

第三代半导体材料及器件中的热科学和工程问题

程哲

Thermal science and engineering in third-generation semiconductor materials and devices

Cheng Zhe

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 236502 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20211662

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211662>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

专题: 纳米工程和热物理

第三代半导体材料及器件中的热科学和工程问题

程哲†

(伊利诺伊大学厄巴纳-香槟分校材料科学和工程系, 伊利诺伊 61801)

(2021年9月7日收到; 2021年10月13日收到修改稿)

简单回顾了半导体材料的发展历史, 并以基于氮化镓的高电子迁移率晶体管为例, 介绍了第三代半导体器件的产热机制和热管理策略. 以 β 相氧化镓为例, 简单讨论了新兴的超宽禁带半导体的发展和热管理挑战. 然后重点讨论了一些界面键合技术用于半导体散热的进展, 同时指出这些器件中大量存在的界面散热的工程难题背后的科学问题: 界面传热的物理解. 在回顾了之前界面传热的理论发展后, 指出了理解界面传热当前遇到的一些困难、机遇和方向.

关键词: 第三代半导体, 热管理, 界面**PACS:** 65.80.-g, 66.70.Df, 68.35.Dv, 73.40.Kp**DOI:** 10.7498/aps.70.20211662

1 引言

半导体技术的前几十年基本上是在建立在第一代半导体材料(锗、硅)和第二代半导体材料(传统的三五族化合物, 比如砷化镓)上. 这些材料的禁带宽度都在 2.3 eV 以下. 即使宽的禁带宽度意味着能承受更高的击穿电压、更节能、所需材料更少, 宽禁带半导体的发展一直很艰难. 直到 19 世纪 80 年代后期至 90 年代, 氮化镓生长和掺杂技术的突破带来了光电器件的革命, 随后也被用于电子器件. 碳化硅在电子器件方面的研究则稍早于氮化镓. 以氮化镓和碳化硅为代表的第三代半导体电子器件在 2000 年以后, 特别是 2010 年之后, 开始走向成熟, 在功率和射频器件领域实现了一系列革新应用: 能源基础设施、可再生能源转换器、国防雷达和电子战技术、卫星通讯. 区别三代半导体的主要标准是其禁带宽度. 随着 5 G 通讯的发展, 基于第三代半导体的射频器件正大规模用于 5 G 基站. 同时, 射频和功率器件将大规模用于电动汽车的传感通信和电源转化. 与硅器件相比, 氮化镓器件的

延时可以减少到硅器件的 1/10 以下并且体积更加紧凑和节能. 在应用需求的催生下, 相关器件的频率和功率也越来越高, 热管理成为制约器件稳定性和寿命的一个技术瓶颈.

近年来, 各国政府在大力投入第三代半导体的同时, 也加大了对比第三代半导体禁带宽度更大的超宽禁带半导体的投入. 超宽禁带半导体, 比如氧化镓、氮化铝、金刚石和氮化硼, 也迎来了很多技术突破. 其中以氧化镓为代表的半导体器件在某些方面可能超越氮化镓和碳化硅器件, 有望成为世界上第七大半导体技术, 得到了大量的关注. 当然, 氧化镓也存在很多的技术挑战, 比如低导热系数和 p 型参杂. 氧化镓器件的热管理将成为其是否能规模化发展的一个重要技术指标.

2 半导体器件中的产热和热管理

半导体电子器件都会有焦耳热的产生, 电学特性往往是与热学和力学相耦合的, 所以热学、电学和力学协同设计成为未来技术发展的一个方向. 下面以基于氮化镓的高电子迁移率晶体管 (GaN

† 通信作者. E-mail: zcheng18@illinois.edu

HEMT) 为例, 讨论近节点的产热和热管理. 最新的金刚石基底 GaN HEMT 的近节点热流密度可以达到太阳表面热流密度的 10 倍以上. 节点温度直接关系到器件的寿命和稳定性, 进而影响整个设备的可靠性. 如图 1 所示, 栅极附近有大的电压变化, 热点存在于节点附近. 栅极附近产生的热通过高导热衬底散热/均热. 从热源到热沉的热阻有氮化镓层的热阻, 氮化镓与衬底的界面热阻, 还有衬底的热阻. 对于特定的器件结构, 氮化镓层的热阻无法改变. 所以研究集中在后 2 个热阻的减小上面. 对于 GaN HEMT, 在一些重要应用领域, 碳化硅衬底的器件 (GaN-on-SiC) 正在逐步取代硅衬底 (GaN-on-Si), 一个重要的原因就是考虑到碳化硅的导热系数 ($380 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$) 大于硅的导热系数 ($149 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$).

