

分子束外延 HgCdTe nBn 结构红外探测器的 理论计算和优化

沈川, 陈路, 傅祥良, 王伟强, 卜顺栋, 何力

(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)

摘要:通过 2 维数值模拟对 HgCdTe nBn 红外探测器的光电性质进行了研究. 理论计算了 nBn 结构中各层的参数的变化(包含厚度的变化、掺杂浓度的变化以及组分)对器件性能的影响规律. 通过优化上述器件结构参数, 理论上获得了最优化结构的 HgCdTe nBn 器件, 为获得高性能 MBE 外延 HgCdTe nBn 红外探测器提供重要参考.

关键词:分子束外延; HgCdTe; nBn 结构; 数值模拟

中图分类号: O471.5, O782 **文献标识码:** A

Simulation and design of HgCdTe nBn detectors grown by MBE

SHEN Chuan, CHEN Lu, FU Xiang-Liang, WANG Wei-Qiang, PU Shun-Dong, HE Li

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

Abstract: In this paper, 2-D numerical simulation was performed on HgCdTe nBn detectors to study the photoelectric characteristics. We changed the parameters of each layer of HgCdTe nBn structure, including thickness, doping concentration and Cd composition, to study the variation of performance of nBn devices. We also proposed an optimal nBn structure for achieving high performance of HgCdTe nBn Detectors.

Key words: MBE, HgCdTe, nBn, numerical simulation

PACS: 68.55.Ln, 72.80.Ey, 81.05.Dz

引言

众所周知, 由于 HgCdTe 材料具有高吸收系数、高量子效率、波段可调等优点, 已成为制作红外光电探测器以及新一代红外焦平面器件发展的优选材料^[1-3]. 然而, 常规结构的 HgCdTe 材料都面临着 P 型掺杂的问题. 不管是 Hg 空位掺杂还是 As 掺杂, 由于其各自的局限性大大的限制了 HgCdTe 器件的发展.

最近, 一种单极性的新型 HgCdTe 结构——N 型 HgCdTe nBn 结构——被美国密西更大学 Anne 等人提出^[4-6]. 其优势在于区别于传统的 PN 结结构

HgCdTe, 此结构完全摒弃了 P 型掺杂, 仅采用 N 型掺杂和能带的剪裁设计获得类似于 PN 结的特性. 实际上, nBn 结构最先被应用于 III-V 族材料器件结构上^[7-8]. 然而, HgCdTe nBn 结构虽然类似于 III-V 族材料 nBn 结构, 但是其依然存在自身不同的特点. 首先并且是最重要的一点是, HgCdTe nBn 结构在能带上区别于 III-V 族材料 nBn 结构. 其在势垒层界面处存在一个非零的价带尖峰, 而正是由于这个价带尖峰的存在将一定程度上影响载流子的迁移从而影响器件性能. 其次, 在 HgCdTe nBn 结构中, 其势垒区的导带差值较小, 由此易于热激发载流子越过导带势垒. 所以, 在分子束外延生长 HgCdTe

收稿日期: 2015-10-01, 修回日期: 2016-01-18

基金项目: 国家自然科学基金(61306062)

Foundation items: Supported by National Natural Science Foundation of China (61306062)

作者简介(Biography): 沈川(1985-), 男, 上海, 博士, 主要研究领域为 HgCdTe 材料和器件. E-mail: shenchuan@mail.sitp.ac.cn

Received date: 2015-10-01, revised date: 2016-01-18

nBn 器件之前,通过 2 维数值模拟对此结构的光电性质进行了预先研究,通过能带剪裁计算优化 nBn 结构中各层的参数,将是获得高性能 HgCdTe nBn 器件的重要基础.

1 器件结构

本文数值模拟计算所用到的 HgCdTe nBn 结构示意图如图 1 所示. 其中,主要的 nBn 三层结构分别为,盖帽层 Nc、势垒层 B 以及作为吸收层的 Na. 数值模拟中采用背入射方式,即入射光从衬底层入射进入吸收层被 Na 吸收. 其中,数值模拟中应有的详细材料参数如表 1 所示.

