

文章编号: 1672-8785(2009)11-0035-05

硅基锗 PIN 红外探测器的数值模拟研究

徐敏杰 魏 莹 蔡雪原 杨建红

(兰州大学物理科学与技术学院微电子研究所, 甘肃兰州 730000)

摘要: 本文基于漂移扩散模型, 对硅基锗 PIN 红外探测器的电流特性随应变、Ge 吸收层厚度、吸收层掺杂浓度的变化进行了数值模拟, 并给出了一种器件优化设计方案。研究结果表明, 当 Ge 应变从 0 增加到 0.3% 时, 器件的暗电流增大了约 50%; 当 Ge 吸收层厚度从 $1\mu\text{m}$ 增加到 $4\mu\text{m}$ 时, 器件的暗电流降低了近 80%, 量子效率增大了近 1 倍; 当吸收层的掺杂浓度由 $1 \times 10^{14}\text{cm}^{-3}$ 增大 2 个量级时, 器件的光电流降低了近 60%。综合考虑吸收层厚度对器件量子效率和暗电流的影响以及吸收层掺杂浓度对光电流的影响, 对硅基锗 PIN 红外探测器的外延锗吸收层进行了设计: 外延生长厚度为 $4\mu\text{m}$, 掺杂浓度为 $1 \times 10^{14}\text{cm}^{-3}$, 以期能为提高器件性能和制备实际器件提供良好的依据。

关键词: 红外探测器; PIN; 锗; 暗电流; 应变

中图分类号: TN382 **文献标识码:** A

Study of Si-based Ge PIN Infrared Detector with Numerical Simulation

XU Min-jie, WEI Ying, CAI Xue-yuan, YANG Jian-hong

(Institute of Microelectronics, School of Physical Science and Technology,
Lanzhou University, Lanzhou 730000, China)

Abstract: The variation of the current characteristics of a Si-based Ge PIN infrared detector with the strain, thickness and doping concentration of a Ge absorption layer is numerically simulated on the basis of a drift-diffusion model and an optimized device design scheme is given. The research result shows that when the tensile strain of the Ge absorption layer is increased from 0 to 0.3%, the dark current of the device is increased by about 50%; when the thickness of the Ge absorption layer is increased from $1\mu\text{m}$ to $4\mu\text{m}$, the dark current of the device is decreased by about 80% and its quantum efficiency is nearly doubled; and when the doping concentration of the Ge absorption layer is increased from $1 \times 10^{14}\text{cm}^{-3}$ to $1 \times 10^{16}\text{cm}^{-3}$, the dark current of the device is decreased by about 60%. In view of the effect of absorption layer thickness on the quantum efficiency and dark current of the device and the effect of doping concentration of the absorption layer on photocurrent, the Ge absorption layer of the Si-based Ge PIN infrared detector is designed to have a thickness of $4\mu\text{m}$ and a doping concentration of $1 \times 10^{14}\text{cm}^{-3}$. It is expected that this design can provide a good basis for the improvement of device performance and the fabrication of practical devices.

Key words: infrared detector; PIN; SiGe; dark current; tensile strain

收稿日期: 2009-07-01

作者简介: 徐敏杰 (1985-), 男, 浙江杭州人, 硕士研究生, 主要从事器件物理与器件模型的研究。E-Mail: xumj08@lzu.cn

1 引言

光电探测器是一种接收光信号并进行光电转换的特种器件，是光接收机的关键。现代的任何光电系统都包含光波的产生、传输、放大、探测等功能，所以光电探测器是光电系统中不可缺少的重要器件^[1]。PIN红外探测器是目前通用的红外光电探测器之一，其优点在于通过对耗尽层厚度的调节，也就是对I层(本征层)厚度的调节，达到对量子效率和频率响应等指标进行优化的目的。它是一种具有宽响应波长、低暗电流、高响应速度和高量子效率的高性能光电探测器。

