

〈材料与器件〉

nBn 结构长波红外碲镉汞器件优化设计

覃 钢, 孔金丞, 任 洋, 陈卫业, 杨 晋, 秦 强, 赵 俊
(昆明物理研究所, 云南 昆明 650223)

摘要: 分析了 Type-I 型能带对 nBn 结构碲镉汞器件性能的影响。通过理论计算获得了势垒层组分、掺杂浓度与能带带阶的关系, 确定了 nBn 结构长波器件吸收层掺杂浓度与暗电流的关系。优化了 nBn 结构长波红外碲镉汞器件的掺杂浓度、势垒层与吸收层之间的组分过渡, 建立了二维器件仿真模型并对 nBn 结构长波红外碲镉汞器件的能带结构进行了计算, 结果表明器件结构参数的优化可以有效降低器件工作所需的开启电压, 同时在吸收层内几乎不会形成耗尽区, 从而有效抑制 SRH 产生-复合电流及隧穿电流。计算了器件结构参数优化后的长波红外碲镉汞 nBn 器件暗电流的变温特性, 器件工作温度达到 110 K 以上。为高性能势垒结构长波红外碲镉汞器件的研制提供了理论依据。

关键词: nBn 结构; 长波红外; 碲镉汞; 能带带阶; 暗电流

中图分类号: TN304 文献标识码: A 文章编号: 1001-8891(2024)07-0815-06

Optimized Design of nBn LWIR HgCdTe Devices

QIN Gang, KONG Jincheng, REN Yang, CHEN Weiye, YANG Jin, QIN Qiang, ZHAO Jun
(Kunming Institute of Physics, Kunming 650223, China)

Abstract: In this study, the effect of the type-I band on the performance of HgCdTe-based nBn devices was analyzed theoretically. A theoretical calculation of the relationship between the composition and doping concentration of the barrier layer and the band offset was obtained, and the relationship between the doping concentration of the absorption layer and the dark current of nBn LWIR HgCdTe devices was determined. Both the doping concentration and composition gradient between the barrier and absorption layers of nBn LWIR HgCdTe devices were optimized. A two-dimensional device simulation model was established, and the band structure of nBn LWIR HgCdTe devices was calculated. The results show that optimization of the device structure parameters effectively reduced the turn-on voltage required for device operation, while almost no depletion region was formed in the absorption layer, which effectively inhibited the SRH generation-recombination current and tunneling current. In this study, we also calculated the temperature-dependent dark current of optimized nBn LWIR HgCdTe devices; the operating temperature of the device was above 110 K. This study establishes a theoretical basis for developing high-performance barrier-structured LWIR-HgCdTe devices.

Key words: nBn structure, long-wave infrared, HgCdTe, band offset, dark current

0 引言

碲镉汞 ($Hg_{1-x}Cd_xTe$ 或 MCT) 红外焦平面探测器因其优异的光电性能在制冷型红外探测器领域一直

占据着主导地位^[1-3]。碲镉汞红外焦平面阵列主要基于 p-n 结光电二极管, 器件性能受限于耗尽区 SRH (Shockley-Read-Hall) 产生-复合电流、吸收层扩散电流、表面漏电流、带-带直接隧穿和陷阱辅助隧穿电流

收稿日期: 2022-09-15; 修订日期: 2023-01-31.

作者简介: 覃钢 (1987-), 男, 湖北建始人, 高级工程师, 主要从事红外材料与器件方面的研究工作, E-mail: qingang0125@163.com。

通信作者: 孔金丞 (1979-), 男, 云南南华人, 博士, 研究员, 博士生导师, 主要从事红外材料方面的研究工作, E-mail: kongjincheng@163.com。

基金项目: 基础加强计划领域基金 (2019-JCJQ-JJ-527)。

在内的暗电流。如何抑制器件的暗电流从而提高红外探测器的性能和工作温度是国内外研究的重点^[4-5]。基于 nBn 势垒阻挡结构的碲镉汞器件能够有效地抑制器件的 SRH 产生-复合电流、隧穿电流，降低表面漏电对器件性能的限制，理论上 nBn 型器件性能只受到扩散电流的限制^[6-7]。nBn 结构碲镉汞器件可以摒弃 p 型 As 掺杂，仅采用 n 型掺杂即可实现光电器件的制备，器件制备工艺相对简洁，是当前红外器件研究的重要方向之一^[8-10]。

