的电阻率<sup>①</sup>

李世斌<sup>1</sup>, 吕振林<sup>2</sup>, 高积强<sup>1</sup>, 金志浩<sup>1</sup>

(1. 西安交通大学 金属材料强度国家重点实验室, 西安 710049;  
2. 西安理工大学 材料科学与工程学院, 西安 710048)

[摘要] 用拓扑关系将硅/碳化硅材料转化为具有 3 个不同显微结构单元的整体, 建立了等效电路, 结合相关试验, 计算了不同显微组织的硅/碳化硅材料的电阻率。得到的理论计算结果与实验值的综合相对误差仅为 3.9%, 分析比较了各相含量和分布形态对硅/碳化硅材料整体电阻率的影响。结果表明, 提高低电阻率硅的体积含量和其分布连续性, 可降低材料的整体电阻率。该方法可用来预测要得到所需电阻率材料中应具有的硅含量和分布形态, 为确定制备材料的显微结构设计提供指导。

[关键词] 硅/碳化硅; 拓扑法; 电阻率

[中图分类号] TM 934. 1; X 563

[文献标识码] A

碳化硅陶瓷材料具有优异的高温强度、抗氧化性、抗热震性、低热膨胀系数、高导热系数和优异的半导体特性, 其使用温度可以达到 1 600 °C<sup>[1, 2]</sup>。碳化硅材料最早被用来制备高温电加热元件, 开创了碳化硅作为功能材料应用的先驱。

一种新型硅/碳化硅材料近年来得到了发展<sup>[3]</sup>, 这种材料的电阻率具有可设计性, 通过材料显微组织设计与调整, 可以得到预想的导电特性。本研究在有关试验工作的基础上, 通过拓扑法计算电阻率, 定量地确定了硅/碳化硅材料电阻率与硅含量的关系, 为材料的显微组织设计和制备工艺提供了有力依据。

## 1 实验方法

实验所用硅/碳化硅材料的密度为 2.74~ 2.98 g/cm<sup>3</sup>, 显气孔率小于 0.4%。试样表面经适当加工用于性能测试。

采用四探针法测定试样电阻率(图 1), 试样显微组织结构观察分别在 MEF-3 型光学显微镜和 S-2700 型扫描电子显微镜上进行。采用定量金相方法测量了试样中硅的含量<sup>[4]</sup>。

## 2 实验结果

硅/碳化硅试样的显微组织如图 2 所示。可以看出, 组织中包括灰色、白色和黑色的区域。其中

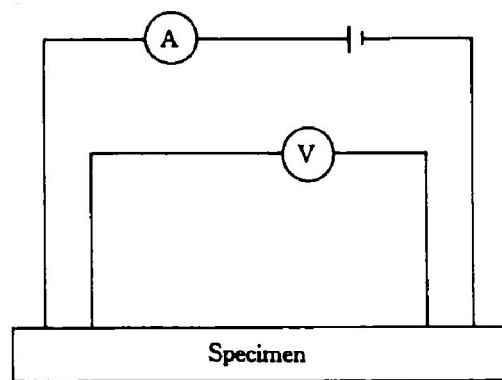


图 1 电阻率测量示意图

Fig. 1 Schematic diagram of measurement of electrical resistivity

灰色区域为碳化硅; 白色区域为分布在碳化硅颗粒间隙中的硅, 局部区域形成网络结构; 黑色区域孤立地分布在碳化硅与硅之间, 具有规则圆形结构特征, 可以认为其为残余碳。得到实测的电阻率与相应硅的含量, 作出二者关系图。

