

解析新世代化合物半導體特性

超寬能隙材料熱導性能更驚豔

張齊如

在現代人的生活極度依賴行動或穿戴裝置，存於其中的半導體材料無所不在。從早上的鬧鐘，到盥洗用的電動牙刷、上網訂早餐、用手機收看新聞，再到交通工具、工作用電腦、回家做飯的電鍋、微波爐等，半導體無所不在。近年來，隨著環保節能意識抬頭，為了實現淨零碳排放，必須將製造大量空污的油、氣發電，轉向更潔淨的綠電能源，未來的生活工具勢必共同邁向此目標。

因此，各種大電源及高速傳輸的供應需求，諸如太陽能、風電、電動交通工具，或家用裝置、物聯網、資料中心等，在原本主流的半導體材料矽(Si)無法勝任此一變化下，新世代材料應運而生。但這些新材料又是如何挑選的呢？筆者將從能隙的量測和磊晶品質等面向來探討，新世代的新材料如何挑選。

寬能隙材料優勢多

隨著電能需求的大增，高電壓、大電流、傳輸快、散熱佳是未來新世代材料的必要條件。基本上，要能承受較高的電壓條件，即是半導體材料的能隙(Energy Band Gap, E_g)要夠大，才可承受更高的

臨界場(Critical Electric Field)，以達到穩定快速又更高功率的轉換與輸出。

傳統的矽材料能隙約在1eV，而目前手持式行動裝置或車用快充，分別使用的第三類半導體為氮化鎵(GaN)與碳化矽(SiC)，其能隙則在3eV左右，約為Si的三倍。找到寬能隙材料，必定會讓終端產品的應用更多元。

因此要如何量得能隙的數值呢？廠商如宜特材料分析實驗室建議，可透過搭載在X光電子能譜儀(XPS)儀器上的紫外光電子能譜(UPS)和低能反光電子能譜(LEIPS)兩項功能，並搭配軟體分析計算後得知。

使用UPS與LEIPS測量能隙

使用UPS與LEIPS測量能隙的方式如下：

紫外光電子能譜

UPS主要是用氦氣(He)產生的紫外光做激發源，其能量約21.12eV。相較於XPS使用的X光源能量(~1KeV)小很多，因此僅會針對原子最外層的電子產生彈性碰撞，得到的會是較表層的光電子能譜。從能帶結構來說，得到的即是原子最外層價

電子能帶(Vallence Band)結構，由此能夠測量得出功函數 ϕ (Work Function)或計算出半導體的游離能(Ionization Energy, IE)。

低能反光電子能譜

另外一個是使用LEIPS量測半導體材料的導電帶(Conduction Band)結構，得到電子親合能EA(Electron Affinity)。如圖1右的半導體能帶圖，其中間的能隙值可以很容易地經由游離能減去電子親合能(EA)而得到。

透過上述兩個功能，即可獲知新材料的能隙數值。在新一類 Ga_2O_3 的元件開發中，其中有研究將 Nb_2O_5 加入製作成N型摻雜(Nb Doped) $\beta-Ga_2O_3$ 的晶體特性。如圖2藉由UPS能譜量測結果可得到 ϕ (WF)為4.96eV，而藉由右圖的能帶圖可推得能隙值為4.68eV。另外也有研究利用氧化鋁(Al_2O_3)摻入 Ga_2O_3 材料中形成 $(Al_xGa_{1-x})_2O_3$ 的合金結構，即能夠將能隙值再作提升。

如表1可以發現當鋁(Al)的組成x從0.25提高至0.50，能隙又再提升0.6eV左右，相對地崩潰電場也些微的增加，對於功率的提昇又有更大的助益。

XRD鑑定晶體堆疊對能隙的影響

影響材料的另一個特性是晶體堆疊的結構，所謂的同素異形體，即使是相同的元素材料，亦會因晶體排列的順序不同，導致材料特性有所差異。比如同樣是SiC，就有高達二百多種的結晶型態，而其中最

主要的三種分別為六方晶型(Hexagonal)的 $\alpha-6H$ SiC與4H SiC以及立方晶型(Cubic)的 $\beta-3C$ SiC。而適合目前功率元件製造的主要為4H SiC結構，除了是較

