

中波PIN结构碲镉汞雪崩器件变温特性的数值模拟研究

沈川¹, 杨辽¹, 郭慧君¹, 杨丹¹, 陈路^{1,2*}, 何力¹

(1. 中国科学院上海技术物理研究所 红外材料与器件重点实验室, 上海 200083;

2. 国科大杭州高等研究院, 浙江 杭州 310024)

摘要: 本文对中波HgCdTe APD进行二维数值模拟, 通过与实验结果的对比获得80K下PIN结构的APD器件参数。对不同工作温度下的APD器件暗电流机制进行了研究, 发现在高工作温度下, 影响暗电流的主要是SRH(小偏压)和雪崩机制(大偏压)。对在高工作温度情况下各层参数的变化引起器件性能的变化进行了研究, 对不同层厚度、掺杂浓度对器件性能的影响进行了相应理论计算, 并对计算结果进行相应的对比研究, 获得了理论上最优化的HgCdTe APD高温器件结构, 为后续高工作温度的APD器件的研发提供重要参考。

关键词: HgCdTe; APD结构; 数值模拟; 高工作温度

中图分类号: O471.5; TN305.3

文献标识码: A

Numerical simulation of high-operating-temperature MWIR HgCdTe APD detectors

SHEN Chuan¹, YANG Liao¹, GUO Hui-Jun¹, YANG Dan¹, CHEN Lu^{1,2*}, HE Li¹

(1. Key Laboratory of Infrared Imaging Materials and Detectors, Shanghai Institute of Technical Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China;

2. Hangzhou Institute for Advanced Study, University of Chinese Academy of Sciences, Hangzhou 310024, China)

Abstract: In this paper, 2-D numerical simulation was used to simulate the structure of MWIR HgCdTe APD, and the structural parameters of APD devices at 80K were obtained by comparing with the experimental results. At the same time, the influence of dark current mechanism on APD devices at different operating temperatures was studied. The performance of APD devices with the change of each parameter under the condition of high operating temperature was studied. We proposed the optimal HgCdTe APD structure for achieving high performance at 150K. The structure provides an important reference for the subsequent development of APD devices with high operating temperature.

Key words: HgCdTe, APD, numerical simulation, high operating temperature (HOT)

引言

未来的主动红外探测器需要高增益低噪声的雪崩光电二极管。而在雪崩器件中, 碰撞离化系数是一个特别重要的参数, 它决定了APD的增益因子、工作带宽和过剩噪声的大小, 而理想的APD要求半导体材料的两种离化系数差别无限大, 就是有

一种载流子的离化系数为零。HgCdTe材料不仅具有可调的响应波长, 更重要的是其电子、空穴离化系数差异可以非常大, 非常适合制备高性能的APD, 具备高增益、低噪声、快响应以及几乎没有过剩噪声等特点^[1-4]。

近二十年来, 国外在HgCdTe APD焦平面器件研发和应用方面取得了极大的进展。多个研究小

收稿日期: 2020-11-04, 修回日期: 2020-12-14

基金项目: 中国科学院青年创新促进会项目

Foundation items: Supported by Youth Innovation Promotion Association CAS

作者简介 (Biography): 沈川 (1985-), 副研究员, 博士, 主要研究领域为HgCdTe材料结构设计、生长和器件工艺。E-mail: shenchuan@mail.sitp.ac.cn

* 通讯作者 (Corresponding author): E-mail: chenlu@mail.sitp.ac.cn

Received date: 2020-11-04, Revised date: 2020-12-14

组报道了雪崩增益达到 100 乃至 1000,反偏电压约为 10 V^[5-8]。同时,在高温 APD 方面,2014 年 CEA-Leti 的 Rothman 等人报道了在 200K 工作的单光子雪崩探测器^[9]。国内近几年也开始对 HgCdTe APD 投入了相关的研究^[10-14],但相关进展报道较少。2019 年李浩等人报道了截止波长为 3.56 μm 的雪崩焦平面器件,面阵大小为 16×16,有效像元率大于 90%,6V 下 NEPh 约 60,过剩噪声因子 1.2^[10]。郭慧君等人报道了技物所中波 HgCdTe APD 的最新进展,10 V 下的增益接近 1000,在增益 100 附近其过剩噪声因子为 1.2~1.45,器件的量子效率为 60%^[11]。李雄军等人对中波 HgCdTe 雪崩光电二极管的增益特性进行了研究,采用不同工艺制备器件,最高器件有效增益提高至 1000^[12]。可见,国内的 HgCdTe APD 在单元器件增益、过剩噪声因子等方面完成了原理性的探索,对低温(80K)下增益特性和暗电流机制进行了相关分析^[13-14],然而随着工作温度升高,APD 的暗电流研究未见诸报道。