本文针对 nBn 结构长波红外碲镉汞器件开启电压高的问题，研究了势垒层组分和掺杂浓度对器件能带带阶的影响，分析了吸收层掺杂浓度对器件暗电流的影响。在此基础上，优化了 nBn 碲镉汞长波红外器件结构设计以降低器件的开启电压，对器件的能带结构进行了仿真并计算了器件的理论暗电流水平。

1 nBn 结构碲镉汞器件能带特征

2006 年，美国罗切斯特大学的 Maimon 等首次提出了 nBn 结构器件并研制成功 InAs 基短波红探测器^[6]。2007 年，新墨西哥大学的 Rodriguez 等将 nBn 结构器件引入二类超晶格红外探测器的研制并取得了成功^[7]。2011 年，密歇根大学的 Itsuno 等人与 EPIR 合作，首次将 nBn 结构器件引入碲镉汞红外探测器的研制中并取得成功^[8-10]。nBn 结构器件中 B 层为宽带隙势垒层，当外加工作偏压时，耗尽区主要集中在势垒层，从而抑制了器件的 SRH 产生-复合电流。宽带隙势垒层对导带电子（多子）起到阻挡作用，但允许价带空穴（少子）的输运，从而实现器件光生电子和空穴的空间分离，如图 1 所示^[6]。

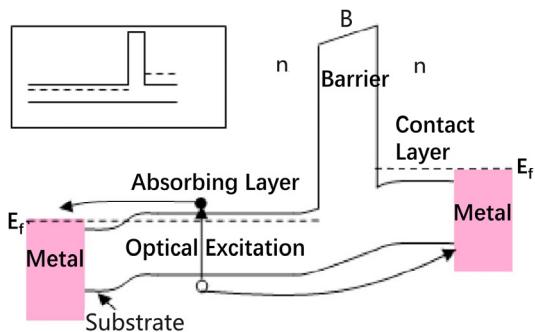


图 1 nBn 器件能带结构及载流子输运

Fig.1 Band structure and carrier transport of nBn device

由于碲镉汞异质结 Type-I 型能带排列特征，使得 nBn 结构碲镉汞器件的势垒层与吸收层之间存在一个价带带阶 ΔE_V （空穴势垒），对光生少子（空穴）的收集起到阻挡作用，器件需要外加较大的反向偏压（开启电压）以提高光生少子的收集效率^[11-13]。图 2