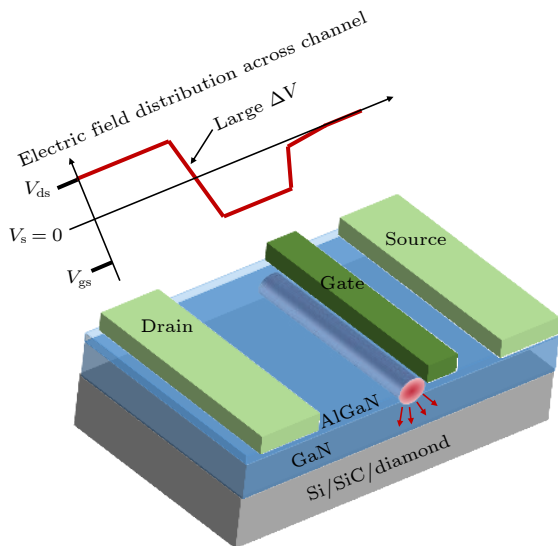


图 1 基于氮化镓的高电子迁移率晶体管的示意图和节点附近的电场分布. 热点位于栅极附近

Fig. 1. The schematic diagram of a GaN high electron mobility transistors (HEMT) and the electric field distribution across the channel. The hotspot is located close to the gate.

使用比碳化硅导热系数更高的金刚石作为衬底来散热, 金刚石衬底的氮化镓器件 (GaN-on-diamond) 也发展了十几年, 其中的难点仍在于金刚石的质量和金刚石和氮化镓异质结合的界面热阻. GaN-on-diamond 目前的工艺是在硅衬底上生长氮化镓器件, 然后把硅衬底腐蚀掉. 在去掉硅暴露出来的氮化镓上面生长一层保护层之后, 直接在上面利用气相沉积法生长金刚石^[1]. 接近氮化镓界面处的金刚石是纳米晶体, 其导热系数只有数

十 $\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, 远小于金刚石单晶体的导热系数 ($>2000 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$)^[2]. 氮化镓上面生长的保护层也增加了氮化镓和金刚石之间的界面热阻^[3].

超宽禁带半导体, 比如 β 相氧化镓 ($\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$) 由于近十年来晶体生长技术的突破, 氧化镓可以从熔体中生长大单晶, 有望大规模供应成本低廉的单晶体^[4]. 氧化镓的超宽禁带使其拥有高击穿电压, 而且氧化镓的 n 型掺杂表现优异, 欧姆和肖特基接触也可以使用常规金属. 但是相比于其他的宽禁带半导体材料, 氧化镓由于其复杂的晶体结构导致其导热很低 ($10\text{--}27 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$) 而且具有很强的各向异性^[5]. 散热问题将会是阻碍大规模应用的一个短板. 所以, 要想将器件中的热量导出, 需要使用高导热系数的衬底^[6,7]. 如图 1 所示, 栅极附近产生的热量通过高导热衬底散热需要经过的热阻包括氧化镓本身的热阻. 因为氧化镓导热系数低, 自身的热阻就很大, 所以需要减小氧化镓的厚度来减小热阻. 如果在氧化镓衬底上面直接生长氧化镓器件, 将导致热积累而出现稳定性问题. 除了氧化镓的其他超宽禁带半导体, 氮化铝镓由于是合金, 所以导热系数也只有几十 $\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, 但是氮化硼、氮化铝和金刚石的导热系数却很高.

3 高界面热导的异质键合界面

如图 1 所示, 器件上面的热点通过高导热衬底散热, 需要经过 3 个热阻: 半导体器件自身的热阻、器件和衬底界面的热阻、衬底的热阻. 一旦器件和衬底选定, 热阻即为固定值, 界面热阻在总热阻中的占比很大, 且可以通过研究来降低, 下文将重点讨论界面热阻.