本文基于制备的中波(截止波长 5 μm)雪崩器件,采用 TCAD 软件进行二维的器件结构建模,通过实验和理论结果的对比分析获得了 80 K 下 APD 器件的结构参数。同时,通过数值模拟着重研究了器件暗电流,增益等随工作温度变化的趋势。通过研究不同工作温度下的暗电流影响机制,优化材料结构,为后续高温中波雪崩器件进行设计准备。

1 方法

首先采用 TCAD 软件建立二维结构的仿真模拟,获得与实际器件结构相近的二维模型,如图 1。整个模型的结构参数在参考实际器件结构的基础上,考虑到模拟的适用性进行了一定的改进优化。实际器件结构参数是通过多种测试方式获得,比如二次离子质谱分析获得器件的纵向组分分布变化等。

在此基础上我们对雪崩器件的光电性能进行数值模拟,着重研究不同工作温度下的光电性能的变化。考虑泊松方程和电流连续性方程,并根据 APD 的特殊性质添加复合机制,包括雪崩机制以及大反偏下对暗电流有显著贡献的 BBT 机制等。相比于常用的解析模型方法,数值模型因为参考实际器件结构进行建模,一定程度上具有物理空间特性,更加接近器件实际的物理构成,同时考虑了更多器件工作过程中的物理机制,因此计算结果更加符合器件的实际表现,同时运行结果也能提供更多

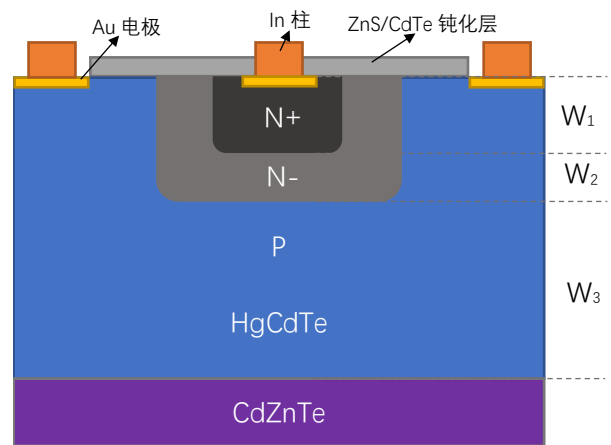


图 1 HgCdTe APD 的二维结构模型

Fig. 1 2-D structural model of HgCdTe APD

的物理信息,如结区电场分布,BBT 产生率分布,载流子分布和能带结构等。

同时,实际器件的暗电流测试采用如下测试方法和测试系统。变温测试使用的变温杜瓦,整个器件用低温胶贴于杜瓦冷头上。测量时,冷头上加有冷屏,使样品处于暗场下(零度视场角),以去除背景辐射产生的光电流对测量结果的影响,变温测量的范围为 80~300 K。

电流电压测试用 Keithley 6430 SourceMeter,测量用电压触发,同时测量电压和电流。电流测量的准确率达到 100 pA,分辨率高于 20 pA。

2 理论相关

半导体材料中载流子的输运过程一般采用漂移-扩散模型来阐述。其主要内容便是 Poisson 方程和电流连续性方程。Poisson 方程定义如下:

$$\nabla \cdot \epsilon \phi = -q(p - n + N_D - N_A) - \rho_{trap}, \quad (1.1)$$

其中, ϵ 是介电常数, ϕ 是静电势, p 和 n 是空穴和电子浓度, N_D 、 N_A 分别是施主浓度和受主浓度。 ρ_{trap} 定义为陷阱电荷密度。电子和空穴连续性方程定义如下:

$$\nabla \cdot \vec{J}_n = qR_{net} + q \frac{\partial n}{\partial t}, \quad (1.2)$$

$$-\nabla \cdot \vec{J}_p = qR_{net} + q \frac{\partial p}{\partial t}, \quad (1.3)$$