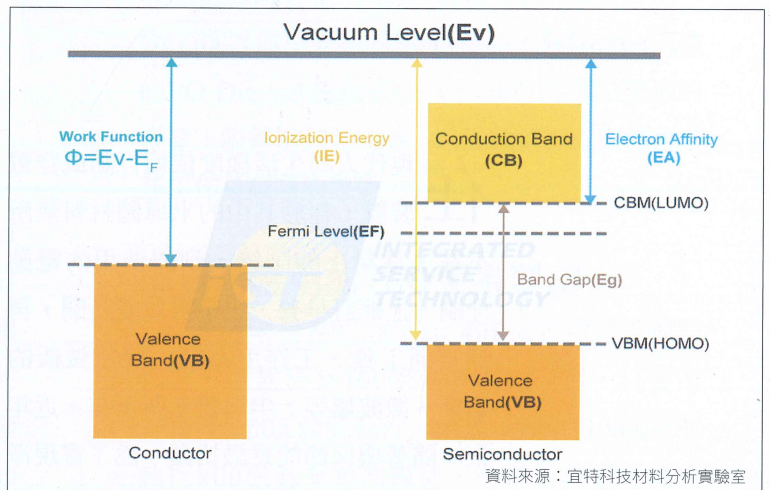


圖1 金屬導體(左)與半導體(右)的能帶圖

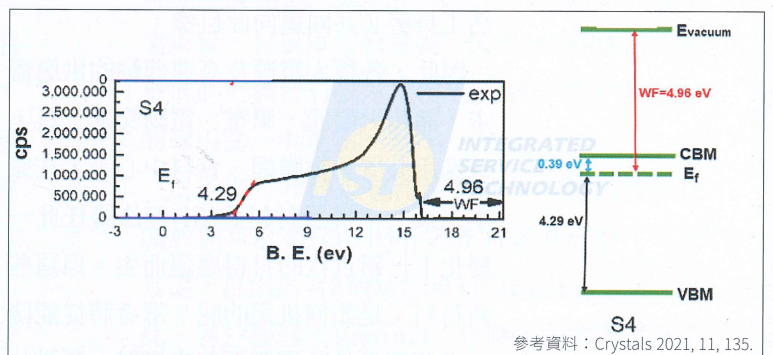


圖2 UPS分析Nb doped $\beta-Ga_2O_3$ 的功函數以推導出能隙值

表1 $\beta-Ga_2O_3$ & $\beta-(Al_xGa_{1-x})_2O_3$ 合金，當 $x=0.25$ 與 $x=0.5$ 的能隙與特性

| | $\beta-Ga_2O_3$ | $\beta-(Al_{0.25}Ga_{0.75})_2O_3$ | $\beta-(Al_{0.5}Ga_{0.5})_2O_3$ |
|--------------------------------------------------|-----------------|-----------------------------------|---------------------------------|
| E_g (eV) | 4.6-4.8 | 5.0-5.2 | 5.6-5.8 |
| Electron mobility μ ($cm^2 V^{-1} s^{-1}$) | 200 | 104 | 81 |
| Breakdown field E_{br} ($MV cm^{-1}$) | 7.9-8.7 | 9.7-10.7 | 10.0-10.7 |

參考資料：Appl. Phys. Lett. 121, 240503 (2022)

易製作成大片晶圓外，另一因素是其能隙最高，且電子移動率最快。

如表2列出這三種SiC晶型與Si的能隙等性質差異。同樣地在Ga₂O₃這個能隙更高的材料中，也存在著不同的晶型，如α(三方, Trigonal)、β(單斜, Monoclinic)、δ(立方, Cubic)等。因此，必須透過X光繞射分析(XRD)，去進行鑑定其晶體堆疊排列的差異，以便選擇出最優秀的材料。

圖3即為在Al₂O₃基板上成長Ga₂O₃薄膜的XRD繞射圖譜，經過比對ICDD PDF Pattern (資料庫編號)01-082-3838確認為β相(單斜晶)，優選方向為(211)。

XRD/AFM觀察晶體堆疊瑕疵

一旦選出最合適的材料後，就可開始製作成元件，並開始在表面堆疊各式各

樣的薄膜，這可能是相同的材料，如SiC以及Ga₂O₃上的磊晶(Epitaxy, EPI)漂移層(Drift Layer)，或是不同的化合物材料，如Si或SiC基板上的GaN磊晶，由於晶體結構上晶格無法相容，導致接合的不完美，進而產生差排、缺陷等。