III-V族、II-VI族化合物半导体材料是光电子领域所使用的传统材料。它们在1.30μm~1.55μm具有较大的吸收系数，是制作光吸收区的理想材料。但是该材料价格较高、导热性能不佳、机械性能较差，且不能与现有的成熟硅基工艺兼容，因而极大地限制了它在光电集成技术中的应用^[2]。而在Si中引入Ge组分制作的异质结构，不仅可与现有的成熟硅工艺相兼容，并可极大地提升硅在光电子学领域的应用潜力，而且还可打破III-V族和II-VI族化合物半导体对光电子技术发展的束缚。目前对SiGe材料已有多方面的研究，例如：通过在硅衬底上外延纯Ge并将其作为有源区，从而制作高性能长波光电探测器；利用Si基Si_{1-x}Ge_x合金材料制作新型光电子器件，其主要特点是带隙宽度可由Ge组分来调节，并可使探测器的峰值波长在0.85μm~1.60μm范围内变化，且器件的暗电流较低^[3]。

然而，Si和Ge晶格常数的不同会造成Si/Ge异质结界面有4%的晶格失配，因此直接在Si衬底上外延生长Ge会引入大量的失配位错，且表面起伏严重，会大大降低器件的性能。目前国际上已发展了许多在硅衬底上外延生长高质量Ge材料的方法。Luan等人^[4]通过两步超高真空/化学气相沉积及高低温循环热退火工艺，在Si衬底上外延生长出了低位错密度的Ge层，其位错密度只有2.33×10⁷cm⁻²，表面非常平整。但

是，从已发表的文献来看，现在对硅基锗红外探测器的研究主要集中在硅锗生长工艺的改善以及对器件性能的分析上，鲜有专门讨论PIN结构参数设计的文章。本文以数值方法模拟了硅基锗PIN红外探测器中的应变、锗吸收层厚度、吸收层掺杂浓度等因素对器件暗电流、光电流、量子效率等特性的影响，分析讨论了其背后的物理机理，对器件的设计和制备具有一定的指导作用。

2 模拟方法与器件结构

本文主要基于漂移扩散模型，采用SGFramework对硅基锗PIN红外探测器的电流特性进行模拟分析。通过自洽求解泊松方程和电流连续性方程，可以得到器件的电流特性^[5]为

$$\nabla(\varepsilon \nabla \psi) = q(n - p + C) + Q_T \quad (1)$$

$$\nabla J_n - q \frac{\partial n}{\partial t} = q(R - G) \quad (2)$$

$$\nabla J_p + q \frac{\partial p}{\partial t} = q(G - R) \quad (3)$$

式中，n和p分别为电子密度和空穴密度，J_n和J_p是相应的电流密度，ε是材料的介电常数，ψ是电势，C为电离杂质浓度，Q_T是由缺陷导致的位错电荷，G为电子-空穴对的产生率，R为复合率。

模型中电子和空穴的电流密度J_n和J_p分别为^[6]

$$J_n = qD_n \nabla n - qn\mu_n \nabla \psi - \mu_n n [kT_L \nabla(\ln n_{ie})] \quad (4)$$

$$J_p = -qD_p \nabla p - qp\mu_p \nabla \psi + \mu_p p [kT_L \nabla(\ln n_{ie})] \quad (5)$$

式中，T_L是晶格温度，n_{ie}是有效本征载流子浓度，k为玻尔兹曼常数，μ_n和μ_p分别是电子和空穴的迁移率，D_n和D_p是相应的扩散系数(扩散系数与迁移率由爱因斯坦关系D/μ=kT/q联系起来)。