所示为零偏压时常规 nBn 碲镉汞长波红外器件的能带结构。

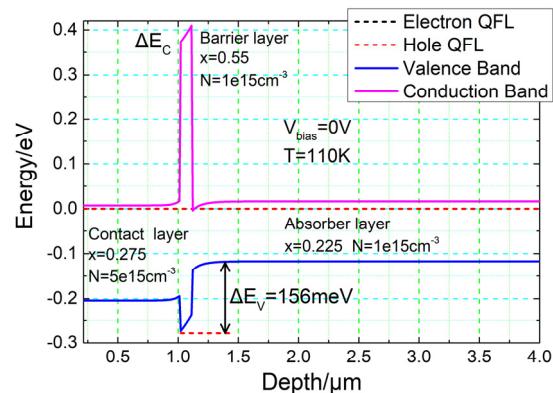


图 2 零偏压下常规 nBn 长波红外器件能带结构

Fig.2 Band structure of conventional nBn LWIR HgCdTe device at zero bias

图 3 所示为 0.5 V 反向偏压下 nBn 碲镉汞长波红外器件的能带结构。

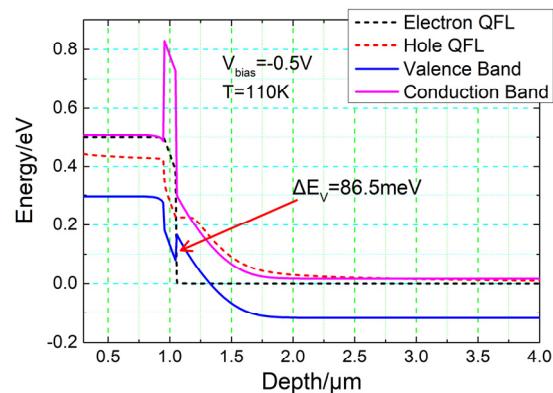


图 3 反向偏压下常规 nBn 长波红外器件能带结构

Fig.3 Band structure of conventional nBn LWIR HgCdTe device at reverse bias

根据图 3 可知，在 0.5 V 反向偏压时器件的价带带阶 ΔE_V 仍高达 86.5 meV，远大于载流子的热激发能；同时吸收层出现了较宽的耗尽区，靠近势垒层界面处价带已经远高于吸收层导带。由于 ΔE_V 远大于载流子热激发能，需要进一步增大外加偏压才能实现对光生载流子的有效收集。而外加偏压的进一步增大，吸收层耗尽区的宽度会进一步增大，能带向上弯曲程度加剧，将会导致耗尽区直接隧穿电流、陷阱辅助隧穿电流及 SRH 产生-复合电流迅速增大，降低器件性能。因此，降低 nBn 结构碲镉汞器件的价带带阶从而降低器件的工作偏压是实现器件高性能的基础。

目前，降低碲镉汞 nBn 器件价带带阶的主要方法包括两类：1) 通过势垒层 P 型 As 掺杂来降低价带带阶；2) 采用 HgTe/CdTe 三类超晶格作为势垒层来降低价带带阶^[13-14]。掺杂调控方法存在 As 杂质的浓度

控制、杂质的高温激活及高温下 Cd 组分扩散等问题；超晶格势垒层存在生长技术难度大且高温下超晶格的热稳定性差等问题。

2 器件仿真计算

本文在常规 nBn 结构长波红外碲镉汞器件的基础上，通过优化吸收层掺杂浓度来降低器件的暗电流，通过在势垒层-吸收层界面引入一定厚度的组分梯度过渡层来实现价带平滑过渡，降低器件工作所需的开启偏压。建立了不同势垒层组分、不同势垒层-吸收层之间组分过渡层厚度、不同势垒层与吸收层掺杂浓度等参数的器件仿真模型，采用 Silvaco 软件模拟了器件在不同偏压下的能带结构。器件模型参数如表 1 所示。

表 1 nBn 结构碲镉汞长波红外器件仿真参数

Table 1 Simulation parameters of nBn HgCdTe LWIR device

	Contact	Barrier	Gradient	Absorber
Comp(x)	0.275	0.55	0.55-0.225	0.225
d/μm	1.0	0.1	0.1-1.0	7.0
N _D /cm ⁻³	5E15	(1-1000)E14	(0.2-1)E15	(0.5-50)E14

图 4 所示为势垒层-吸收层之间组分梯度过渡层厚度约 0.5 μm 时，nBn 结构长波红外碲镉汞器件的仿真模型。在此基础上，计算了结构参数优化后的 nBn 结构长波红外碲镉汞器件在不同工作温度下的暗电流。

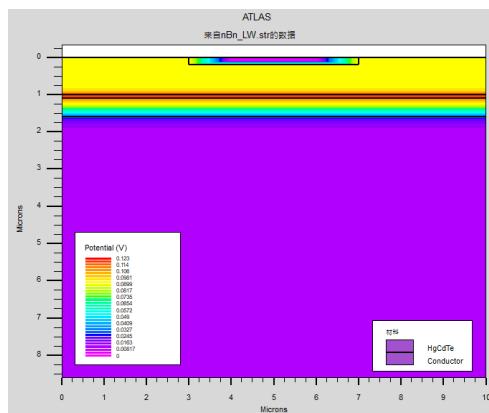


图 4 nBn 结构长波红外碲镉汞器件仿真模型

Fig.4 Simulation model of nBn structure LWIR HgCdTe device

3 结果与讨论

3.1 势垒层组分与掺杂浓度

对于 nBn 结构碲镉汞器件，调节势垒层组分、掺杂浓度等参数可以有效调控势垒的高度，从而调控器件工作所需阈值偏压。图 5 所示为势垒层厚度 100 nm 的常规 nBn 结构碲镉汞长波器件能带带阶 ΔE_V 、 ΔE_C 与势垒层组分之间的关系。