其中, \vec{J}_n 和 \vec{J}_p 是电子和空穴电流密度, R_{net} 代表电子空穴复合速率。

在 HgCdTe 中,影响复合速率的主要机制一般有 SRH 复合、Auger 复合、辐射复合、TAT 复合以及 BBT 复合。同时,考虑到 TAT 复合机制主要受到材料中缺陷的影响,最终决定的是载流子寿命,类似

于SRH复合机制的作用。所以,在模拟计算中统一考虑为SRH(tat)复合机制。

$$R_{\text{SRH(tat)}} = \frac{pn - n_{ic}}{\frac{\tau_p}{1 + \Gamma_p} [n + n_{ic} \exp(\frac{E_T - E_i}{kT})] + \frac{\tau_n}{1 + \Gamma_n} [p + n_{ic} \exp(\frac{E_T - E_i}{kT})]}, \quad (1.4)$$

其中 E_T 为深能级, E_i 、 n_{ic} 分别为本征材料的费米能级、载流子浓度, τ_p 、 τ_n 分别为空穴、电子的复合寿命, 这些参数含义与SRH复合模型完全相同。参数 Γ_p 、 Γ_n 即体现了深能级辅助隧穿效应, 在弱电场情况下, 该模型简化为SRH复合。

Auger复合率计算公式如下

$$R_A = (C_n p + C_p p)(np - n_i^2), \quad (1.5)$$

其中 $C_{n,p}$ 为与温度相关的俄歇复合系数。

辐射复合率的公式如下

$$R_{\text{rad}} = B_{\text{rad}}(np - n_i^2), \quad (1.6)$$

其中 B_{rad} 为辐射复合系数。

BBT复合率公式如下

$$U_{\text{bbt}} = A_{\text{bbt}} \cdot E^2 \cdot \exp\left(-\frac{B_{\text{bbt}}}{E}\right) \quad (1.7)$$

$$A_{\text{bbt}} = -\frac{q^2 \sqrt{2m_e^*}}{1.62^2 \cdot 4\pi^3 \hbar^2 \sqrt{E_g}} \quad (1.8)$$

$$B_{\text{bbt}} = \frac{1.62 \cdot \pi \sqrt{m_e^*/2} E_g^{3/2}}{2q\hbar} \quad (1.9)$$

其中 E 为电场强度。

而对于HgCdTe APD器件的特殊性, 我们需要考虑其雪崩机制对复合速率的影响。对于中波碲镉汞APD器件, 如组分 $x=0.3$, 对应的材料电子离子化系数远远大于空穴离子化系数, 故在模拟中忽略空穴的雪崩作用。雪崩模型采用OkutoCrowell模型^[15]。该模型中电子的离子化系数表示为

$$\alpha(E) = aE^c \exp\left(-\frac{b}{E}\right), \quad (1.10)$$

上式中, a 与增益的指数斜率相关, b 与增益的开启电压相关, c 与大反偏下增益饱和现象有关。

3 结果与分析

本文在CdZnTe衬底上采用LPE方法生长Hg空位掺杂的P型HgCdTe外延材料, 经过B⁺离子注入以及退火工艺后, 由于Hg原子的填隙扩散, 形成P-i-N结构的平面结。其中, 材料结构中的组分 x 、P层厚度、P层浓度 N_a 可以根据材料测试获得。组分 x 和P层厚度由傅里叶光谱仪测透射光谱获得, P层浓度由液氮温度下霍尔测试获得。

但是, N+层以及Ni层的厚度、浓度等因为由离

子注入和退火工艺对Hg填隙原子和Hg空位的迁移和复合确定的, 因而不能经过相关材料测试直接给出定量的数值。所以我们采用对器件80K下暗电流的I-V曲线进行数值模拟, 来确定材料结构。图2中蓝色的数据是编号为(Lpev0066B)的器件在80K OFOV下的I-V测试曲线, 红色点画线的数据为拟合结果, 对器件的几何结构的各个参数进行调整和优化, 最终获得了能和实验数据相当吻合的结构参数。同时, 为验证拟合参数的准确性, 我们采用SIMS(二次离子质谱)检测注入B离子的纵向分布以及CV测试等的方法, 大致确定N+区域的厚度大约在1~2 μm , 浓度大概在 1×10^{17} 量级上, N-区的厚度大约在2~3 μm , 浓度在 $1 \times 10^{14} \sim 1 \times 10^{15}$ 量级范围。但是限于这几种方式的局限性和测试偏差, 只能大致判断一个范围值作为参考量。但也验证拟合获得的结构参数在合理水平。通过数值模拟获取的结构参数如表1所示。