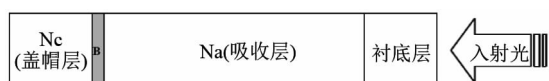


图 1 HgCdTe nBn 结构示意图
Fig. 1 The schematic of HgCdTe NBN

表 1 数值模拟中的材料与结构参数 4
Table 1 Parameters of the HgCdTe NBN structure used in the simulation

参数名	值	单位
吸收层 Cd 组分	0.228 9	/
温度	77	K
电子 SRH 寿命	10	μs
空穴 SRH 寿命	1	μs
E_v/E_g	0.25	/
F_1F_2	0.3	/

2 拟合模型

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^[9-10]. Poisson 方程定义如下:

$$\nabla \cdot \epsilon \phi = -q(p - n + N_D - N_A) - \rho_{\text{trap}}, \quad (1)$$

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. 定义为陷阱电荷密度. 电子和空穴连续性方程定义如下:

$$\nabla \cdot \vec{J}_n = qR_{\text{net}} + q \frac{\partial n}{\partial t}, \quad (2)$$

$$-\nabla \cdot \vec{J}_p = qR_{\text{net}} + q \frac{\partial p}{\partial t}, \quad (3)$$

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, 复合速率常常被定义为 SRH 复合、Auger 复合和辐射复合速率之 \vec{J}_n 和

\vec{J}_p . 电子和空穴电流密度和又可以表示为如下方程:

$$\vec{J}_n = -nq\mu_n \nabla \Phi_n, \quad (4)$$

$$\vec{J}_p = -nq\mu_p \nabla \Phi_p, \quad (5)$$

其中, μ_n 、 μ_p 为电子和空穴迁移率, Φ_n 、 Φ_p 为电子和空穴准费米势.

HgCdTe nBn 结构模型计算中,采用 Newton 迭代数值方法对 Poisson 方程和电流连续性方程进行相关计算. 同时,采用微分方法,对结构模型的几何区域进行微小划分,在每个微分区域中采用数值运算获得计算结果. 如图 2 所示,为一个最简单的 nBn 结构,对其进行大量的微分划分^[11].

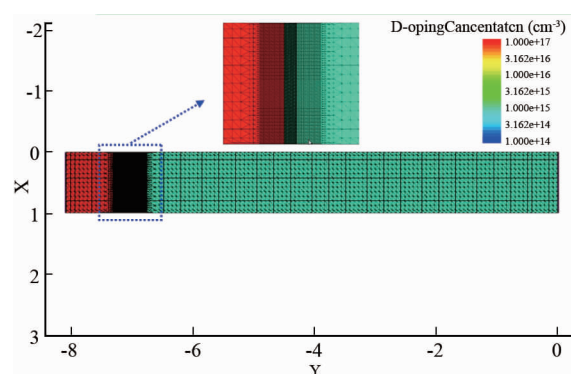


图 2 NBN 模型计算中的网格微分
Fig. 2 Mesh structure of the NBN model

3 结果和讨论

图 3 显示的是 HgCdTe nBn 结构的峰值探测率和暗电流密度随势垒层 B 的组分变化情况. 对于截至波长 $9.5 \mu\text{m}$ 器件结构,计算了 B 层组分变化从 0.4 到 0.58 区间的器件性能. 从图中可以看到, nBn 器件的暗电流密度随着 B 层组分的变大而快速变小,当组分变大到 0.48 以后,其值开始趋于饱和,几乎不再变小. 而作为一般器件综合性能评价的峰值探测率,其随 B 层组分的变大存在一个先变大后变小的过程. 在 B 层组分为 0.46 ~ 0.52 之间,峰值探测率出现一个最高值平台,由此说明对于截止波长 $9.5 \mu\text{m}$ 的 HgCdTe nBn 器件结构, B 层组分的在此区间选取可以获得最优化的器件性能. 而且此区间同样对应着暗电流密度趋于最小的组分.

此 B 层组分引起的 HgCdTe nBn 器件性能变化,可以从其反偏工作时的能带结构中获得解释. 如图 4 为三种不同 B 层组分为 0.42, 0.48 和 0.56 对应得 nBn 结构的能带变化. 从图中可以看到,结构中的导带势垒高度随着 B 层组分的增加而增加,从

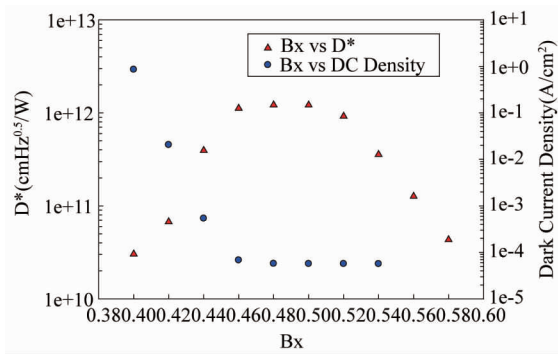


图3 HgCdTe NBN 结构的峰值探测率和暗电流密度随 B 层的组分变化情况
 Fig. 3 Calculating dependence of the calculated peak detectivity and dark current density on Bx for HgCdTe NBN structure