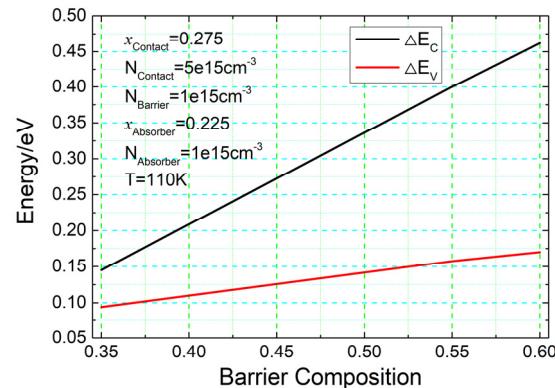


图 5 碲镉汞 nBn 长波器件能带带阶与势垒组分的关系

Fig.5 Relationship between band offset and barrier composition of HgCdTe nBn LWIR device

根据计算结果分析可知， ΔE_V 、 ΔE_C 随势垒层组分的增大而增大。增大势垒层的组分能够有效抑制接触层热电子激发和 SRH 产生-复合电流，但同时价带 ΔE_V 的增大使得器件需要外加更大的反向偏压来提高光生少子（空穴）的收集。此外，势垒层组分过大，材料的最佳生长温度会出现较大偏离，影响外延薄膜的晶体质量。

图 6 所示为计算得到的常规 nBn 碲镉汞长波器件能带带阶与势垒掺杂浓度之间的关系。

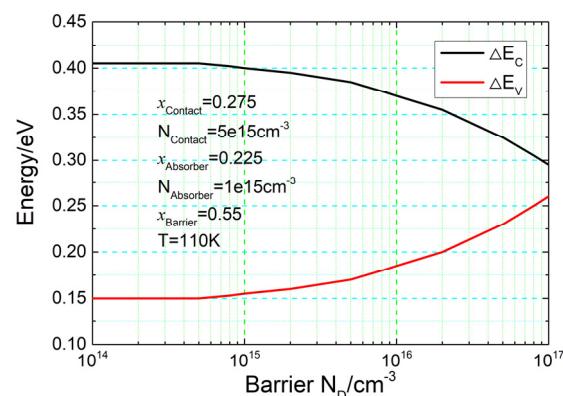


图 6 碲镉汞 nBn 长波器件能带带阶与势垒掺杂浓度的关系

Fig.6 Relationship between band offset and barrier concentration of HgCdTe nBn LWIR device

随着势垒层掺杂浓度的增大，费米能级向导带偏移，电子势垒 ΔE_C 值减小、空穴势垒 ΔE_V 值增大。但当势垒层的掺杂浓度降低到 $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ 以下时，掺杂浓度的变化对势垒层价带带阶的影响可以忽略。

基于上述分析，本文中 nBn 结构长波红外碲镉汞器件的势垒层组分设定为 $x=0.55$ 、厚度设定为 100 nm、掺杂浓度设定为 $(1\sim2)\times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ 。

3.2 吸收层掺杂浓度

理论上 nBn 结构碲镉汞器件的暗电流受限于吸收层扩散电流，如式(1)所示：

$$J_{\text{diff}} = \frac{qn_i^2 d}{N_{\text{maj}} \tau} = \frac{qn_i^2 d}{N_{\text{maj}}} \left(\frac{1}{\tau_{\text{A1}}} + \frac{1}{\tau_{\text{R}}} + \frac{1}{\tau_{\text{SRH}}} \right) \quad (1)$$

