

**Н. Н. Ворсин¹, А. А. Гладышук², Т. Л. Кушнер³,
Н. П. Тарасюк⁴, С. В. Чугунов⁵**

¹канд. физ.-мат. наук, доц. каф. физики

Брестского государственного технического университета

²канд. физ.-мат. наук, проф. каф. физики

Брестского государственного технического университета

³канд.пед. наук, доц. каф. физики

Брестского государственного технического университета

⁴ст. преподаватель каф. физики

Брестского государственного технического университета

⁵ст. преподаватель каф. физики

Брестского государственного технического университета

[e-mail: vorsin@hotmail.com](mailto:vorsin@hotmail.com)

МОДЕЛИРОВАНИЕ И РАЗРАБОТКА AlGaN P-I-N ФОТОДИОДОВ

Тройные сплавы AlGaN с шириной запрещенной зоны от 3,4 до 6,2 эВ весьма перспективны для фотоприемных устройств УФ диапазона длин волн. С помощью программного обеспечения Comsol на основе $Al_xGa_{1-x}N$ разработана модель p-i-n фотодиода, включая его ВАХ, спектральную чувствительность принимаемого излучения и коэффициента поглощения как функции доли алюминия и толщины обедненного слоя. Пиковая чувствительность фотодиода составляет от 0,08 до 0,18 А/Вт при длинах волн 0,2–0,33 мкм. Это соответствует экспериментальным результатам, взятым из литературы.

Введение

III-нитридное соединение материалов, состоящее из InN, GaN, AlN, и их сплавы, являются полупроводниками с интересными физическими свойствами, такими как высокая подвижность электронов, высокое значение скорости насыщения носителей, хорошая термостойкость, прямая и изменяемая по ширине запрещенная зона с высоким коэффициентом оптического поглощения.

Коэффициент поглощения III-нитридных материалов более 10^4 см^{-1} [1]. Значительная доля падающего света проникает в глубину на несколько сотен нанометров поглощающей области. Ширина запрещенной зоны материала $Al_xGa_{1-x}N$ (AlGaN) варьируется в диапазоне от 3,4 до 6,2 эВ в зависимости от пропорции x алюминия в составе соединения $Al_xGa_{1-x}N$ [2; 3]. Благодаря этим физическим свойствам, III-нитридные полупроводники являются перспективными материалами для многочисленных оптоэлектронных устройств, таких как светодиоды, лазерные диоды, солнечные элементы и фотодиоды.

Большинство современных фотодиодов основаны на p-i-n-структуре. Фотоны, поглощенные в области собственной проводимости (i-слой) генерируют электронно-дырочные пары, которые затем разделяются электрическим полем, создавая таким образом электрический ток в нагрузке.

Множественные квантовые ямы (MQW) [4] или сверхрешеточные структуры [4], содержащиеся в нанометровых слоях AlGaN, могут быть использованы в качестве дополнительных факторов для объемных структур, чтобы улучшить кристаллическое качество активных слоев и повысить чувствительность фотодиодов.

В конце нулевых годов Э. Беркман и др. [5] разработали p-i-n-фотодиод InGaN, который показал чувствительность 37 мА/Вт на волне 426 нм. Затем параметр чувстви-

тельности быстро улучшался с каждой новой разработкой. Уже спустя год Су и др. [6] изготовили р-і-п-фотодиод с собственным активным слоем $\text{In}_{0.11}\text{Ga}_{0.89}\text{N}$ и самой высокой спектральной чувствительностью 0,206 А/Вт на длине волны 380 нм. Этот показатель был превзойден Лу и др. [7], которые сообщили о пиковой чувствительности 0,22 А/Вт при 378 нм в несмещенном р-і-п-фотоприемнике.

Все упомянутые достижения относятся к области фиолетового и ближнего ультрафиолетового диапазона. С укорочением длины волны достижимый показатель чувствительности должен уменьшаться, поскольку увеличение энергии фотонов при неизменной величине мощности излучения означает уменьшение плотности фотонного потока. Поэтому на длине волны 200 нм следует ожидать вдвое меньший показатель чувствительности, около 0,1 А/Вт.