而其能更有效地阻挡导带多数载流子的运动,最直接的表现是器件暗电流的减小. 显而易见,随着势垒高度持续增加,对多子迁移的阻挡作用将最终趋于饱和,这也符合图 3 中暗电流密度最终趋于稳定. 同样图中也能看到,随着 B 层组分的增加,价带势垒也是增加的,这也阻挡了吸收层空穴少子的迁移,降低了器件的响应率. 所以,对于 B 层组分的选取需要考虑两种作用的中和效应,即考虑器件暗电流,又考虑器件响应率.

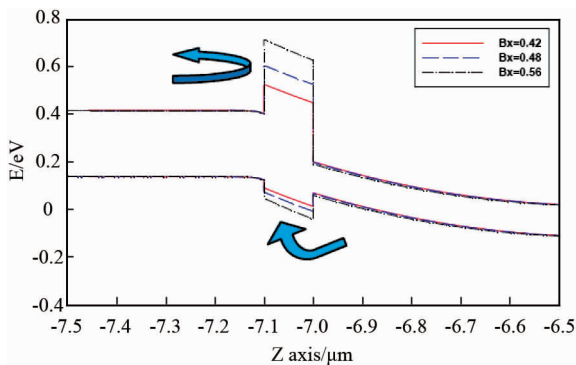


图4 HgCdTe nBn 结构的能带随 B 层的组分变化情况
 Fig. 4 the sharp change of the band of HgCdTe NBN structure

理论计算中,我们一般采用器件的峰值探测率 D^* 来进行表征器件综合性能,并参考暗电流密度和响应率情况. 其公式如下:

$$D^* = \frac{R_\lambda \sqrt{A}}{i_n} \quad (6)$$

其中, R_λ 是器件峰值响应率, A 是光敏元面积, i_n 是暗电流密度.

图 5 显示的是 HgCdTe nBn 结构的峰值探测率

和暗电流密度随势垒层 B 的厚度组分变化情况. 图中可以看到,其暗电流密度随 B 层厚度的增加而变小. 然而,当 B 层厚度大于 $0.1 \mu\text{m}$ 时,其峰值探测率显著降低,这也是由于价带尖峰的变化引起器件响应的减小,造成其峰值探测率的降低. 所以,最佳的 B 层厚度应该小于 $0.1 \mu\text{m}$. 然而,值得一提的是,由于本次计算过程中未考虑到隧穿效应,实际上 B 层厚度不能太小,过小的 B 层厚度会大大增加载流子的隧穿几率从而大大增加暗电流密度,引起器件性能下降.

图 6 显示的是不同的 B 层掺杂浓度对器件性能的影响,评价标准依然是器件的峰值探测率和暗电流密度. 当 B 层掺杂浓度小于 $1 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$ 时,其对器件性能几乎没有影响,然而当其浓度大于 $1 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$ 时, nBn 结构的器件性能持续变差.

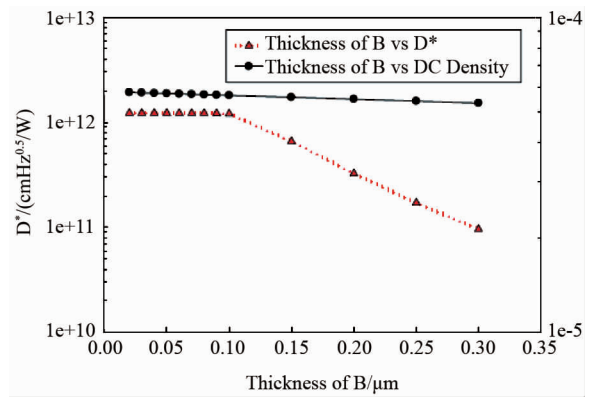


图5 B 层厚度变化对器件性能影响
 Fig. 5 Variation of the device performance changing with the thickness of barrier layer