式中: n_i 为本征载流子浓度; d 为吸收层厚度; N_{maj} 为掺杂浓度; τ_{A1} 为 Auger-1 复合寿命, τ_{R} 为辐射复合寿命, τ_{SRH} 为 SRH 复合寿命。 τ_{A1} 如式(2)所示^[17]:

$$\tau_{\text{A1}} = \frac{2\tau_{\text{Ail}} n_i^2}{N(N+P)} \quad (2)$$

式中: τ_{Ail} 为本征俄歇寿命。

$$\tau_{\text{Ail}} = \frac{3.8 \times 10^{-18} \varepsilon^2 (1+\mu)^{\frac{1}{2}} (1+2\mu) \cdot \exp\left(\frac{-q(1+2\mu)E_g}{(1+\mu)kT}\right)}{\left(\frac{m_e}{m_0}\right) \cdot |F_1 F_2|^2 \cdot \left(\frac{kT}{qE_g}\right)^{\frac{3}{2}}} \quad (3)$$

式中: ε 为介电函数; $\mu = m_e/m_h$; $F_1 F_2$ 值 0.25。

由于光子循环吸收效应, 辐射复合对少子寿命的影响降低^[15-16]。因此, 长波 N 型碲镉汞材料少子寿命主要受限于 Auger-1 复合与 SRH 复合过程。此时, 扩散电流如式(4)所示:

$$J_{\text{diff}} = \frac{qn_i^2 d}{N_{\text{maj}} \tau} = \frac{qn_i^2 d}{N_{\text{maj}}} \left(\frac{1}{\tau_{\text{A1}}} + \frac{1}{\tau_{\text{SRH}}} \right) \quad (4)$$

DRS 报道其 N 型长波碲镉汞材料的 τ_{SRH} 值约在 0.1~1 ms 范围, TIS 报道其长波碲镉汞 τ_{SRH} 值大于 0.5 ms^[16-18]。设定 $\tau_{\text{SRH}}=0.5$ ms, 计算不同掺杂浓度下与 Auger 复合和 SRH 复合相关的长波碲镉汞器件扩散电流成分随工作温度的变化, 如图 7 所示。

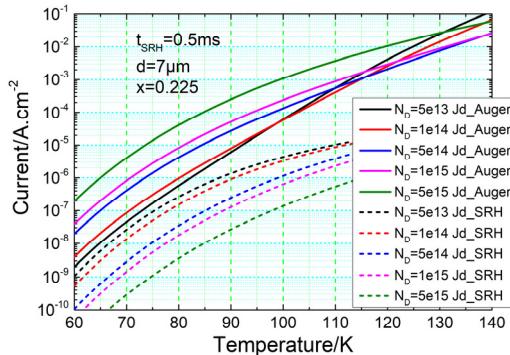


图 7 扩散电流成分计算结果

Fig.7 Calculation results of diffusion current component

根据计算结果可知, 对于高质量的 N 型长波碲镉汞材料, 扩散电流主要受限于 Auger-1 复合过程, 此时器件的扩散电流如式(5)所示:

$$J_{\text{diff}} = \frac{qn_i^2 d}{N_{\text{maj}} \tau_{\text{A1}}} \quad (5)$$

式(5)表明 $N_{\text{maj}} \tau_{\text{A1}}$ 的乘积决定了扩散电流的大小。图 8 所示为计算的不同工作温度下长波碲镉汞 $N_{\text{maj}} \tau_{\text{A1}}$ 乘积与掺杂浓度之间的关系。

根据计算结果可知, 长波器件在不同工作温度下的 $N_{\text{maj}} \tau_{\text{A1}}$ 最大值随掺杂浓度会发生变化。工作温度 110 K 时, 吸收层掺杂浓度 $(1\sim2) \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ 范围 $N_{\text{maj}} \tau_{\text{A1}}$ 的值达到最大, 器件具有最低的扩散电流。同时, 受限于背景杂质浓度, 分子束外延碲镉汞难以实现 $N_D < 1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ 的稳定掺杂。因此, nBn 结构碲镉汞长波器件吸收层掺杂浓度设定为 $(1\sim2) \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ 。