В работе предпринята попытка моделирования р-і-п-фотодиодов на основе тройного соединения AlGaN с помощью программного средства Comsol-Multiphysics [8]. На основе построенной модели получены зависимости основных характеристик фотодиодов от таких параметров, как мольная доля алюминия и толщина слоя с собственной проводимостью (і-слоя). Полученная из моделей информация была использована для разработки фотодетектора УФ излучения с максимумом спектральной чувствительности на волне 0,24 мкм.

Результаты моделирования, представленные в этой работе, могут быть использованы для оптимизации фотоприемников AlGaN/GaN и разработки нового поколения оптоэлектронных устройств.

Структура фотодиода и численное моделирование

Исследуемая структура является типичной для нитридных фотодиодов и показана на рисунке 1. Между слоями «п» и «р» с умеренной электронной и дырочной проводимостью помещается і-слой с собственной проводимостью, в котором происходит основное поглощение принимаемого света и преобразование его в свободные носители заряда. Данная трехслойная структура дополняется сверху и снизу (по рисунку 1) слоями с высокой степенью легирования «п+» и «р+», которые позволяют получить омические контакты с металлическими выводами, изображенными на рисунке 1 утолщенными черными линиями.

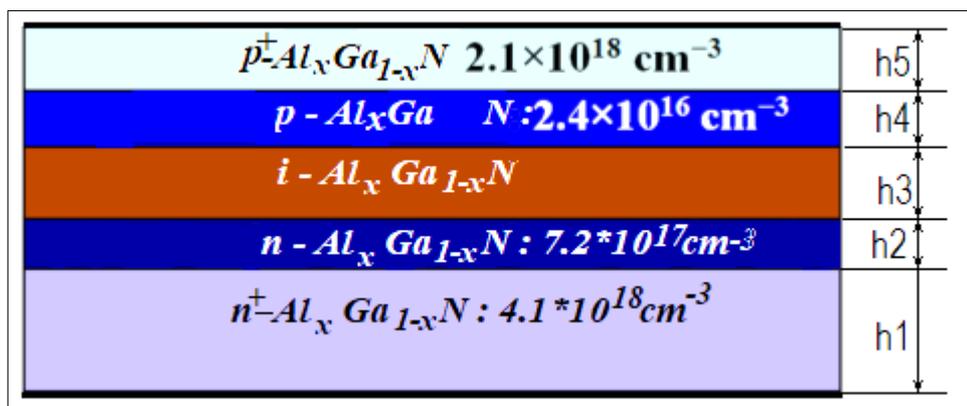


Рисунок 1.

Нижний n^+ -слой, помимо контактирования с выводами, решает еще несколько задач. Он уменьшает прораствание дислокаций от контакта с подложкой в вышележащие слои и компенсирует погрешности глубины травления верхних слоев при разделении диодов. Поэтому толщина нижнего n^+ -слоя существенно превосходит толщину

других слоев. Он наносится на буферный слой AlN, который, в свою очередь, опирается на сапфировую подложку.

Толщины слоев, обозначенные как $h_1 - h_5$, являются параметрами, которые могут оперативно изменяться перед запуском модели на расчет. На практике контактная n^+ -область делается шире остальной структуры и омический контакт реализуется сверху выступающей части. Однако такая геометрия, будучи заложенной в расчет, неоправданно усложняет его без заметного изменения результатов.

Примененная двумерная модель показана на рисунке 1. Эта модель, с учетом одинаковости процессов вдоль горизонтальной оси, фактически является одномерной, что является упрощающим для расчета фактором.

Модуль «оптоэлектроника» Комсола решает ряд основных полупроводниковых уравнений, состоящих из уравнения Пуассона, уравнения неразрывности и уравнений переноса для электронов и дырок. Кроме того, он предлагает несколько современных физических моделей взаимодействия полупроводника с ЭМ излучением.

Ширина запрещенной зоны E_g для $Al_xGa_{1-x}N$ при комнатной температуре рассчитывается по известной формуле [9], которая аппроксимирует реальную зависимость E_g от мольной доли алюминия -x квадратичной зависимостью:

$$E_g^{AlGaN} = xE_g^{AlN} + (1-x)E_g^{GaN} - 1.1x(1-x), \quad (1)$$

Величины запрещенной зоны AlN и GaN составляют:

- 1) $E_g^{AlN} = 6,2$ эВ [11],
- 2) $E_g^{GaN} = 3,42$ эВ [10].