载流子浓度n和p分别为

$$n = n_{ie} \exp \left[\frac{q(\psi - \phi_n)}{kT_L} \right] \quad (6)$$

$$p = n_{ie} \exp \left[\frac{-q(\psi - \phi_p)}{kT_L} \right] \quad (7)$$

式中，φ_n和φ_p分别是电子和空穴的准费米电势。

考虑到器件电场对载流子迁移率的影响，我们采用弱场的 Caughey-Thmons 模型^[7] 来定义载流子迁移率：

$$\mu_n(E) = \mu_{n0} \sqrt{1/[1 + (\mu_{n0} E/V_{Dn})^2]} \quad (8)$$

$$\mu_p(E) = \mu_{p0} / (1 + \mu_{p0} E/V_{Dp}) \quad (9)$$

式中， μ_{n0} 和 μ_{p0} 分别是弱电场下电子和空穴的迁移率， V_{Dn} 和 V_{Dp} 分别是电子和空穴运动的饱和速度， E 为电场。

当光照射探测器时，电子-空穴对的产生率 G 为^[8]

$$G = P_{opt} \frac{1-R}{Ahv} \alpha e^{-\alpha x} \quad (10)$$

式中， P_{opt} 为入射光功率， A 为器件面积， $h\nu$ 为光子能量， α 为材料的光吸收系数。

此外，我们采用俄歇复合率模型来定义电子-空穴对的复合率 R ：

$$R = r(np - n_i^2) \quad (11)$$

式中， r 为复合概率，根据 Langevin 复合模型^[9]， $r = q(\mu_n + \mu_p)/\varepsilon$ 。将式(4)至式(11)代入载流子连续方程式(2)和式(3)中，通过自恰求解泊松方程和载流子连续性方程，即可获得器件的载流子浓度和电势分布。

本文所研究的硅基锗 PIN 型红外探测器由 p^+ -Si 层、i-Ge 吸收层及 n^+ -Ge 外延层构成，器件的二维结构如图 1 所示。探测窗口的直径为 $60\mu\text{m}$ ，阴极电极和阳极电极分别与 n^+ -Ge 和 p^+ -Si 形成肖特基接触，入射光从顶部入射（不考虑表面反射）。在本文的模拟计算中， n^+ -Ge 层的厚度固定为 $0.15\mu\text{m}$ ， p^+ -Si 层的载流子掺杂浓度固定为 $1 \times 10^{19}\text{cm}^{-3}$ 。

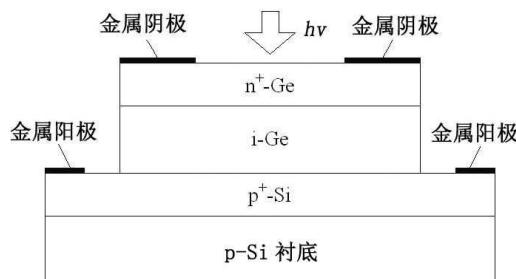


图 1 硅基锗 PIN 型红外探测器的结构图

3 结果与讨论

本文首先研究了本征层 Ge 应变对硅基锗 PIN 红外探测器暗电流 I_d 的影响。在模拟中，本征吸收层的厚度为 $1.85\mu\text{m}$ ，掺杂浓度为 $1 \times 10^{20}\text{cm}^{-3}$ 。图 2 给出了不同 Ge 应变下通过模拟计算得到的器件暗电流。从图 2 中可以看出，当 Ge 应变为 0 时（即 Si 与其衬底上外延生长的 Ge 晶格完全匹配的理想情况），暗电流最小。随着 Ge 应变的增大，暗电流不断增大。当 Ge 应变为 0.3% 时，器件的暗电流增大了约 50%。