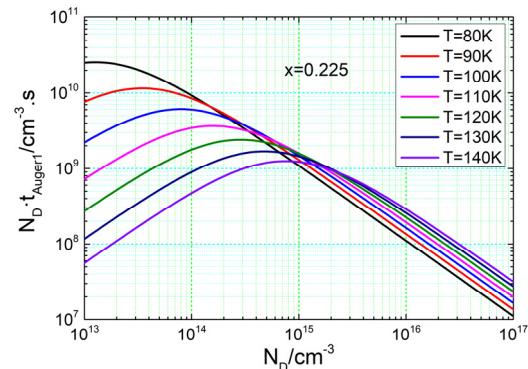


图 8 不同工作温度下 $N_{\text{maj}} \tau_{\text{A1}}$ 乘积计算结果

Fig.8 Calculation results of $N_{\text{maj}} \tau_{\text{A1}}$ product at different temperatures

3.3 势垒层-吸收层界面能带调控

本文在常规 nBn 结构长波碲镉汞器件的基础上, 在势垒层与吸收层之间插入一定厚度的组分梯度过渡层来降低反向偏压下器件的价带带阶, 以实现器件工作偏压的降低。同时, 计算了不同组分梯度过渡层厚度时在相同偏压下价带带阶的变化情况。工作温度 110 K, 器件结构的具体参数设为组分梯度过渡层组分从 0.55 线性降低到 0.225, 势垒层与吸收层掺杂浓度 $2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, 上接触层组分 0.275, 掺杂浓度为 $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ 。图 9 所示为过渡层厚度为 $0.6 \mu\text{m}$ 、反向偏压为 0.3 V 时长波红外 nBn 碲镉汞器件的能带结构。

图 10 所示为 nBn 碲镉汞长波器件在 0.3 V 反向偏压下时价带带阶与组分梯度过渡层厚度之间的计算关系。

根据 0.3 V 反向偏压下 nBn 碲镉汞长波红外器件的能带计算结果可知, 组分梯度过渡层的厚度在约 $0.6 \mu\text{m}$ 时价带带阶 ΔE_V 值最小 (12 meV), 远低于常规 nBn 结构长波碲镉汞器件, 同时吸收层内未出现明显的能带弯曲。

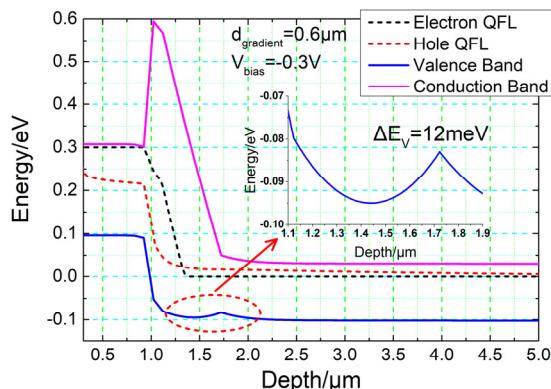


图9 结构优化 nBn 长波红外器件反向偏压下的能带结构

Fig.9 Band structure of optimized nBn LWIR HgCdTe device at reverse bias

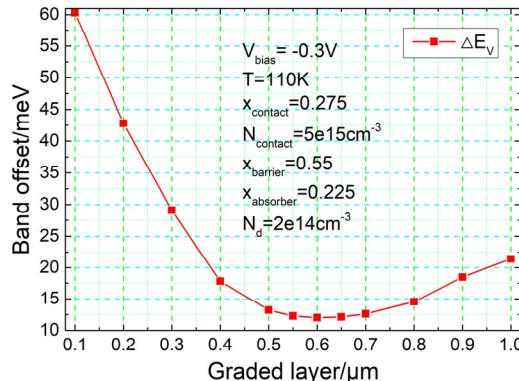
图10 ΔE_V 与组分梯度过渡层厚度的关系

Fig.10 Relationship between ΔE_V and graded layer thickness

本文中,通过调节长波红外 nBn 结构碲镉汞器件组分及掺杂浓度,实现了较低工作偏压下器件吸收层与势垒层之间价带带阶的有效降低,器件具有较低的工作阈值偏压。同时,该器件的吸收层内几乎未有耗尽区的形成,从而使得与耗尽区相关的 SRH 产生-复合电流及隧穿电流得到有效抑制。理论上,该器件的性能只受限于吸收层内的扩散电流。