Как известно, потенциал электронного сродства AlGaN уменьшается с увеличением доли алюминия и возрастанием ширины запрещенной зоны по закону, близкому к линейному. В расчет была заложена следующая формула из [11]:

$$\chi = 4,1 + 0,7(E_g^{GaN} - E_g^{AlGaN}) \quad (2)$$

Эффективные плотности состояний в зоне проводимости и в валентной зоне аппроксимируются линейными зависимостями от доли алюминия [11]:

$$\begin{aligned} N_c^{AlGaN} &= \left(\frac{T}{1K}\right)^{3/2} (1,8x + 4,6(1-x)) * 10^{14} \text{ см}^{-3} \\ N_v^{AlGaN} &= \left(\frac{T}{1K}\right)^{3/2} (10,6x + 9,2(1-x)) * 10^{15} \text{ см}^{-3}. \end{aligned} \quad (3)$$

Диэлектрическая проницаемость ϵ и относительные эффективные массы электронов (дырок), m_e (m_h), также полагались линейно зависимыми от доли алюминия и определялись как [11]:

$$\begin{aligned} \epsilon^{AlGaN} &= 10,1x + 10,4(1-x) \\ m_e^{AlGaN} &= 0,314x + 0,2(1-x) \\ m_h^{AlGaN} &= 0,417x + 1,0(1-x) \end{aligned} \quad (4)$$

Существуют температурно-зависимые модели подвижности носителей в нитридных материалах в слабом и сильном полях.

Однако, поскольку расчет проводился только для комнатной температуры (293 К), температурная зависимость была исключена из формул. Это позволяет использовать для подвижности электронов более простое выражение:

$$\mu_e(N, x) = \mu(x)_{\min} + \frac{\mu(x)_{\max} - \mu(x)_{\min}}{1 + \left(\frac{N_{tot}}{N_{ref}}\right)^{\alpha(x)}}, \quad (5)$$

где x – доля алюминия, $N_{\text{ref}} = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ – эталонная концентрация примеси, N_{tot} – суммарная концентрация примесей в данном регионе кристалла. Полученные экспериментально [11] величины параметров $\mu(x)_{\text{max}}$, $\mu(x)_{\text{min}}$ и $\alpha(x)$ приведены в таблице.

Таблица. – Величины параметров для формулы (5)

Материал	$\mu_{\text{min}},$ $\text{см}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$	$\mu_{\text{max}},$ $\text{см}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$	α
GaN	295,0	1460,7	0,66
$\text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{N}$	132,0	306,1	0,29
$\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{N}$	41,7	208,3	0,12
$\text{Al}_{0,8}\text{Ga}_{0,2}\text{N}$	47,8	199,6	0,17
AlN	297,8	683,8	1,16

Для области с собственной проводимостью $N_{\text{tot}} = 0$ подвижность электронов совпадает с максимальным значением: $\mu_e = \mu_{\text{max}}$. Эта величина вычислялась по аппроксимирующей формуле, которая дает точное совпадение в пяти приведенных в таблице точках: $\mu_e = 18475x^4 - 40696x^3 + 32168x^2 - 10723x + 1460$.

Подвижность дырок принята равной $5 \text{ см}^2 \text{ В}^{-1} \text{ с}^{-1}$ [10].

Ввиду большой ширины запрещенной зоны AlGaN основным механизмом потери носителей в AlGaN является рекомбинация, обусловленная дефектами. В расчетах учитываются две модели рекомбинации. Упрощенная модель рекомбинации, происходящей на дефектах (ловушках) Шокли – Рида – Холла (SRH), в которой ловушкам приписывается один энергетический уровень, а другие характеристики, включая концентрацию дефектов, выражаются временами жизни электронов и дырок. Данное время взято равным 1 нс, а энергетический уровень дефектов взят вблизи середины запрещенной зоны. Второй учитываемый тип – прямая рекомбинация с параметром $C = 10^{-8} \text{ см}^{-3} \text{ с}^{-1}$ [8].