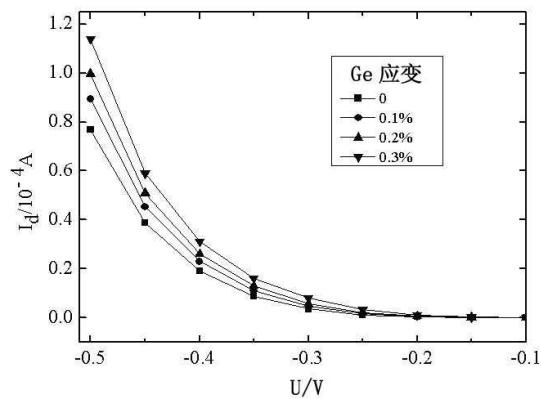


图 2 不同 Ge 应变下 (0%、0.1%、0.2%、0.3%)，硅基锗 PIN 红外探测器暗电流 I_d 随电压的变化关系

应变是 Si 衬底上外延生长的 Ge 材料在高温退火后的冷却过程中产生的，这是由于 Ge 的热膨胀系数 ($5.5 \times 10^{-6}/\text{K}$) 大于 Si 的热膨胀系数 ($2.44 \times 10^{-6}/\text{K}$) 所致。这种应变受到 Si 衬底的限制，并将在 Ge 晶体中产生平行于衬底的双向张应力。根据计算结果^[9]，受生长温度和厚度的限制，Ge 中的应变大小在 $0.1\% \sim 0.34\%$ 范围。而随着应变的增大，Si/Ge 异质结界面处会出现大量不配对的悬挂键。悬挂键是不饱和键，容易俘获电子，在其周围会形成空间电荷区。而这些悬挂键排列起来会组成一些刃型位错，这对探测器的性能有非常大的影响。贯穿 pn 结的位错会导致隧道电流的增大，而且位错作为少子的复合中心具有电学活性。它们会通过肖克莱-里德-霍尔复合作用缩短少子寿命，增大器件的暗电流和噪声，从而严重影响器件的性能^[10]。

据 J.H.Tregilgas 报道，MIS 暗电流几乎与位错密

度成线性变化，其效率大约是 0.8^[11]。从这个角度来说，改善外延工艺和减小应变，可以降低暗电流，提高器件性能。此外，可以从另一角度来考虑该问题，即随着 Ge 应变的增加，Ge 晶体中张应力增大。这将导致 Ge 能带结构中的 Γ 能谷和 L 能谷之间的能量差变小，而能谷间的散射可能会对光生载流子在电场中的输运产生影响。它会加速光生载流子在 I 区的复合，增大耗尽层中载流子的产生 - 复合电流，从而对器件暗电流的增大产生影响。

其次，本文研究了本征吸收层厚度对器件的量子效率 η_i 的影响。模拟中，本征吸收层的掺杂浓度固定为 $1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ 。图 3 表示的是本征吸收层的应变为 0.2% 时通过模拟计算得到的不同吸收层厚度下探测器的量子效率。从图中可以看出，当吸收层厚度为 1 μm 时，器件的量子效率最小，例如，在光通信低损耗窗口波长为 1.55 μm 时，量子效率约等于 0.35。随着吸收层厚度的增加，器件的量子效率增大。当吸收层厚度为 4 μm 时，量子效率增大了近 1 倍。由此可见，吸收层厚度对器件的量子效率是有较大影响的。

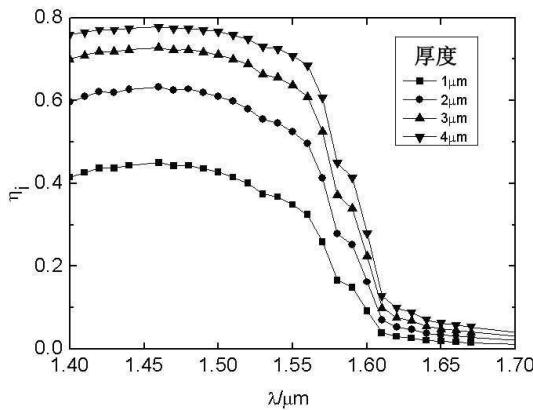


图 3 不同吸收层厚度 (1 μm 、 2 μm 、 3 μm 、 4 μm) 下硅基锗 PIN 红外探测器的量子效率 η_i 随波长的变化关系

量子效率 η_i 是指吸收一个入射光子能够产生的电子 - 空穴对个数。由于 η_i 与材料的吸收系数 α 以及吸收层的厚度 W 相关，因此 η_i 可表示为^[12]

$$\eta_i = 1 - e^{-\alpha(\lambda)W} \quad (12)$$

式中， $\alpha(\lambda)$ 是对应波长的吸收系数。当入射波长小于材料光吸收极限波长 λ_0 时， $\alpha(\lambda)$ 随波长的减小而增大。由式 (2) 可见，材料的吸收系数越大或者吸收层越厚，探测器的量子效率就越高。因此在短波长范围内，吸收层的厚度越大，器件的量子效率也越大。