## 3 分析与讨论

目前已提出多种关于多晶材料导电机理的理论, 其中较著名的有赛托理论、穆罕默德理论、有效媒体理论与混合法则。

赛托理论<sup>[5]</sup>认为, 通电时载流子的输运线路有两条, 即晶粒与晶粒之间载流子越过晶界的传输和

① [基金项目] 国家自然科学基金资助项目(59772013)  
[作者简介] 李世斌(1965-), 男, 博士研究生。

[收稿日期] 2001- 09- 18; [修订日期] 2001- 10- 22

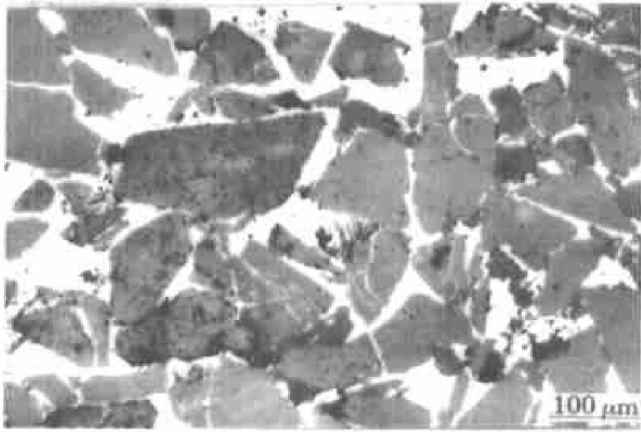


图2 硅/碳化硅试样的显微组织

Fig. 2 Microstructure of silicon/ silicon carbide specimen

载流子沿晶界的传输。在做了一定的简化和假设后，得到了多晶材料的电导率表达式，但计算材料电导率必须首先得到晶粒的空穴浓度。穆罕默德理论<sup>[6]</sup>考虑了载流子通过晶界势垒  $e\Phi_b$  的隧道效应和杂质分凝作用，通过晶界电阻率和晶粒电阻率按一定的加权组合，得到多晶材料的平均电阻率，但其晶界电阻率的测定存在很大的困难。而有效媒体理论<sup>[7]</sup>则根据系统的不同组态，得到系统等效电导  $\sigma_m$  与组成成分电导  $\sigma_f$  之间的不同函数关系，把复杂微观连接的非均匀体系归纳为若干典型组态，只用组元电导、组元体积百分比以及形态有关的因子来表达等效电路。混合法则计算结果只与组成相体积分分数有关，难以精确反映影响材料性能的元素。以上这些方法中，除有效媒体理论和混合法则外，都是针对单元多晶材料的，难以直接用于多组元复合材料。

Fan 等<sup>[8]</sup>将定量拓扑关系用来描述两相材料的显微组织，计算了二元复合材料的弹性模量、强度等，与实际符合很好。这种拓扑关系也可用于计算两相材料电阻率<sup>[9]</sup>。该方法不但考虑了两相体积分数和分布形态的影响，而且计算简便实用。

在硅/碳化硅材料中，随硅含量的增加，碳化硅含量减少。由于硅的电阻率小，因此随硅含量增加，材料整体电阻率降低。硅含量的多少成为控制和调整硅/碳化硅材料电阻率的关键组元。残余碳的存在是由于反应过程的不完整，成为反应烧结碳化硅材料中不可避免的残余相。但在本实验中其含量均低于5% (体积分分数)，同时为孤立分布形式，为了计算的方便，在处理中加以忽略，这样就可以按两相材料来处理硅/碳化硅材料电阻率的计算。

对于硅/碳化硅材料来说，可以用拓扑关系将

其显微组织转化为具有3个不同显微结构单元的整体，如图3所示。单元I 仅由 Si 相连续体组成，晶粒尺寸为  $d_a$ ，连续体积分分数为  $f_{ac}$ ；同理单元II 仅由 SiC 相连续体组成，晶粒尺寸为  $d_b$ ，连续体积分分数为  $f_{bc}$ ；单元III 则由大范围的 Si—SiC 长链组成，其体积分分数定义为分离程度  $F_s$ ，晶粒尺寸由平均体积质量  $\bar{d}_{ab}$  表示。单元I，II，III按照与电流平行的方向排列，这样其等效电路就可表达为图4所示。单位体积电阻  $R^c$  由 Si，SiC 和 Si—SiC 长链的电阻  $R_I$ ， $R_{II}$  和  $R_{III}$  来表示：

$$\frac{1}{R^c} = \frac{1}{R_I} + \frac{1}{R_{II}} + \frac{1}{R_{III}} \quad (1)$$

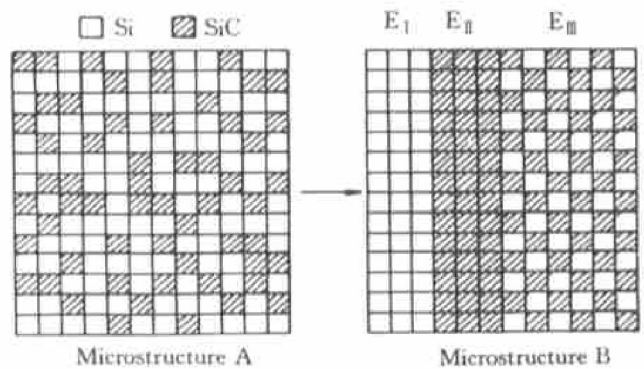


图3 硅/碳化硅材料显微 A 结构到 B 结构拓扑转变示意图

Fig. 3 Schematic illustration of topological transformation from microstructure A to microstructure B

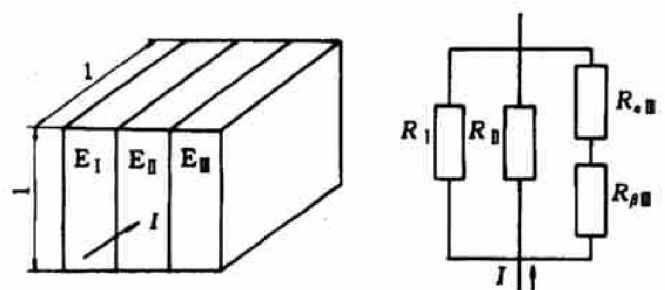


图4 单位体积 3-E 体中的电流方向和等效电路

Fig. 4 Schematic illustration of current direction in unit cubic 3-E body and equivalent circuit