Комсол предлагает несколько моделей оптической генерации и рекомбинации носителей. Была использована модель, основанная на расчете элемента переходной матрицы через время жизни носителя при спонтанной рекомбинации, которое взято равным $\tau_{\text{spont}} = 1 \text{ нс}$. Элемент переходной матрицы также очень сильно зависит от показателя преломления материала – n . Величина последнего, в свою очередь, является функцией длины волны λ . Эту зависимость можно приближенно описать дисперсионным уравнением Селмейера

$$n^2(\lambda) = 1 + \frac{A_0}{1 - \left(\frac{\lambda_0}{\lambda}\right)^2}, \quad (6)$$

в котором константы A_0 и λ_0 определяются шириной запрещенной зоны и для нитридных соединений аппроксимируются следующими выражениями [1]:

$$\begin{aligned} A_0 &= 6,626 - 0,934E_g + 0,0598E_g^2, \\ \lambda_0 &= (396,8 - 84,12E_g + 6,758E_g^2)[\text{nm}] \end{aligned} \quad (7)$$

В данные формулы ширина запрещенной зоны подставляется в эВ, а длина волны – в нм.

Комсол рассчитывает множество величин, в том числе величину коэффициента поглощения и его спектральное поведение – $\alpha(\lambda)$, которое легко пересчитывается в коэффициент экстинкции:

$$k(\lambda) = \frac{\alpha(\lambda)\lambda}{4\pi}$$

Численное моделирование проводилось для AlGaN p-i-n-фотодиод при 293 К. Ширина диода полагалась равной 20 мкм, толщина – размер в глубину – 1 м. Выбор толщины обусловлен особенностью задания абсолютной величины электромагнитной мощности, которая в двумерной задаче считается распределенной в глубину на единицу длины, т. е. на 1 м.

Результаты и обсуждение

Комсол вычисляет большое количество характеристик моделируемых процессов и имеет очень богатый арсенал представления результатов. Наиболее наглядной является графическая форма, используемая далее. На рисунке 2 показан график распределения легирующих примесей для толщины обедненного слоя 2 мкм. Положительным значениям соответствует акцепторная примесь, отрицательным – донорная. На интервале толщины от 0,15 до 2,15 мкм легирование отсутствует. Мы имеем слой с собственной проводимостью, поглощающий падающее на него излучение.

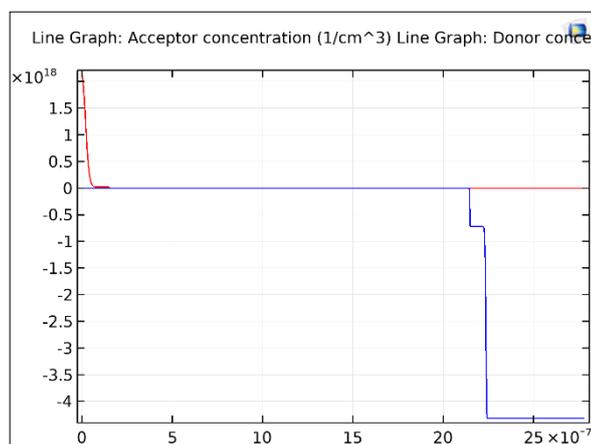


Рисунок 2.

Главными параметрами фотоприемника являются:

- 1) коэффициент преобразования падающей световой мощности в электрический ток (ватт-амперная характеристика),
- 2) зависимость этого коэффициента от длины световой волны (спектральная характеристика).

На рисунке 3 приведены полученные в результате расчетов графики зависимости величины фототока (i_{ph}) от длины световой волны (λ) и мольной доли алюминия в составе i-слоя (x) при падающей световой мощности 1 Вт. Расчеты проводились для толщины i-слоя 0,2 мкм и обратном напряжении, приложенном к фотододу $V_n = 1$ В. Максимум спектральной характеристики, в зависимости от x , приходится на длины волн от $\lambda = 0,2$ до 0,32 мкм. При этом в коротковолновой части диапазона для $x = 0,8$ максимум ватт-амперной характеристики составляет $k = 0,085$ А/Вт, в длинноволновой части – для $x = 0$ – $k = 0,175$ А/Вт.