为了将高导热材料结合到热点附近, 近年来作者和合作者们研究了一系列异质键合界面的界面热导, 发现常温直接键合技术可以将氮化镓和氧化镓直接在常温下键合到高导热衬底上, 并且键合的界面具有高界面热导, 这为相关器件的散热提供了除了生长以外的另外一条热管理技术路线. 我们成功把晶圆级别的氮化镓和碳化硅键合在一起, 其界面导热达到了文献中的最高值 ($230 \text{ MW}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$)^[8]. 键合的界面不仅去掉了直接生长界面所需的氮化铝缓冲层的热阻, 也去掉了直接生长界面附近低质量氮化镓, 键合的氮化镓具有高导热系数^[8]. 另外,

我们将单晶体金刚石和氮化镓在常温下键合, 得到了较高的界面热导 ($92 \text{ MW}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$), 计算结果显示冷却效果接近金刚石散热效果的极限值^[9]. 常温键合还可以最大程度减小高温操作可能带来的热应力问题. 相比于在氮化镓上使用气相沉积法生长多晶体或者纳米晶体金刚石, 键合法不需要保护层, 增大了界面热导^[9]. 并且直接把单晶体金刚石键合到氮化镓上面, 导热效率大幅度提升^[9]. 最近加州大学洛杉矶分校的胡永杰课题组^[10]报道了把氮化镓键合到砷化硼上面, 并得到了高界面热导 ($250 \text{ MW}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$), 在某些工况下面散热效果甚至超过了直接生长的多晶体金刚石, 但是高质量砷化硼晶体只能长到毫米尺寸且本身导电, 阻碍了真正的实际应用.

上面我们提到氧化镓器件不仅需要高的界面热导还需要自身很薄, 所以作者和合作者们报道了使用离子切割来剥离纳米级别的单晶体晶圆级别的氧化镓薄膜异质键合在高导热衬底上, 我们发现键合的界面具有高的界面热导^[11,12]. 同时, 最近有模拟研究提出, 还可以使用双面散热, 除了通过高导热衬底, 也可以额外通过栅极电极的金属来均热, 从上方将一部分热导出^[13].

以上散热策略有一个关键点, 即涉及大量的界面传热. 包括不同材料之间的界面: 金属和半导体、半导体和半导体界面; 不同生长条件下的界面: 键合、蒸镀、溅射、分子束外延、有机金属化学气相沉积法、氢化物气相外延等生成的界面. 总之, 界面传热对于半导体器件的热管理至关重要.

4 半导体器件中界面导热的科学问题

4.1 界面传热的物理解

界面传热涉及不同的能量载体、不同的运输机制、不同的界面结构细节. 对于界面传热的理解一直是一个难题. 关于界面传热的理论理解, 最开始的扩散失配模型 (DMM) 和声学失配模型 (AMM) 假设声子以一定的概率穿过界面, 从而完成热交换. 这两种模型无法考虑界面处的结构, 只是根据基于组成界面的两个材料的声子特性来计算声子透射率, 并且只能计算弹性过程. 后来发展出来的原子格林方程 (AGF) 可以考虑界面的细节, 但是很难计算非弹性过程对界面导热的影响, 并且计算量特别大^[14]. 前面提到的模型都是基于朗道模型

和声子透射概率. DMM 和 AMM 是基于声子气模型. 然而界面处是非对称结构, 而且往往真实的界面会有很多的结构混乱, 这与声子气模型的完美周期性晶格假设冲突. AGF 依然使用大块体材料的声子来描述界面导热. 所以界面处的热传输理论需要更好的模型和物理理解^[15]. 近年来, 也有一些研究者提出一些改进模型, 比如: 混合失配模型^[16]、交叉界面弱耦合模型^[17]、最大透射模型^[18]、散射调节声学失配模型^[19]和非谐波非弹性模型^[20]等.