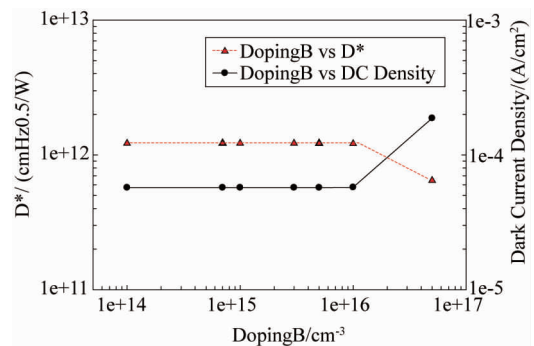


图6 B 层浓度变化对器件性能影响
 Fig. 6 Variation of the effects to the device performance by changing the doping concentrations of the barrier layer

由此,可以对 nBn 结构的 B 层参数做出理论上最优化的选择,如下表:

表 2 经过数值模拟后最优化的 B 层参数

Table 2 Parameters of barrier layer after optimization

nBn 结构区间	组分	厚度(μm)	浓度(cm ⁻³)
势垒层(B层)	0.46 - 0.5	0.05 - 0.1	< 1E16

同样,nBn 结构的 Na 层和 Nc 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理论计算. Na 层的组分由对应的截止波长 9.5 μm 决定,计算中为 0.2289. 图 7、图 8 分别为 Na 层和 Nc 层的厚度、浓度以及组分的变化引起的 nBn 结构器件性能的变化. 从图中,我们同样可以对 nBn 结构的 Na 层和 Nc 层的结构参数做出理论上最优化的选择. 结合 B 层的参数,可以获得理论上最佳的 nBn 结构(截止波长 9.5 μm),如表 3 所示.

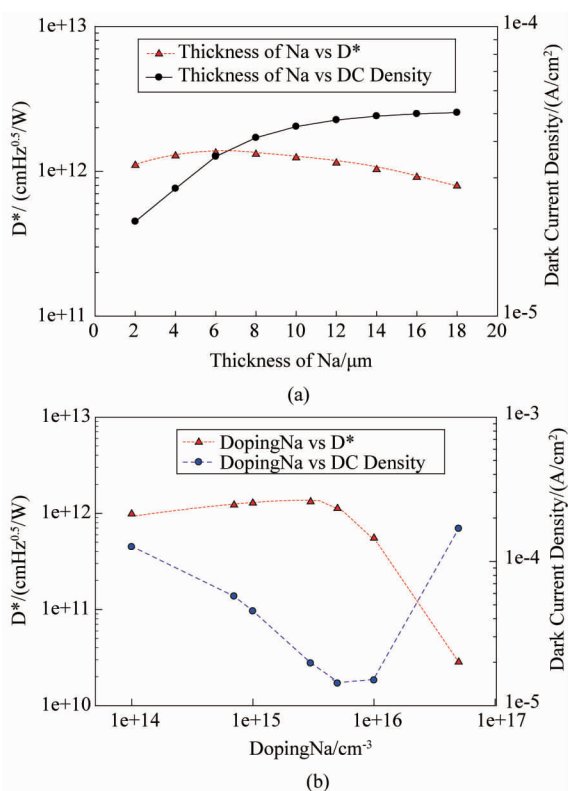


图 7 Na 层参数变化对器件性能影响 (a)厚度 (b)浓度
Fig. 7 Dependence of the device performance changing on the parameters of the absorb layer

表 3 经过数值模拟后最优化的 nBn 结构参数

Table 3 Parameters of HgCdTe NBN structure after optimization

nBn 结构区间	组分	厚度(μm)	浓度(cm ⁻³)
盖帽层(Nc 层)	0.228 9 ~ 0.328 9	< 1	< 1E17
势垒层(B 层)	0.46 ~ 0.5	0.05 ~ 0.1	< 1E16
吸收层(Na 层)	0.2289	6 ~ 8	< 5E15