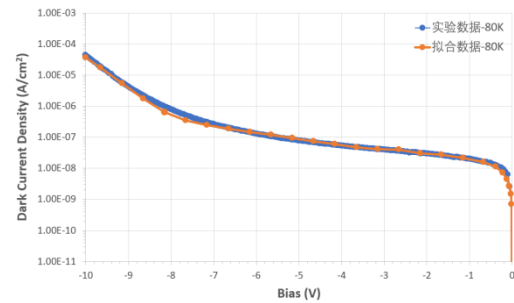


图2 雪崩器件的实验和数值模拟的暗电流曲线对比图

Fig. 2 Comparison of dark current curves between experiment and numerical simulation of avalanche devices

表1 数值模拟中所涉及的器件结构参数

Table.1 Device structure parameters involved in numerical simulation

参数	N+层	Ni层	P层
厚度(μm)	2	2.98	10
掺杂浓度(cm^{-3})	5×10^{17}	1×10^{14}	8×10^{15}
组分	0.3	0.3	0.3

基于表1中的结构参数, 我们首先进行不同温度下的暗电流机制的影响研究。图3为不同工作温度下该器件在OF OV条件下IV拟合结果。可见器件的暗电流密度随着工作温度的升高而变大。以

工作电压在-6V 为例,暗电流密度的随工作温度的变大趋势基本呈现指数增大规律,相较于 80K 工作温度,暗电流密度从约 9.4×10^{-8} 增大到了 200K 下的 $3.5 \times 10^{-2} \text{ A/cm}^2$ 。值得注意的是,当工作偏压大于-7V 后,80K 下电流随偏压的变化趋势与高工作温度下明显不同。这是由于不同工作温度下影响器件暗电流的主导机制发生了变化。

图 4 是在不同工作温度下,对影响器件的不同的暗电流机制的数值模拟结果。分别选取了 4 个工作温度,80 K、100 K、150 K 和 200 K 下。80 K 工作温度下,SRH 复合机制、BBT 复合机制以及雪崩机制对暗电流的起主要贡献,Auger 复合机制和辐射复合机制(量级 1×10^{-10})可以忽略不记。同时可以看到,SRH 复合机制主要在小偏压(约-3 V 以下)情况下占据主导,大偏压情况下 BBT 和雪崩机制占主导。同样的,高工作温度 150 K 和 200 K 下,也是 SRH 复合机制主要在小偏压情况下占据主导,然而在大偏压(约-6V 以上)情况下 BBT 机制已经基本可以忽略不记,主要是雪崩机制占主导。从各个工作温度下主导暗电流大小的机制的变化,我们发现造成不同温度下暗电流曲线形状变化的主要原因是在大偏压情况下电流机制占比的变化,如图所示。

即,在高工作温度下,影响暗电流的主要是 SRH(小偏压)和雪崩机制(大偏压)。对于影响 APD 小偏压下暗电流的 SRH 机制,其主要和材料本身的质量相关,高质量低位错的材料具有更高的 SRH 寿命,更低的 SRH 暗电流。所以,对于高温 APD 器件,材料质量的筛选将尤为重要。而大偏压下的主导暗电流的雪崩机制主要受器件结构参数的影响较大,可以通过以下的器件模拟计算进行结构优化。

由上述模拟分析可知,不同的工作温度对雪崩器件光电性能有很大的影响。因此,我们对高工作温度,这里选取 150K 下的雪崩器件进行数值模拟,

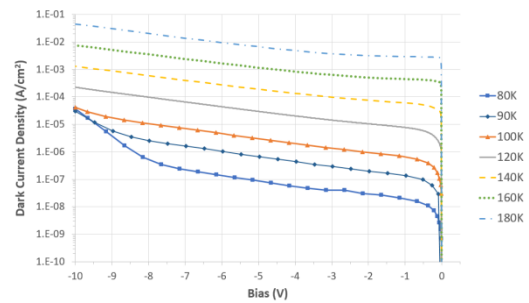


图 3 不同温度下雪崩器件的暗电流密度的变化情况
Fig. 3 Changes of the dark current density of APD devices at different temperatures