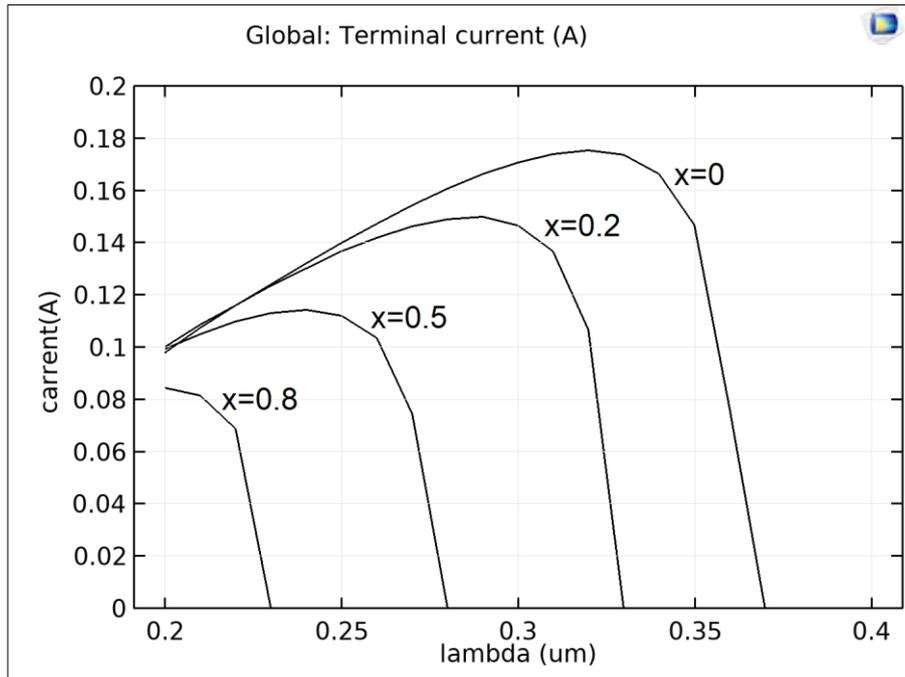


Рисунок 3.

Спад спектральной характеристики при уменьшении длины световой волны вполне очевиден и обусловлен уменьшением плотности фотонного потока при неизменной величине падающей световой мощности и увеличивающейся энергии фотонов.

Кроме того, использованная модель частотной зависимости коэффициента преломления Селмейера определяет увеличение последнего с уменьшением длины световой волны (нормальная дисперсия). Увеличение показателя преломления приводит к уменьшению элемента переходной матрицы в модели поглощения света и соответствующему уменьшению поглощения света.

На рисунке 4 приведены графики дисперсии коэффициента поглощения AlGaIn при различной величине доли алюминия.

Удивительно, но до настоящего времени нет общепризнанных значений этой величины для AlGaIn в области поглощения им световой мощности.

Величина α по одним источникам [12] составляет более 10^5 см^{-1} , а по другим [13] – около $1,8 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$.

Полученные при моделировании величины α скорее подтверждают последние значения. Однако не очевидно, что примененная модель взаимодействия полупроводника с излучением учитывает все механизмы этого процесса.

Пересечение графиков при длине волны 0,23 мкм по-прежнему объясняется дисперсией коэффициента преломления материала, который влияет на величину элемента переходной матрицы при меньших x сильнее, чем при больших.

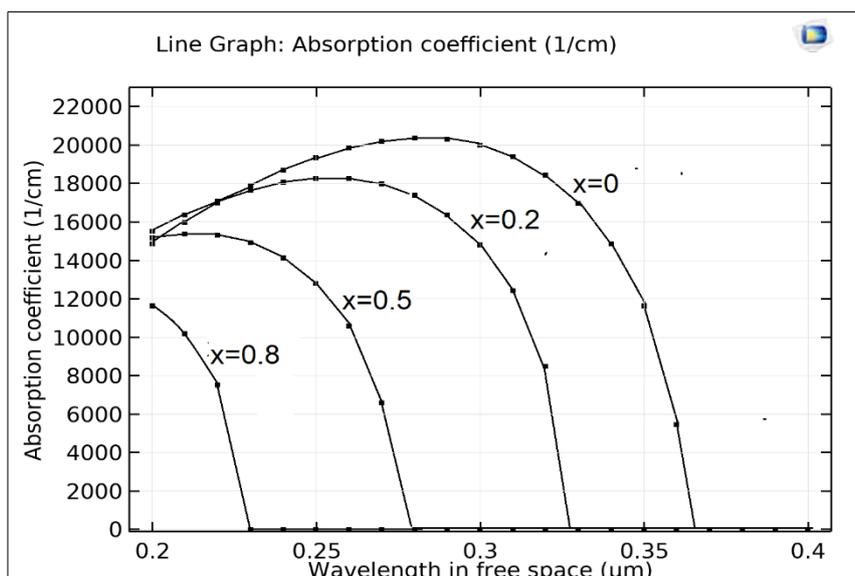


Рисунок 4.