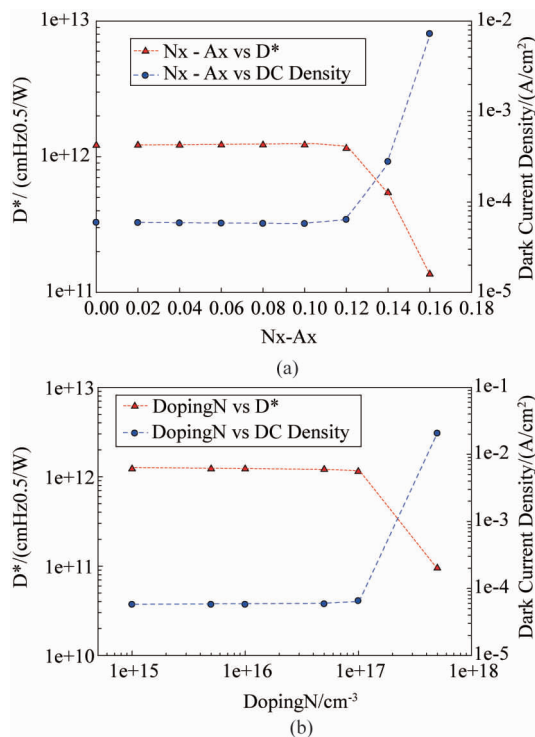


图 8 Nc 层参数变化对器件性能影响 (a)组分, (b)浓度
Fig. 8 The dependence of the device performance changing on the parameters of the cap layer

4 结论

采用二维数值模拟对 HgCdTe nBn 结构中各层参数的变化引起结构能带的变动进行了研究. 获得了随着结构参数的变化,其 nBn 结构的能带图出现趋势性的变化,其主要表现在势垒区及其界面处. nBn 结构的势垒区如 PN 结类似,影响结构中的载流子迁移扩散特性,从而对器件的性能造成影响. 对不同层厚度、掺杂浓度以及组分对器件性能的影响进行了理论计算,并对计算结果进行相应的对比研究,获得了理论上最优化结构的 HgCdTe nBn 器件. 研究结果为后续分子束外延材料生长 HgCdTe nBn 结构做好了前期准备.

References

[1] Rogalski A. Recent progress in infrared detector technologies[J], *Infrared Physics & Technology*, 2011, **54** (3):136 - 154.
[2] Qiu W, Hu W. Laser beam induced current microscopy and photocurrent mapping for junction characterization of infrared photodetectors[J], *Science China-Physics Mechanics & Astronomy*, 2015, **58**(2) : 027001.

(下转第 293 页)