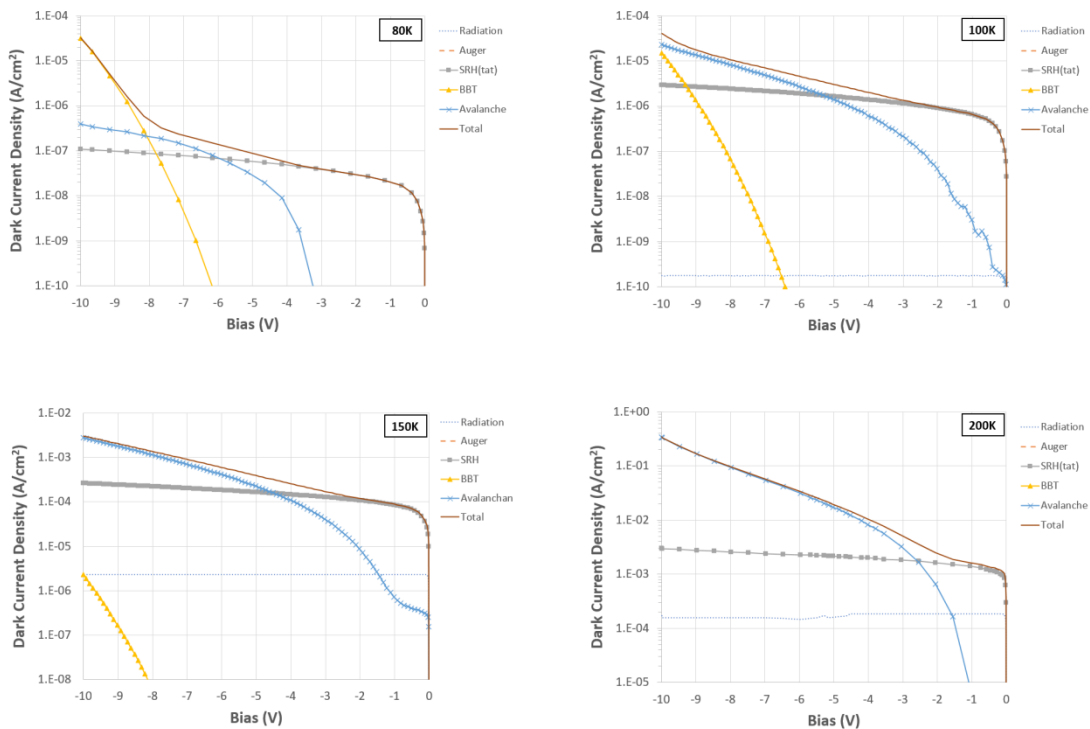


图 4 不同工作温度下影响器件的不同的暗电流机制:(a)80K (b)100K (c)150K (d)200K

Fig.4 Different dark current mechanisms affecting devices at different operating temperatures (a)80K (b)100K(c)150K(d)200K

通过调整此器件结构的结构参数,对比暗电流密度和增益的变化情况,获得了理论上最优化的中波高温雪崩器件结构。

图5显示的是HgCdTe APD器件的暗电流和增益随着不同Ni层厚度的变化情况。这里增益的计算公式如下:

$$M(V) = \frac{I_{Photo}(V)}{I_{Photo}(V=0)} = \frac{I_{Illuminated}(V) - I_{Dark}(V)}{I_{Illuminated}(V=0) - I_{Dark}(V=0)} \quad (1.11)$$

从图5a中可以看到,随着Ni层厚度的减小,器件的暗电流增大,当厚度减小到 $2\mu\text{m}$ 以下时大偏压下器件的暗电流增大趋势陡然增加。这是由于结区厚度减小导致结区的局域电场强度增加引起的。图5b中可以看到,随着Ni层厚度的减小,器件的增益相应增大,但是并未出现如暗电流那样陡然增加的现象。这是由于一般情况下相较于暗电流,APD器件的光电流要远大于暗电流,所以增益主要受光电流影响。一般而言,APD器件的增益越大越好,但是考虑到实际面阵器件的应用需求需要综合考虑增益大小、增益均匀性以及器件可靠性等因素,所以这里我们选取工作偏压在 -6V 附近增益在5附