Одним из важных вопросов построения р-і-п фотодиодов является выбор толщины поглощающего і-слоя. Имеются физические основания для ожидания оптимума этой величины по некоторым критериям. Например, увеличение толщины і-слоя, с одной стороны, увеличивает поглощение световой мощности, но с другой – удлиняет путь фотоносителей и увеличивает их потери за счет рекомбинации. Это позволяет предположить наличие оптимума по максимуму коэффициента преобразования.

На рисунке 5 показаны графики ватт-амперных характеристик, рассчитанных для $x = 0$ (чистый GaN) при различных толщинах і-слоя (h_3).

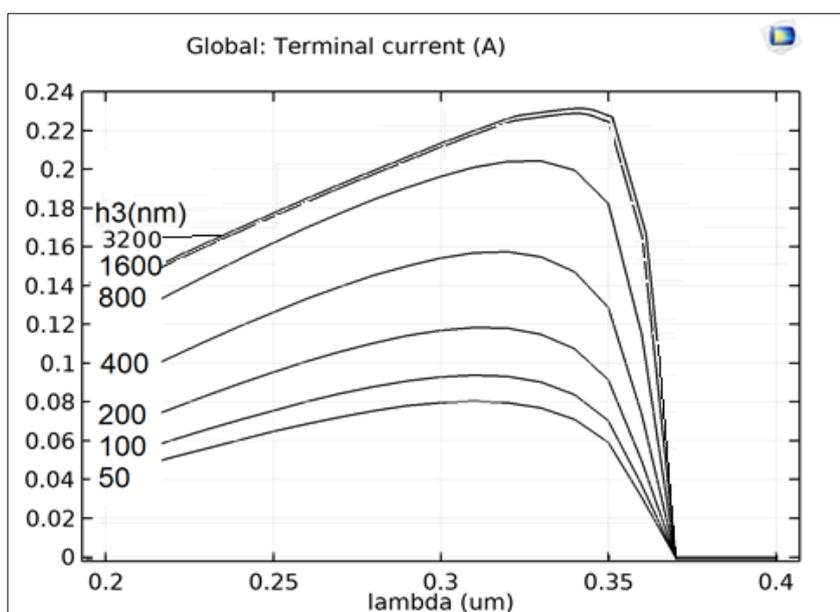


Рисунок 5.

Из данных графиков видно, что изменение толщины і-слоя от 50 до 3200 нм (в 64 раза) увеличивает максимальный фототок от 0,07 до 0,23 А (приблизительно в 3 раза). При этом основной прирост фототока приходится на интервал толщин от 200

до 800 нм. Видимо, этот диапазон толщин *i*-слоя является наилучшим для реализации наибольшего коэффициента преобразования. Тем не менее максимум чувствительности по толщине *i*-слоя не обнаруживается. Кривая графика медленно достигает величины 0,23 А/Вт и далее идет почти горизонтально.

Вольт-амперная характеристика (ВАХ) фотодиода легко строится комсомом, поскольку для этого не нужно учитывать взаимодействие со световым потоком.

На рисунке 6 представлены графики прямой ветви при различных величинах доли алюминия –*x* в твердом растворе. Ход графиков очевиден, поскольку увеличение *x* приводит к увеличению ширины запрещенной зоны, а это, в свою очередь, уменьшает обратный ток и смещает график ВАХ вправо. Интерес представляет лишь величина прямого напряжения, при которой появляется заметный прямой ток. Обозначим его U_x . Тогда $U_0 = 3,2$ В, $U_{0,2} = 3,53$ В, $U_{0,5} = 4,51$ В, $U_{0,8} = 5,2$ В.