暗电流是指探测器在没有光照条件下加有一定反向工作电压时的反向漏电流，是红外探测器的一个重要指标。为此，本文研究了本征吸收层厚度对器件的暗电流的影响。图 4 给出了本征吸收层的应变为 0.2% 时，不同吸收层厚度 (1 μm ~ 4 μm) 下探测器的暗电流随电压的变化关系。从图中可以看出，当吸收层的厚度为 1 μm 时，器件的暗电流最大。随着吸收层厚度的增大，暗电流不断减小。当吸收层的厚度为 4 μm 时，器件的暗电流降低了近 80%。

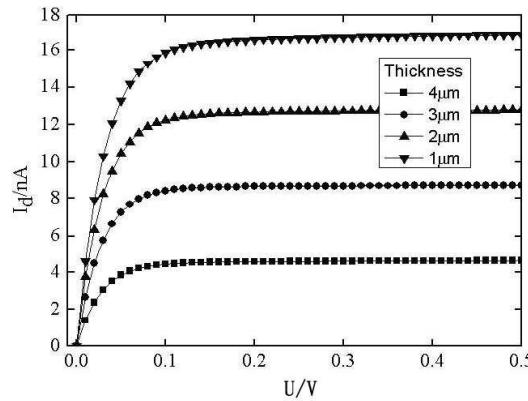


图 4 不同吸收层厚度 (1 μm 、 2 μm 、 3 μm 、 4 μm) 下，硅基锗 PIN 红外探测器的暗电流随电压的变化关系

当外延吸收层的厚度为 1 μm 时，吸收层恰好处于完全耗尽的状态。此时，本征 Ge 的禁带宽度为 0.66eV，同铝电极形成的金属半导体相接触的肖特基势垒较低，其高度为 0.48eV。这使得有较多的热激发产生载流子越过势垒，而形成较大的暗电流。此时的载流子输运机理不同，即金属阳极电子在输运时需越过吸收层的势垒到达 n⁺-Ge 区 (这种情况类似于肖特基器件的载流子输运机理)。但随着吸收层厚度的进一步增大，吸收层没有完全耗尽，器件属于常规状态下的 PIN，故暗电流主要由耗尽层中载流子的产

生-复合电流、耗尽层边界的少子扩散电流及表面漏电流所构成, 因此器件的暗电流减小。

考虑到实验中衬底杂质在工艺过程中会扩散到本征 Ge 层中, 我们模拟了不同的 Ge 吸收层掺杂浓度对器件光电流 I_{PD} 的影响, 如图 5 所示。在模拟中, 本征吸收层的厚度固定为 $1.85\mu\text{m}$, 应变固定为 0.2%。从图 5 中可以看出, 当吸收层的掺杂浓度为 $1 \times 10^{14}\text{cm}^{-3}$ 时, 器件的光电流最大。随着吸收层掺杂浓度的增大, 光电流减小了。当吸收层的掺杂浓度为 $1 \times 10^{16}\text{cm}^{-3}$ 时, 器件的光电流降低了近 60%。这是因为掺杂浓度的增大加强了 Ge 吸收层中载流子的散射, 从而减少了载流子寿命, 因此器件的光电流减小。

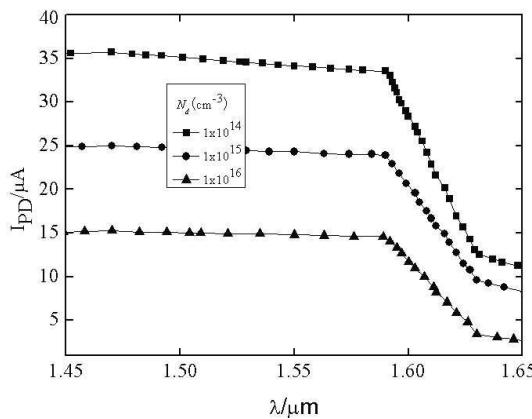


图 5 不同 Ge 吸收层掺杂浓度 N_d ($1 \times 10^{14}\text{cm}^{-3}$ 、 $1 \times 10^{15}\text{cm}^{-3}$ 、 $1 \times 10^{16}\text{cm}^{-3}$) 下, 硅基锗 PIN 红外探测器的光电流 I_{PD} 随波长的变化关系