近。结合暗电流趋势变化结果,获得最优Ni层厚度在 $2\sim 3\mu\text{m}$ 之间。

图6显示的是HgCdTe APD器件的暗电流和增益随着不同Ni层浓度的变化情况。我们在数值模拟两种对Ni层浓度从 $1\times 10^{13}\text{cm}^{-3}$ 到 $1\times 10^{16}\text{cm}^{-3}$ 进行调整,从图中可以得到,Ni层浓度超过 $1\times 10^{15}\text{cm}^{-3}$ 后器件的暗电流开始显著增大,同样综合考虑增益变化情况,获得最优Ni层浓度在小于 $1\times 10^{15}\text{cm}^{-3}$ 。

同样的,我们对APD高温器件结构的P层和N层不同结构参数的变化引起器件性能的变化进行了相应的数值计算,并做出了理论上最优化的选择,获得的理论上最佳的APD高温器件结构(组分 $x=0.3$,工作温度 150K),如表2所示。这些结果将为后续的高温结构APD材料生长和器件制备提供有力的基础支撑。

4 结论

采用常规N-on-P工艺制备形成P-i-N结构的CdZnTe/HgCdTe雪崩结构器件。基于实验结果,应用2维数值模拟对HgCdTe APD结构进行相应模拟研究,获得了 80K 下雪崩器件的结构参数。针对不同工作温度下的APD器件的暗电流机制的变化影

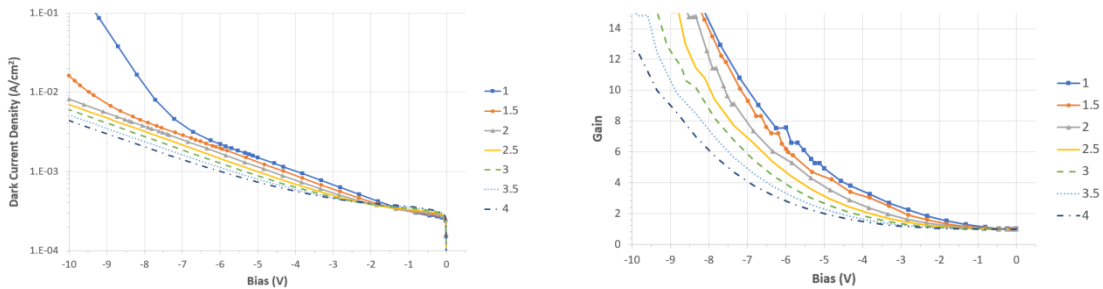


图5 HgCdTe APD器件的暗电流密度和增益随着不同Ni层厚度的变化情况:(a)暗电流密度(b)增益

Fig.5 The dark current density and gain of HgCdTe APD change with different Ni layer thickness (a)Dark current density(b)Gain

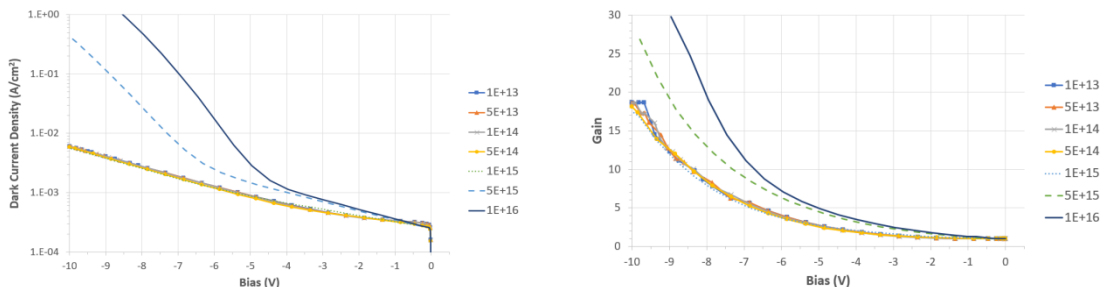


图6 HgCdTe APD器件的暗电流密度和增益随着不同Ni层浓度的变化情况:(a)暗电流密度(b)增益

Fig.6 The dark current density and gain of HgCdTe APD change with different doping of Ni layer (a)Dark current density(b)Gain