根据电阻的定义  $R_{III}$  可用下式表达：

$$\frac{1}{R_{III}} = \frac{F_s}{\rho_a f_{aIII} + \rho_b f_{bIII}} \quad (2)$$

式中  $\rho_a$  和  $\rho_b$  分别为 Si 和 SiC 的电阻率， $f_{aIII}$  和  $f_{bIII}$  分别为 Si 和 SiC 在单元 III 中的体积分分数， $F_s$  是单元 III 的分离程度或体积分数。将有关项代入得到

$$\frac{1}{\rho^c} = \frac{f_{ac}}{\rho_a} + \frac{f_{bc}}{\rho_b} + \frac{F_s}{\rho_{f_{\alpha III}} + \rho_{f_{\beta III}}} \quad (3)$$

在公式中, 如果 Si 和 SiC 相完全分离, 则  $f_{ac} = f_{bc} = 0$ ,  $F_s = 1$ , 可以得到线性混合法则

$$\rho^c = \rho_{f_{\alpha}} + \rho_{f_{\beta}} \quad (4)$$

上式中的有关参数可按下面的方法来确定, 即

$$f_{ac} = f_{\alpha}^m, f_{bc} = f_{\beta}^n, \quad (5)$$

$$F_s = 1 - f_{ac} - f_{bc} = 1 - f_{\alpha}^m - f_{\beta}^n$$

$$f_{\alpha III} = (f_{\alpha} - f_{ac}) / F_s, f_{\beta III} = (f_{\beta} - f_{bc}) / F_s \quad (6)$$

式中  $m$  和  $n$  为常数, 分别表示 Si 和 SiC 相在显微结构中的排列情况,  $m$  和  $n$  值越小, 表明对应相的连续性越好。对于一个任意分布的二元组分来说, 描述连续相体积分数的参数  $m$  和  $n$  的实际值范围在 2 到 4 之间<sup>[8]</sup>, 通常假设  $m$  和  $n$  等于 2。

结合文献[10, 11]可知, 掺杂氮烧结的多晶碳化硅的电阻率在  $0.142 \sim 0.210 \Omega \cdot \text{cm}$  之间, 本实验制备硅/碳化硅材料所用的硅为工业级, 实测的硅的电阻率为  $2.5 \times 10^{-3} \sim 6.4 \times 10^{-3} \Omega \cdot \text{cm}$ 。将有关数据代入公式(3)计算得到 Si/SiC 材料中硅含量与电阻率的关系曲线 1, 其中分散数据点为实测值, 曲线 4 为按混合法则计算得到的结果(图 5)。计算实测点硅含量下的理论电阻率值, 求得二者的相对误差, 得到

$$\varepsilon = \frac{|\sum A_M - \sum A_C|}{\sum A_M} \times 100\% = 3.9\%$$

产生 3.9% 的误差是由于前面在处理残碳影响时, 对其加以忽略造成的。

从图 5 可以看出, 混合法则得到的结果(曲线 4)明显低于实验值, 主要原因在于未考虑材料相界的影响。而按照公式(3)计算得到的结果( $m = n = 2$ , 曲线 1)与实验值相比, 实验值分布在曲线 1 的附近, 二者吻合较好, 表明用定量拓扑关系可以通过对材料显微组织的测定来预测 Si/SiC 材的电阻率。当公式(3)中表示 Si, SiC 相在显微结构中的排列情况  $m, n$  取 2, 4 和 4, 2 时, 计算得到的结果分别为曲线 2 和 3, 通过这两条曲线的比较, 表明在相含量相等或相近时, 其电阻率的差异主要来自分布形态的影响, 从而可得出硅相的连续性越好材料电阻率越低。例如, 在硅体积含量为 20% 时, 当  $m = 2, n = 4$  时, 电阻率  $\rho^c = 0.0360 \Omega \cdot \text{cm}$ ; 而当  $m = 4$  和  $n = 2$  时, 电阻率  $\rho^c = 0.0675 \Omega \cdot \text{cm}$ 。为了得到低电阻率的 Si/SiC 材料, 其最有效的方法就是增加材料中电阻率较小组元硅的连续性。