3.4 器件暗电水平计算

根据 nBn 器件能带结构仿真结果分析,在吸收层与势垒层之间引入约 $0.6 \mu\text{m}$ 厚的组分梯度过渡层,优化器件掺杂浓度,器件的开启偏压约为 0.3 V 且吸收层内未出现较大的能带弯曲,此时器件暗电主要受限于吸收层内的扩散电流。对该器件在不同工作温度下的暗电水平进行了计算,并与“Rule07”预测暗电水平^[19-20]及 293 K 黑体下的光电流($F\#=2$, $\eta=60\%$)进行了对比,计算结果如图 11 所示。根据计算结果可知,当工作温度低于 117 K 时器件暗电低于“Rule07”预测值,且当工作温度在 100 K 以内时比“Rule07”预测值低了接近一个数量级,表明理论上该器件具备较低的暗电水平。

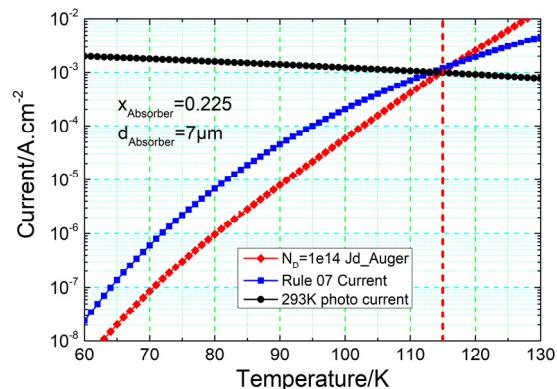


图11 优化的 nBn 结构长波红外碲镉汞器件暗电水平

Fig.11 Dark current of optimized nBn LWIR HgCdTe device

4 结论

本文在对 nBn 结构器件基本原理分析的基础上,对碲镉汞 nBn 器件 Type-I 型能带结构的特点进行了详细分析。优化了 nBn 型长波碲镉汞器件结构设计,建立了二维器件模型并模拟计算了器件的能带结构,研究了该器件的理论暗电水平。结果表明,通过优化 nBn 器件结构参数来调控器件的能带结构,能够有效降低器件的工作偏压,降低器件的暗电,获得了优化结构的 nBn 型长波红外碲镉汞器件。理论上该器件的工作温度可达到 110 K 以上,且器件的暗电水平低于“Rule07”预测暗电值,预示着该器件具备较好的高工作温度特性。同时,优化设计后的器件结构为全 N 型结构,完全摒弃了 As 掺杂势垒或超晶格势垒,器件制备工艺难度相对较低,具有更高的技术可行性和发展前景。

参考文献:

- [1] 褚君浩. 窄禁带半导体物理学[M]. 北京: 科学出版社, 2005.
- [2] CHU Junhao. Narrow-gap Semiconductor Physics[M]. Beijing: Science Press, 2005.
- [3] 杨健荣. 碲镉汞材料物理与技术[M]. 北京: 国防工业出版社, 2012.
- [4] YANG Jianrong. Physics and Technology of HgCdTe Materials[M]. Beijing: National Defense Industry Press, 2012.
- [5] 史衍丽. 第三代红外探测器的发展与选择[J]. 红外技术, 2013, 35(1): 1-8.
- [6] SHI Yanli. Choice and development of the third-generation infrared detectors[J]. Infrared Technology, 2013, 35(1): 1-8.
- [7] Rogalski A, Antoszewski J, Faraone L. Third-generation infrared photodetector arrays[J]. Journal of Applied Physics, 2009, 105(9): 091101-1.
- [8] Rogalski A. New material systems for third generation infrared