表 2 经过数值模拟后最优化的 APD 高温器件(@150K)的结构参数

Table 2 Optimized Structural parameters of HOT HgCdTe APD

参数	N+层	Ni层	P层
厚度(μm)	1 ~ 2	2 ~ 3	9 ~ 10
掺杂浓度(cm^{-3})	$\geq 5 \times 10^{16}$	$\leq 1 \times 10^{15}$	$\geq 3 \times 10^{16}$
组分	0.3	0.3	0.3

响进行研究,发现造成不同温度下暗电流曲线变化的主要原因是在大偏压情况下电流机制占比的变化。因此,我们对在高工作温度情况下各层参数的变化引起器件性能的变化进行了进一步解析,对不同层厚度、掺杂浓度对器件性能的影响进行了相应理论计算。最终,在工作温度 150K,设计 Cd 组分 0.3,获得了理论上最优优化结构的 HgCdTe APD 高温器件结构。研究结果为后续的外延材料生长 HgCdTe APD 高温结构做好了前期准备。

Reference

- [1] Beck J.D., Wan C.-F., Kinch M.A., *et al.*, The HgCdTe Electron avalanche photodiode [J] *J. Electron. Mater.* **35** (6), 1166–1173 (2006).
- [2] Baker I., Duncan S., Copley J., A low noise, laser-gated imaging system for long range target identification [J]. *Proc. SPIE 5406*, 113–144 (2004).
- [3] Reine M.B., Marciniak J.W., Wong K.K., *et al.*, HgCdTe MWIR back-illuminated electron-initiated avalanche photodiode arrays [J]. *J. Electron. Mater.* **36** (8), 1059–1067 (2007).
- [4] Finger G., Baker I., Downing M., *et al.*, Development of HgCdTe large format MBE arrays and noise-free high speed MOVPE EAPD arrays for ground based NIR astronomy [J],

Proc. SPIE 10563, **1056311** (2014).

- [5] Perrais G., Gravrand O., Baylet J., *et al.*, Gain and dark current characteristics of planar HgCdTe avalanche photodiodes [J]. *J. Electron. Mater.* **36** (8), 963–970 (2007).
- [6] Asbrock J., Bailey S., Baley D., *et al.*, Ultra-high sensitivity APD based 3D LADAR sensors: linear mode photon counting LADAR camera for the Ultra-Sensitive Detector program [J], *Proc. SPIE 6940*, 694020 (2008).
- [7] Rothman J., Mollard L., Bosson S., *et al.*, *Short-Wave Infrared HgCdTe Avalanche Photodiodes* [J], *J. Electron. Mater.* **41** (10), 29282936 (2012).
- [8] Kinch, M.A., A theoretical model for the HgCdTe electron avalanche photodiode [J], *J. Electron. Mater.* **37** (9), 1453–1459 (2008).
- [9] J. Rothman, K. Foubert, G. Lasfargues, *et al.*, High operating temperature SWIR HgCdTe APDs for remote sensing [J], *Proc. Of SPIE Vol. 9254 92540P-9* (2014).
- [10] Li Hao, Lin Chun, Zhou Songmin, *et al.*, HgCdTe avalanche photodiode FPA [J], *J. Infrared Millim. Waves*, 2019, **38** (5): 587–590
- [11] Huijun Guo, Yushun Cheng, Lu Chen, *et al.*, The performance of Mid-wave Infrared HgCdTe e-avalanche Photodiodes at SITP [J], *Proc. Of SPIE Vol. 11170*, 111702M (2019).
- [12] Li Xiongjun, Han Fuzhang, Li Lihua, *et al.*, Gain characteristics of MW HgCdTe avalanche photodiodes [J] *J. Infrared Millim. Waves*. 2019, **38** (2): 175–181
- [13] Qiu W C, Hu W D, Chen L, *et al.* Dark current transport and avalanche mechanism in HgCdTe electron-avalanche photodiodes [J], *IEEE Transactions on Electron Devices*, 2015, **62**: 1926–1931.
- [14] Li Q, He J L, Hu W D, *et al.* Influencing sources for dark current transport and avalanche mechanisms in planar and mesa HgCdTe p-i-n electron-avalanche photodiodes [J], *IEEE Transactions on Electron Devices*, 2018, **65**: 572–576.
- [15] OKUTO Y, CROWELL C.R., Threshold Energy Effect on Avalanche Breakdown Voltage in Semiconductor Junctions [J], *Solid-State Electron*, **1975 18**, 161–168.