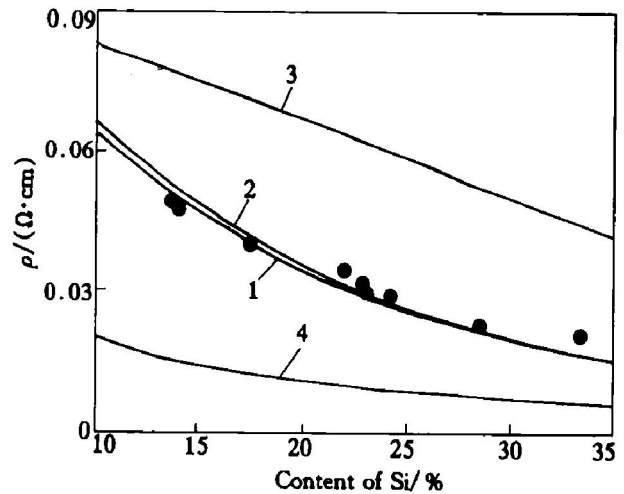


图 5 电阻率与硅含量关系曲线

Fig. 5 Relation curves between electrical resistivity and silicon volume fraction

●—Measured value;

1—Calculated by Eqn. (3),  $m = n = 2$ ;

2—Calculated by Eqn. (3),  $m = 2, n = 4$ ;

3—Calculated by Eqn. (3),  $m = 4, n = 2$ ;

4—Calculated by mixed rule

## 4 结论

用拓扑法计算硅/碳化硅复相材料电阻率时, 得出的理论电阻率结果与实验值吻合很好。提高硅的体积含量和硅的分布连续性, 可降低硅/碳化硅材料的整体电阻率。这种方法完全可用来预测硅/碳化硅复相材料的电阻率, 为确定制备材料的显微结构设计提供指导。

## [ REFERENCES ]

- [1] Sonntag A. New R-SiC extends servicelife in kiln furniture [J]. Am Ceram Soc Bull, 1997, 76(11): 51- 54.
- [2] Schwetz K A. Silicon carbide and high technology ceramics [J]. 国外耐火材料, 1990, 4: 1- 8.  
Schwetz K A. Silicon carbide and high technology ceramics [J]. Foreign Refractory, 1990, 4: 1- 8.
- [3] The Technology Society of Industry Production. Ceramic data book 2000 [J]. Industry and Production, (in Japanese), 2000, 128(82): 155.
- [4] 沈桂琴. 光学金相技术 [M]. 北京: 北京航空航天大学出版社, 1991. 270.  
SHEN Gu-qin. Optical Metallography Technique [M]. Beijing: Beijing University of Aeronautics & Astronautics Press, 1991. 270.

- [5] Seto Y W. The electrical properties of polycrystalline silicon films [J]. *J Appl Phys*, 1975, 46(12): 5247–5254.
- [6] Mohammad M M, Sarawat K C, Kamins T I. A model for conduction in polycrystalline silicon—Part 1: Theory [J]. *IEEE Trans*, 1981, ED-28(10): 1163–1176.
- [7] McLachlan D S, Blazkiewicz M, Newnham R E. Electrical resistivity of composites [J]. *J Am Ceram Soc*, 1990, 73(8): 2187–2203.
- [8] Fan Z, Miodownik A P, Tsakiroopoulos P. Microstructure characterization of two phase materials [J]. *Mater Sci Technol*, 1993, 9: 1094–1100.
- [9] Fan Z. A new approach to the electrical resistivity of two-phase composites [J]. *Acta Metall Mater*, 1995, 43(1): 43–49.
- [10] 梁训裕, 刘景林. 碳化硅耐火材料 [M]. 北京: 冶金工业出版社, 1981. 131.  
LIANG Xuryu, LIU Jing-lin. *Silicon Carbide Refractory Materials* [M]. Beijing: Metallurgical Industrial Press, 1981. 131.
- [11] Kondo A, Kitahama H. Electrical properties of nitrogen-doped pressureless sintered SiC [J]. *J Ceram Soc Jpn*, 1999, 107(8): 757–761.

## Calculation of electrical resistivity of new silicon/silicon carbide material by topological method

LI Shirbin<sup>1</sup>, LÜ Zhenlin<sup>2</sup>, GAO Jiqiang<sup>1</sup>, JIN Zhihao<sup>1</sup>

(1. State Key Laboratory for Mechanical Behavior of Materials,

Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China;

2. School of Materials Science and Engineering, Xi'an University of Technology,

Xi'an 710048, China)

**[Abstract]** The electrical resistivity of silicon/silicon carbide materials containing different microstructures was calculated by topological method. The theory result and the experiment value were in very good agreement, and the integrated relative error of them was only 3.9%. The effect of each phase volume fractions and distribution on the bulk material's electrical resistivity was analyzed and compared. The result indicated that the electrical resistivity of the bulk material can be reduced by improving the lower electrical resistivity silicon phase volume fractions and its contiguity. This approach may predict the free silicon volume fractions and microstructures in the wanted electrical resistivity material, and provide the instruction for determining the material microstructures of preparing materials.

**[Key words]** silicon/silicon carbide; topological method; electrical resistivity

(编辑 袁赛前)