根据模拟结果, 当 Ge 吸收层厚度从 $1\mu\text{m}$ 增加到 $4\mu\text{m}$ 时, 器件的暗电流降低了近 80%, 量子效率增大了近 1 倍。因此, 我们给出外延 Ge 吸收层厚度的优化设计为外延生长 $4\mu\text{m}$ 。吸收层的本征掺杂浓度为 $1 \times 10^{14}\text{cm}^{-3}$, 其增大两个量级时, 器件的光电流降低了近 60%, 故将吸收层的掺杂浓度定为 $1 \times 10^{14}\text{cm}^{-3}$ 。

4 结论

本文对硅基锗 PIN 红外探测器的暗电流、光电流、量子效率等特性随应变、Ge 吸收层厚度、吸收层掺杂浓度等因素的影响进行了数值分析研究。从模拟计算的结果中可以看出, 减小本

征层 Ge 的应变或增大吸收层的厚度, 可以减小器件的暗电流, 改善器件的性能。探测器光电流随吸收层掺杂浓度的增大而显著减小, 且吸收层的掺杂浓度对光电流有较大的影响。同时, 器件的量子效率与吸收层厚度有关。在短波长范围内, 量子效率随吸收层厚度的增大而增大。本文并对模拟结果进行了分析与讨论, 找出了主要的影响因素, 这对器件的设计和制备有一定的指导作用。下一步的工作是将雪崩倍增层及共振腔加入到探测器结构中进行研究, 以期进一步提高红外探测器的主要参数水平。

参考文献

- [1] 王辉, 杨型健, 刘淑平. 异质结光电探测器的性能研究 [J]. 红外, 2005, 26(12): 5–8.
- [2] 蔡志猛, 周志文, 李成, 等. 硅基外延锗金属-半导体-金属光电探测器及其特性分析 [J]. 光电子·激光, 2008, 19(5): 587.
- [3] 莫太山, 张世林, 郭维廉, 等. 横向 SOI 锗硅光电探测器的数值模拟 [J]. 半导体光电, 2003, 24(4): 242.
- [4] Luan HC, Lim DR, Lee KK, et al. High quality Ge epilayers on Si with low threading dislocation densities [J]. Appl. Phys. Lett., 1999, 75(19): 2909–2911.
- [5] 刘恩科, 朱秉升, 罗晋生. 半导体物理学 (第六版) [M]. 北京: 电子工业出版社, 2003: 147–181.
- [6] Selberherr S. Analysis and Simulation of Semiconductor Devices [M]. Springer Verlag, New York, 1984: 11–22.
- [7] Caughey DM, Thomas RE. Carrier Mobilities in Silicon Empirically Related to Doping and Field [M]. Proc. IEEE, 1967: 2192–2193.
- [8] 施敏. 半导体器件物理 (第二版) [M]. 北京: 电子工业出版社, 1987: 540–544.
- [9] Scott JC, Karg S, Carter SA. Bipolar charge and current distributions in organic light-emitting diodes [J]. Journal of Applied Physics, 1997, 82(3): 1454–1456.
- [10] 王婉丽. HgCdTe 的位错及其对器件性能影响的研究 [J]. 红外, 2005, 26(5): 5–12.
- [11] Tregilgas JH, Polgreen TL, Chen MC. Recent developments in HgCdTe and HgZnTe growth from Te solutions [J]. Journal of Crystal Growth, 1988, 86(1): 138–145.
- [12] 陈弘达. 微电子与光电子集成技术 [M]. 北京: 电子工业出版社, 2008: 91.