随着分子动力学应用于界面传热的计算, 非弹性过程对界面热导的贡献可以被计算出来. 更多更丰富的振动模式在界面处被预测出来 (界面声子态), 它们完全与界面两侧材料的大块体声子特性完全不同, 并且对界面传热有很大的直接和间接的贡献. 界面声子态的理论预测和实验验证最近取得了很多的进展^[21-25]. 但是分子动力学计算本身是基于经典力学, 没有办法考虑量子效应, 对界面热导的预测在低温时影响较大. 界面传热的计算和使用的原子间作用势能有非常大的关系, 所以分子动力学的结果往往只能做定性的分析. 迄今为止, 一个完整的基于第一性原理的计算界面传热的理论模型还不存在, 这是一个巨大的挑战^[26].

4.2 界面传热的实验探索

实验结果发现, 界面的元素混合情况、结构混乱程度、界面结合力、化学键、晶体方向、粗糙度等都会影响界面传热^[27-29]. 目前完整考虑这些因素的理论计算模型较少^[30], 导致实验测量的界面往往和模型计算的界面不同. 这阻碍了对界面传热的理解. 不同的材料往往拥有不一样的晶格常数, 这使界面处的原子并不是完美的排列, 在真实的界面中结构缺陷或位错往往不可避免. 这些真实的界面结构可以激发理论科学家对界面传热的理解. 所以, 对界面进行高精度的材料结构表征尤其重要. 配合大量的实验数据, 通过机器学习或大数据的方法来寻找理解和预测界面传热的理论模型将成为可能.

目前实验测量的界面导热数据非常有限, 只有几十个界面被测量过, 其中绝大部分是通过时域热反射方法进行测量. 所以未来需要发展可以快速批量自动化测量界面导热的方法. 再者, 目前的界面热导测量仍然是基于经典傅里叶定律的数据分析, 未来发展可以测量单个声子模式界面热导的测量方法也是一个值得研究的方向.