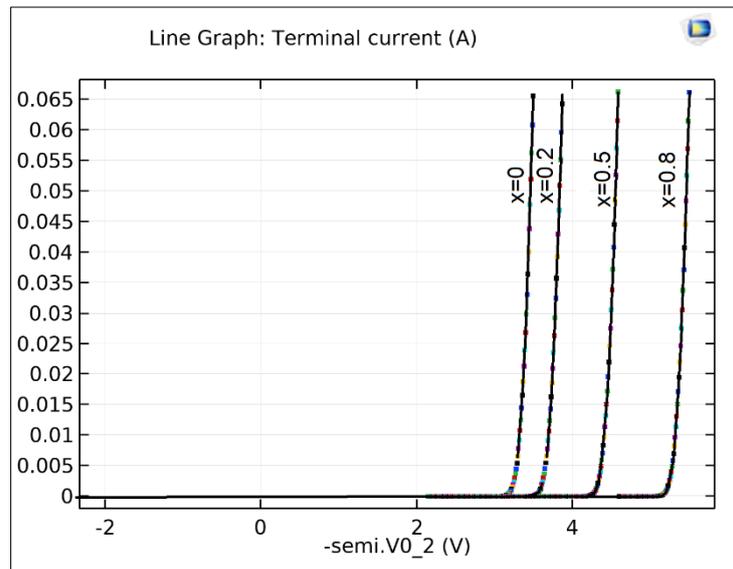


Рисунок 6.

Особого обсуждения заслуживает ветвь обратного напряжения, обуславливающая темновой ток фотодиода. В *p-i-n*-фотодиодах, сделанных на основе широкозонных материалов двойных и тройных соединений нитридов, при комнатных температурах собственная концентрация неосновных носителей заряда очень мала. Следовательно, диффузия носителей заряда не вносит сколько-нибудь заметного вклада в величину темнового тока. Большая ширина запрещенной зоны и толщины *i*-слоя также, практически, обнуляют туннельный ток. Поэтому основной вклад в темновой ток вносят генерационно-рекомбинационные процессы.

Существует несколько гипотез генерации свободных носителей путем их транзита через дефекты кристаллической структуры [12–14]. Хирш и Баррире [12] предложили приписать *p-i-n*-структуре некое сопротивление утечки, обусловленное несовершенством кристаллической структуры. Это сопротивление создает омический обратный ток, пропорциональный обратному напряжению.

Поскольку генерация носителей обусловлена воздействием фононов на валентные и захваченные ловушками электроны, ее интенсивность является функцией температуры. Вид такой функции определяется рассматриваемым механизмом генерации и, как правило, содержит большое количество неопределенных параметров, которые должны подбираться на основе экспериментов.

В такой ситуации нет существенных различий между сложными гипотезами генерации транзитных носителей и простой моделью Шокли – Рида – Холла, в которой требуется только три параметра: расположение энергетического уровня ловушек, время жизни свободных электронов и дырок.

В расчетах было положено: времена жизни $\tau_n = \tau_p = 1\text{ns}$, уровень ловушек на 2 вольта выше потолка валентной зоны. Результат расчета представлен на рисунке 7.

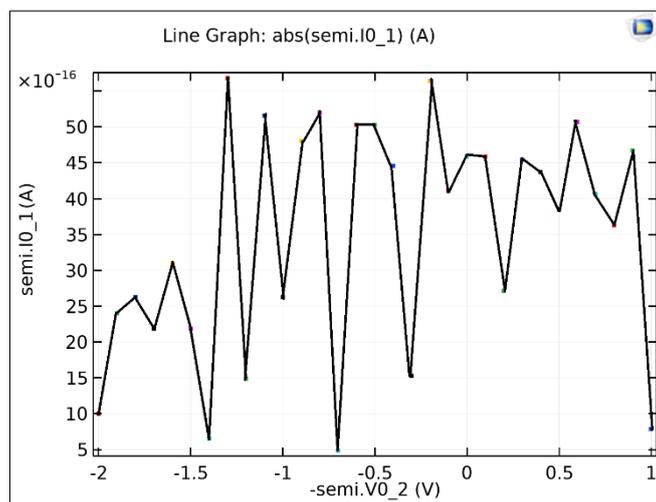


Рисунок 7.

Мы получили хаотичный график темнового тока, который скорее выражает невязку решения и никак не зависит от приложенного обратного напряжения. Средняя величина этого «токового шума» составляет $4 \cdot 10^{-15}$ А. Измерить столь малый ток проблематично, поскольку он сравним с токами утечек диэлектриков. По этой причине ссылки на эксперименты по измерению темнового тока будут малоубедительны. По имеющимся данным [15], величина темнового тока AlGaN фотодиодов составляет около 10^{-14} А, однако делается оговорка о большой погрешности данных измерений.