- detectors[C]//SPIE, 2009, **7388**: 73880J-1.
- [6] Maimon S, Wicks G W. nBn detector, an infrared detector with reduced dark current and higher operating temperature[J]. *Applied Physics Letters*, 2006, **151**(9): 1-3.
- [7] Rodriguez J B, Plis E, Bishop G, et al. nBn structure based on InAs/GaSb type-II strained layer superlattices[J]. *Applied Physics Letters*, 2007, **043514**(91): 1-2.
- [8] Itsuno A M, Phillips J D, Selicu S. Design and modeling of HgCdTe nBn detectors[J]. *Journal of Electronic Materials*, 2011, **40**(8): 1624-1629.
- [9] Itsuno A M, Phillips J D, Velicu S. Mid-wave infrared HgCdTe nBn photodetector[J]. *Applied Physics Letters*, 2012, **161**(100): 2-4.
- [10] Itsuno A M, Phillips J D, Velicu S. Design of an auger-suppressed unipolar HgCdTe NBvN photodetector[J]. *Journal of Electronic Materials*, 2012, **41**(10): 2886-2993.
- [11] Kopytko M, Wrobel J, Jozwikowski K, et al. Engineering the bandgap of unipolar of HgCdTe-based nBn infrared photodetectors[J]. *Journal of Electronic Materials*, 2015, **44**(1): 158-166.
- [12] Martyniuk P, Gawron W, Rogalski A. Theoretical modeling of HOT HgCdTe barrier detectors for the mid-wave infrared range[J]. *Journal of Electronic Materials*, 2013, **42**(11): 3309-3319.
- [13] Akhavan D, Umana-Membreno G A, Jolley G, et al. A method of removing the valence band offset discontinuity in HgCdTe-based nBn detectors[J]. *Applied Physics Letters*, 2014, **121**(10): 1-4.
- [14] Akhavan N D, Umana-Membreno G A, Renjie Gu, et al. Superlattice barrier HgCdTe nBn infrared photodetectors: validation of the effective mass approximation[J]. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 2016, **63**(12): 1-8.
- [15] Rogalski A, Kopytko M, Józwikowski K, et al. Influence of radiative recombination on performance of p-i-n HOT long wavelength infrared HgCdTe photodiodes[C]//SPIE, 2018, **10624**: 106240Y-1.
- [16] Rogalski A, Kopytko M, Martyniuk P. Performance prediction of p-i-n HgCdTe long-wavelength infrared HOT photodiodes[J]. *Applied Optics*, 2018, **57**(18): D11-D19.
- [17] Kinch M A. *State-of-the-Art Infrared Detector Technology*[M]. Bellingham: SPIE, 2014.
- [18] Lee D, Dreiske P, Ellsworth J, et al. Law 19: The ultimate photodiode performance metric[C]//SPIE, 2020, **11407**: 114070X-1.
- [19] Tennant W E, Lee D, Zandian M, et al. MBE HgCdTe technology: a very general solution to IR detection, described by “Rule 07”, a very convenient heuristic[J]. *Journal of Electronic Materials*, 2008, **37**(9): 1406-1410.
- [20] Tennant W E. “Rule 07” Revisited: still a good heuristic predictor of p/n HgCdTe photodiode performance?[J]. *Journal of Electronic Materials*, 2010, **39**(7): 1030-1035.
- [21] Elliott C T, Gordon N T, White A M. Towards background-limited, room-temperature, infrared photon detectors in the 3-13 mm wavelength range[J]. *Applied Physics Letters*, 1999, **74**(19): 2881-2883.
- [22] Piotr Martyniuk, Antoni Rogalski. Performance comparison of barrier detectors and HgCdTe photodiodes[J]. *Optical Engineering*, 2014, **53**(10): 106105.
- [23] Kopytko M, Rogalski A. New insights into the ultimate performance of HgCdTe photodiodes[J]. *Sensors and Actuators: A. Physical*, 2022, **339**: 113511.
- [24] Kopytko M, Rogalski A. Performance evaluation of type-ii superlattice devices relative to HgCdTe photodiodes[J]. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 2022, **69**(6): 2992-3002.