率、低噪声的热敏红外探测器。

References

- [1] ZHANG Lei-Bo, HOU Yun, ZHOU Wei, *et al.* Investigation on optical properties of NiMn₂O₄ films by spectroscopic ellipsometry[J]. *Solid State Commun.*, 2013, **159**: 32 – 35.
- [2] DOBRZANSKI L, NOSSARZEWSKA-ORLOWSKA E, NOWAK Z, *et al.* Micro machined silicon bolometers as detectors of soft X-ray, ultraviolet, visible and infrared radiations[J]. *Sensors and Actuators A*, 1997, **60**:154 – 159.
- [3] Chen C, Yi X, Zhao X, *et al.* Characterizations of VO₂-based uncooled microbolometer linear array [J]. *Sensors and Actuators A*, 2001, **90**: 212 – 214.
- [4] BALIGA S, ROST M, DOCTOR A. Sputtered film thermistor IR detectors[C], *Proc. SPIE 2225, Infrared Detectors and Focal Plane Arrays III*, 1994: 72 – 78.
- [5] ALMASRI M, BUTLER D P, CELIK-BUTLER Z. Self-supporting uncooled infrared micro bolometers with low thermal mass [J]. *Journal of Micro electromechanical Systems*, 2001, **10**: 469 – 476.
- [6] GAO Yan-Qing, HUANG Zhi-Ming, HOU Yun, *et al.* Structural and electrical properties of Mn_{1.56}Co_{0.96}Ni_{0.48}O₄ NTC thermistor films[J]. *Materials Science and Engineering B*, 2014, 185:74 – 78.
- [7] LEI G H, CHEN H W, ZHENG S X, *et al.* Effects of RF magnetron sputtering power density on NTC characteristics of Mn-Co-Ni thin films[J]. *J Mater Sci: Mater Electron*, 2013, **24**:1203 – 1207.
- [8] PARK K, AM J. Fabrication and electrical properties of Mn-Ni-Co-Cu-Si oxides negative temperature coefficient thermistors[J]. *Ceram. Soc.*, 2005, **88**: 862 – 866.
- [9] TANG Ding-Yuan. *Introduction to optoelectronic devices* [M]. Shanghai, Shanghai science and Technology Literature Publishing House, (汤定元, 光电器件概论, 上海, 上海科学技术文献出版社), 1989: 388 – 390.
- [10] ZHOU Wei, HOU Yun, GAO Yan Qing, *et al.* Experimental study on the responsivity enhancement of Mn_{1.56}Co_{0.96}Ni_{0.48}O₄ detector under moderate bias field [C]. *Proc. of SPIE Advances in Infrared Imaging and Applications*, 2011, **8193**: 81934G.
- [11] SCHMIDT R, BASU A, BRINKMAN A W. Small polaron hopping in spinel manganates[J]. *Phys Rev B*, 2005, **72**: 115101.
- [12] HE L, ZHANG G, LING Z Y, Improvement of structural and electrical properties of Mn-based thin film thermistors by a bilayer structure[J]. *Mater. Lett.*, 2014, **128**: 144 – 147.
- [13] DANNENBERG Rand, BALIGA S, GAMBINO R J, *et al.* Resistivity, thermopower and the correlation to infrared active vibrations of Mn_{1.56}Co_{0.96}Ni_{0.48}O₄ spinel films sputtered in an oxygen partial pressure series [J]. *Appl. Phys.*, 1999, **86**(1): 514 – 523.
- [14] Zhou Wei, Xu X F, Ouyang Cheng, *et al.* Annealing effect on the structural, electrical and 1/f noise properties of Mn-Co-Ni-O thin films[J]. *J Mater Sci: Mater Electron*, 2014, **25**:1959 – 1964.
- [15] HOOGE F N. 1/F noise is no surface effect[J]. *Phys Lett A*, 1969, A **29**: 139 – &.
- [16] ZHANG Fei, ZHOU Wei, OUYANG Cheng, *et al.* Annealing effect on the structural and electrical performance of Mn-Co-Ni-O films[J]. *AIP Advance*, 2015, **5**:117137.
- [17] LISIAUSKAS Alvydas, KHARTSEV S I, GRISHINA Alex. Tailoring the colossal magneto resistivity: La_{0.7}(Pb_{0.63}Sr_{0.37})_{0.3}MnO₃ thin-film uncooled bolometer [J]. *APPLIED PHYSICS LETTERS*, 2000, **77**(5): 756 – 758.
- [18] ZHOU Wei, OUYANG Cheng, WU Jing, *et al.* Investigation on preparation method and performance of Mn_{1.56}Co_{0.96-x}Ni_{0.48}Cu_xO₄ thin film IR detector[J]. *Infrared and Laser Engineering*, (周炜, 欧阳程, 吴敬 等. 锰钴镍铜氧薄膜红外探测器制备与性能研究[J]. *红外与激光工程*), 2014, **43**(4):1073 – 1079.

(上接 274 页)

- [3] Gopal V, Qiu W Hu W. Modelling of illuminated current-voltage characteristics to evaluate leakage currents in long wavelength infrared mercury cadmium telluride photovoltaic detectors [J], *Journal of Applied Physics*, 2014, **116**: 184503.
- [4] Anne M Itsuno, Jamie D Phillips, *et al.* Unipolar Barrier-Integrated HgCdTe Infrared Detectors [J], *IEEE*, 2012, 978-1-4673-1164-9:257.
- [5] Itsuno A M, Phillips J D, *et al.* Design and Modeling of HgCdTe nBn Detectors[J], *Journal of Electronic Materials*, 2011, **40**(8) .
- [6] Itsuno A M Phillips, J D, *et al.* Design of an Auger-Suppressed Unipolar HgCdTe NBvN photodetector[J], *Journal of Electronic Materials*, 2012, Vol. 410, No. 10 .
- [7] Maimon S, Wicks G W, [J] *Appl. Phys. Lett.* 2006, **89**: 151109 – 1.
- [8] Pedrazzani J R, Maimon S, Wicks G W, [J] *Electron. Lett.* 2008, **44**:1487.
- [9] Qiu W C, Hu W D, Lin T, *et al.* Temperature-sensitive junction transformations for mid-wavelength HgCdTe photovoltaic infrared detector arrays by laser beam induced current microscope [J], *Applied Physics Letters*, 2014, **105**: 191106.
- [10] Liang J, Hu W, Ye Z, *et al.* Improved performance of HgCdTe infrared detector focal plane arrays by modulating light field based on photonic crystal structure[J], *Journal of Applied Physics*, 2014, **115**:184504.
- [11] Qiu W C, Jiang T, Cheng X A, A bandgap-engineered HgCdTe PBvN long-wavelength infrared detector[J], *Journal of Applied Physics*, 2015, **118**:124504.