参考文献

- [1] Cheng Z, Bougher T, Bai T, Wang S Y, Li C, Yates L, Foley B M, Goorsky M, Cola B A, Faili F, Graham S 2018 *ACS Appl. Mater. & Interf.* **10** 4808
- [2] Anaya J, Rossi S, Alomari M, Kohn E, Toth L, Pecz B, Hobart K D, Anderson T J, Feygelson T I, Pate B B, Kuball M 2016 *Acta Mater.* **103** 141
- [3] Yates L, Anderson J, Gu X, Lee C, Bai T, Mecklenburg M, Aoki T, Goorsky M S, Kuball M, Piner E L, Graham S 2018 *ACS Appl. Mater. & Interf.* **10** 24302
- [4] Reese S B, Remo T, Green J, Zakutayev A 2019 *Joule* **3** 903
- [5] Jiang P, Qian X, Li X, Yang R 2018 *Appl. Phys. Lett.* **113** 232105
- [6] Cheng Z, Yates L, Shi J, Tadjer M J, Hobart K D, Graham S 2019 *APL Mater.* **7** 031118
- [7] Cheng Z, Wheeler V D, Bai T, Shi J, Tadjer M J, Feygelson T, Hobart K D, Goorsky M S, Graham S 2020 *Appl. Phys. Lett.* **116** 062105
- [8] Mu F, Cheng Z, Shi J, Shin S, Xu B, Shiomi J, Graham S, Suga T 2019 *ACS Appl. Mater. & Interf.* **11** 33428
- [9] Cheng Z, Mu F, Yates L, Suga T, Graham S 2020 *ACS Appl. Mater. & Interf.* **12** 8376
- [10] Kang JS, Li M, Wu H, Nguyen H, Aoki T, Hu Y 2021 *Nat. Electron.* **17** 1
- [11] Cheng Z, Mu F, You T, Xu W, Shi J, Liao M E, Wang Y, Huynh K, Suga T, Goorsky M S, Ou X, Graham S 2020 *ACS Appl. Mater. & Interf.* **12** 44943
- [12] Cheng Z, Mu F, Ji X, You T, Xu W, Suga T, Ou X, Cahill D G, Graham S 2021 *ACS Appl. Mater. & Interf.* **13** 31843
- [13] Cheng Z, Shi J, Yuan C, Kim S, Graham S 2021 *Semiconduc. and Semimetals (Elsevier)* **107** 77
- [14] Dai J, Tian Z 2020 *Phys. Rev. B.* **101** 041301
- [15] Gaskins J T, Kotsonis G, Giri A, Ju S, Rohskopf A, Wang Y, Bai T, Sachet E, Shelton C T, Liu Z, Cheng Z, Foley B, Graham S, Luo T, Henry A, Goorsky M S, Shiomi J, Maria J P, Hopkins P E 2018 *Nano Lett.* **18** 7469
- [16] Zhang Y, Ma D, Zang Y, Wang X, Yang N 2018 *Front. in Energ. Res.* **6** 48
- [17] Deng C, Huang Y, An M, Yang N 2020 *Mater. Today Phys.* **16** 100305
- [18] Dames C, Chen G 2004 *J. of Appl. Phys.* **95** 682
- [19] Prasher R S, Phelan P E 2001 *J. Heat Transf.* **123** 105
- [20] Hopkins P E, Duda J C, Norris P M 2011 *J. Heat Transf.* **133** 062401
- [21] Chalopin Y, Volz S 2013 *Appl. Phys. Lett.* **103** 051602
- [22] Gordiz K, Henry A 2016 *Sci. Rep.* **6** 23139
- [23] Cheng Z, Li R, Yan X, Jernigan G, Shi J, Liao M E, Hines N J, Gadre C A, Idrobo J C, Lee E, Hobart K D, Goorsky M S, Pan X, Luo T, Graham S 2021 *Nat. Commun.* **12** 6901
- [24] Murakami T, Hori T, Shiga T, Shiomi J 2014 *Appl. Phys. Exp.* **7** 121801
- [25] Yang N, Luo T, Esfarjani K, Henry A, Tian Z, Shiomi J, Chalopin Y, Li B, Chen G 2015 *J. of Comput. and Theoret. Nanosci.* **12** 168
- [26] Muraleedharan M G, Gordiz K, Rohskopf A, Wyant S T, Cheng Z, Graham S, Henry A 2020 arXiv: 2011.01070
- [27] Cheng Z, Koh Y R, Ahmad H, Hu R, Shi J, Liao M E, Wang Y, Bai T, Li R, Lee E, Clinton E A, Matthews M C, Engel Z, Yates L, Luo T, Goorsky M S, Doolittle W A, Tian Z, Hopkins P E, Graham S 2020 *Commun. Phys.* **3** 1
- [28] Xu D, Hanus R, Xiao Y, Wang S, Snyder G J, Hao Q 2018 *Mater. Today Phys.* **6** 53
- [29] Wang S, Xu D, Gurnathan R, Snyder G J, Hao Q 2020 *J. of Materiomics* **6** 248
- [30] Hao Q, Garg J 2021 *ES Mater. & Manuf.* **14** 36

SPECIAL TOPIC—Nano engineering and thermophysics

Thermal science and engineering in third-generation semiconductor materials and devices

Cheng Zhe[†]

(*Department of Materials Science and Engineering, University of Illinois at Urbana-Champaign, Illinois 61801, USA*)

(Received 7 September 2021; revised manuscript received 13 October 2021)

Abstract

The history of semiconductor materials is briefly reviewed in this work. By taking GaN-based high electron mobility transistor as an example, the heat generation mechanisms and thermal management strategies of wide bandgap semiconductor devices are discussed. Moreover, by taking β -Ga₂O₃ as an example, the thermal management challenges of emerging ultrawide bandgap semiconductors are briefly discussed. The following discussions focus on the interfacial thermal transport which widely exists in the semiconductor devices mentioned above. The recent advancements in room-temperature wafer bonding for thermal management applications are summarized. Furthermore, some open questions about the physical understanding of interfacial thermal transport are also mentioned. Finally, the theoretical models for calculating thermal boundary conductance are reviewed and the challenges and opportunities are pointed out.

Keywords: third-generation semiconductors, thermal management, interfaces

PACS: 65.80.-g, 66.70.Df, 68.35.Dv, 73.40.Kp

DOI: [10.7498/aps.70.20211662](https://doi.org/10.7498/aps.70.20211662)

[†] Corresponding author. E-mail: zcheng18@illinois.edu