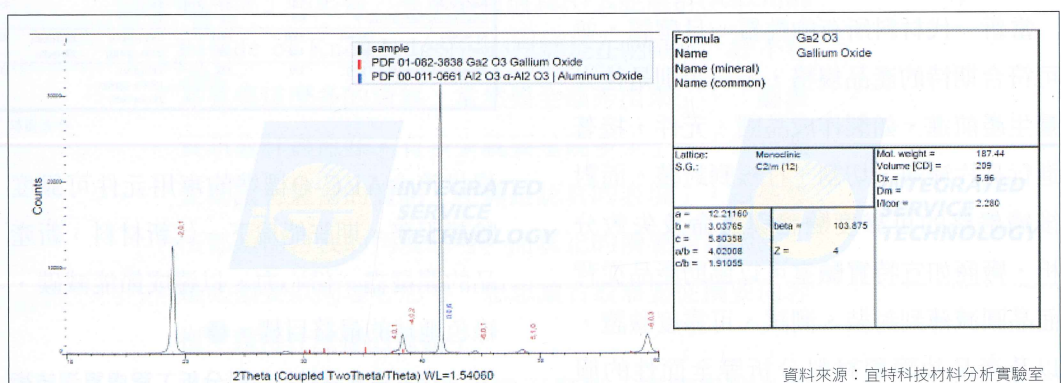
在完成磊晶製程的晶圓，宜特材料分析實驗室建議，即可藉由XRD的搖擺曲線(Rocking Curve)，或是拉曼光譜的偏移(Raman Shift)分析鑑定其磊晶的品質。基本上可藉由量測半高寬(FWHM)的大小來評斷，如圖4為成長(400)β-(Al_xGa_{1-x})₂O₃單晶在不同比例的Al含量(x:0~0.3)分析搖擺曲線疊圖的比較結果。顯示在Al含量小於0.3時的半高寬都穩定維持在30~50弧秒(Arc Sec)，當含量等於0.3時半高寬已變寬達到150Arc Sec，這是內部形成較多的缺陷導致晶格扭曲所致。

此外，也能藉由原子力顯微鏡(AFM)掃描磊晶後表面的形貌，判斷是否因晶格不匹配形成堆疊的瑕疵，或是製程條件不同

表2 不同SiC晶型與Si的能隙以及臨界電場的差異

| Material Parameters | 4H | 6H | 3C | Si |
|--------------------------------|-----------------------|-----------------------|---------------------|-----------------------|
| Energy bandgap at 300 K (eV) | 3.26 | 3.03 | 2.3 | 1.12 |
| Lattice constant at 300 K (Å) | 3.76 | 3.081 | 4.349 | 3.84 |
| Critical electric field (V/cm) | 2.2 x 10 ⁶ | 2.5 x 10 ⁶ | 2 x 10 ⁶ | 2.5 x 10 ⁶ |

參考資料：Crystals 2022, 12, 245



資料來源：宜特科技材料分析實驗室

圖3 Al₂O₃基板上Ga₂O₃薄膜的XRD分析結果比對確認為單斜晶型的β相

所產生的問題來做改善。如圖5是AFM量測磊晶形成後三種典型的表面形貌，分別呈現出島狀(Island Growth)、階梯流(Step Flow)與階梯聚集(Step Bunching)的不同成長機制，可提供磊晶製程條件的改善依據。

然而當在製作成元件後，數十微米以下的微區觀察，宜特材料分析實驗室建議，可透過試片進行研磨斷面掃描電鏡(Cross-sectional SEM)分析，或是雙束聚焦離子束顯微鏡(DB-FIB)定點製備觀察，甚至可用穿透式電鏡(TEM)分析更微小的奈米級缺陷、差排等問題。

近幾年雖然GaN與4H-SiC的材料已成功商業化，並證明其優越的性質，但國外有很多研究開始探索如鑽石(Diamond)和氮化硼(BN)等，是否能作為功率元件SiC和GaN的替代材料。除了因為它們具有更高的能隙，即具備「超寬能隙」(Ultra-wide Band Gap, UWBG)之外。另外也由於在熱導性質中Diamond又比GaN高8到10倍，如表3所列，這可以使功率模組的體積在額定的功率下縮小90%，如此未來的產品性能將會更加優秀的便於世人所採用。