Заключение

Описанные методы моделирования AlGaN фотодиодов и полученные результаты позволяют вычислить основные характеристики данных приборов до их практической реализации, а также определять требуемые параметры процесса изготовления.

Построенная модель не является полной. В частности, вопросы динамики функционирования: частотные характеристики, быстроедействие – пока остаются без ответа. В то же время выбранное программное средство имеет необходимые для этого инструменты и позволяет в будущем получить ответы на эти вопросы.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Оптические свойства пленок GaN/Al₂O₃, легированных кремнием / Н. С. Заяц [и др.] // Физика и техника полупроводников. – 2009. – Т. 43, вып. 5. – С. 617–620.
2. Mohammad, S. N. Progress and prospects of group III-V nitride semiconductors / S. N. Mohammad, H. Morkoç // Progress Quantum Electron. 1996. – Vol. 20. – P. 361.
3. Ambacher, O. Growth and applications of Group III-nitrides / O. Ambacher // J. of Physics D: Applied Physics. – 1998. – Vol. 31. – P. 2653.

4. Enhancement of the conversion efficiency of GaN-based photovoltaic devices with AlGa_N/InGa_N absorption layers / C. C. Yang [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2010. – Vol. 97.
5. Nearly lattice-matched n, i, and p layers for InGa_N p-i-n photodiodes in the 365–500 nm spectral range / E. A. Berkman [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2008. – Vol. 92. – P. 101118-1–101118-3.
6. In_{0.11}Ga_{0.89}N-based p-i-n photodetector / Y. K. Su [et al.] // Phys. Status Solidi. – 2009. – Vol. C 6(S2). – S. 811–813.
7. Optoelectronics Materials and Devices for Sensing and Imaging / Y. Lu, Y. Zhang, X. Y. Li // 7th International Symposium on Advanced Optical Manufacturing and Testing Technologies : Proc. SPIE 9284. – Harbin, 2014.
8. COMSOL Modeling Software [Electronic resource]. – Mode of access: <https://www.comsol.com>.
9. Никонов, А. П. Оптические свойства гетероэпитаксиальных слоев AlGa_N / А. П. Никонов, К. О. Болтарь, Н. И. Яковлева // Приклад. физика. – 2014. – № 2. – С. 50–52.
10. Куэй, Р. Электроника на основе нитрида галлия : пер. с англ. / Р. Куэй. – М. : Техносфера, 2011. – 582 с.
11. ATLAS User's Manual, Device Simulation Software, Version 5.20.2. R [Electronic resource]. – Mode of access: http://www.eng.buffalo.edu/~wie/silvaco/atlas_user_manual.pdf.
12. Hirsch, L. Electrical characterization of InGa_N/Ga_N light emitting diodes grown by molecular beam epitaxy / L. Hirsch, A. S. Barriere // J. of Applied Physics. – 2003. – Vol. 94, № 8. – P. 5014.
13. Мотт, Н. Электронные процессы в некристаллических веществах / Н. Мотт. – М. : Мир, 1982. – 472 с.
14. Temkin, H. Ultraviolet Photodetectors Based on Ga_N and AlGa_N, in Recent and Evolving Advanced Semiconductor and Organic Nano-Technologies / H. Temkin // Nano-scale Electronics and Optoelectronics. – 2003. – Vol. 1.
15. Анализ механизмов темновых токов матриц ультрафиолетовых фотодиодов на основе гетероструктур AlGa_N / Н. И. Яковлева [и др.] // Успехи приклад. физики. – 2018. – Т. 6, № 1. – С. 44–54.

Рукапіс паступіў у рэдакцыю 26.05.2020

Vorsin N. N., Gladyshev A. A., Kushner T. L., Tarasyuk N. P., Chugunov S. V. Modelling and Development of AlGa_N p-i-n-Photodiodes

AlGa_N ternary alloys with a band gap from 3.4 to 6.2 eV are very promising for photodetectors in the UV wavelength range. Using Comsol software based on Al_xGa_{1-x}N, a p-i-n photodiode model was developed, including its I – V characteristic, spectral sensitivity of received radiation, absorption coefficient as a function of aluminum fraction and depletion layer thickness. The peak sensitivity of the photodiode is from 0.08 to 0.18 A / W at wavelengths of 0.2–0.33 μm. This corresponds to experimental results taken from the literature.