當新一代材料所有的性質一旦確認，並可符合期待的產品規格，下一步則是往大量生產前進，如製作晶圓、元件，接著進行晶片減薄、切割、打線到封裝。面對後續嚴格的可靠度驗證與壽命及失效分析，廠商如宜特實驗室可以協助產品從背面晶圓減薄到封裝、測試、可靠度驗證，以及產品故障與材料分析等全面性的服務。此外，因應未來車電產品的需求，也

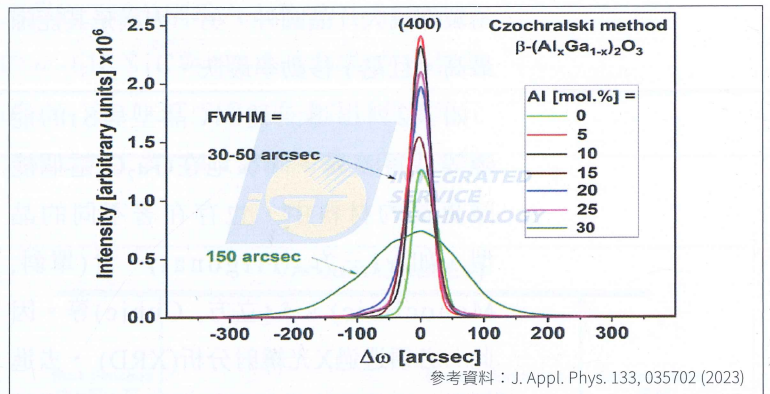


圖4 在(100)晶面的晶種上成長單晶 β -(Al_xGa_{1-x})₂O₃在不同比例的Al含量(x=0~0.3)Rocking Curve疊圖的比較結果

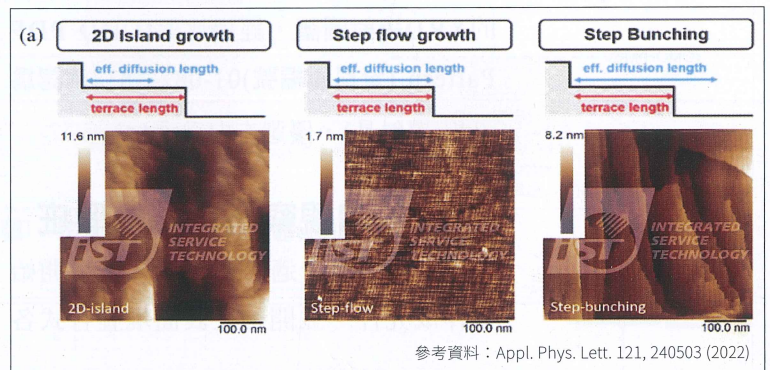


圖5 AFM觀察磊晶表面的三種典型形貌：2D島狀(Island Growth)、階梯流(Step flow)與階梯聚集(Step Bunching)

表3 超寬能隙(UWBG)與寬能隙(WBG)材料性質的比較

| Material | WBG | | | UWBG | | |
|-----------------------------------------------------------------------------|---------|--------|-------------------|--------------------------------|-----------|-------------|
| | Silicon | 4H-SiC | GaN | Ga ₂ O ₃ | Diamond | AlN |
| Band gap (eV) | 1.1 | 3.3 | 3.4 | 4.9 | 5.5 | 6.1 |
| Critical electric field (MV cm ⁻¹) ^a | 0.3 | 2.8 | 3.5 | 8 | 7.7-20 | 10 |
| RT mobility (cm ² V ⁻¹ s ⁻¹) ^b | | | | | | |
| Electron | 1500 | 1000 | 2000 (2DEG) | >1000 (bulk) | 300 | 1060 |
| Hole | 480 | 120 | <100 (2DHG) | <300 (bulk) | — | 2100 (bulk) |
| Thermal conductivity (W m ⁻¹ K ⁻¹) | 150 | 370 | 100 (on Si) | 11-27 | 2200-2400 | 253-319 |
| | | | 165 (on sapphire) | | | 14 |
| | | | 253 (on GaN) | | | 14 |

參考資料：J. Phys. D: Appl. Phys. 53 (2020)

提供符合AEC-Q標準的車用元件可靠度驗證服務，期許能為下一代新材料、新產品的開發盡一份心力，以達成節能減碳、綠色地球的最終目標。

(本文作者為宜特科技材料分析工程處資深技術經理)