第 22 卷第 11 期　　半 导 体 学 报　　Vol. 22, No. 11
2001 年 11 月　　CHINESE JOURNAL OF SEMICONDUCTORS　　Nov., 2001

碲镉汞光伏器件的电极界面参数*

胡晓宁　李言谨　方家熊

(中国科学院上海技术物理研究所 传感技术国家重点实验室, 上海　200083)

摘要: 利用热场发射理论和数值计算方法, 分析了碲镉汞光伏器件的电流-电压特性, 提取了金属-半导体(MS) 界面参数, 并对这些参数进行了讨论. 结果表明, Sn/Au 金属膜-碲镉汞薄膜 PN 器件的电极界面的势垒高度锁定在"Bardeen"限, 界面密度比介质膜-碲镉汞的大一个量级.

关键词: MS 界面; 电流-电压特性; 碲镉汞光伏器件

PACC: 7240; 7320; 7330; 7340S

中图分类号: TN304.2+2　　**文献标识码**: A　　**文章编号**: 0253-4177(2001)11-1439-05

1　引言

红外焦平面技术在民用和军事领域有着非常重要的应用[1]. 碲镉汞这种三元系化合物在红外探测器制作中占据着举足轻重的地位, 是制作红外探测器的最佳材料[2]. 碲镉汞红外焦平面器件仍是目前红外器件发展的一个方向.

碲镉汞红外焦平面器件以 PN 结为探测单元. 与通常的半导体器件一样, 电极技术是碲镉汞光伏器件研制中的关键技术之一.

通常, 金属-半导体(MS) 接触的研究需要分立地来做, 即制作单独的 MS 接触来进行测量、分析[3], 并把研究的结果运用于器件的分析和电极的制作. 对碲镉汞的 MS 接触研究前人已做过不少工作[5—7], 但是这些结果只是间接地说明器件电极的情况, 特别是对碲镉汞这种特殊的半导体材料, 材料脆弱、性质多变、不稳定[2], 工艺过程中材料性质容易变化, 因此单独的 MS 接触的研究结果并不一定真实地反映器件电极的状况. 如果能从最终器件的电流-电压曲线上直接获得器件电极的有关信息, 那是非常有意义的, 也对器件制作工艺有直接的指导作用.

本文即利用热场发射理论和数值计算方法, 从碲镉汞光伏器件的电流-电压特性直接提取了 MS 界面参数, 并对这些参数进行了讨论.

2　方法描述

假设器件模型及对应的电路原理图分别如图 1 和图 2 所示. 其中, I_s 为背景或信号产生的光电流, D_d 为器件所要求的 P-N 结二极管, D_j 为金属-HgCdTe 接触形成的 Schottky 结. R_p 为二极管的并联电阻, R_{ss} 为基区体电阻. 所有的电流、电压按图中所标的方向为正.

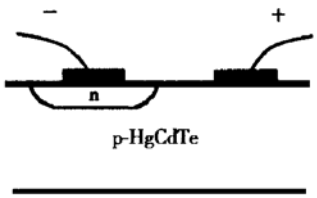

图 1　器件的结构剖面图

FIG. 1　Cross Section of n-on-p Device

D_j 的存在对器件的电流-电压特性有影响, 影响的大小取决于接触电阻与器件本身阻抗大小的比较. 通过对图 2 的电路分析我们可以得到, 当器件的正向偏压大到一定值 V_{th} 时, 器件表观的电流-电压特性基本上由 Schottky 结的伏-安特性决定, 外加

* 国家自然科学基金资助项目(批准号: 19805014).

胡晓宁　1968 年出生, 博士, 主要从事红外探测器的器件物理及器件工艺研究.

2000-11-02 收到, 2001-02-13 定稿

©2001 中国电子学会

电压基本上加在 D_j 上.

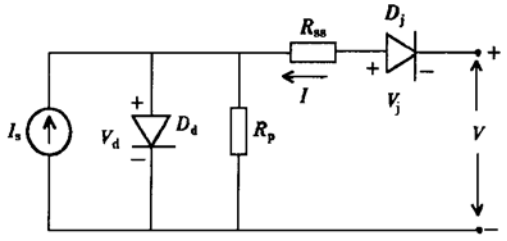

图 2 器件的电路原理图

FIG. 2 Equivalent Circuit of Device

此时, 根据图 2, 很容易得出: $I = -I_j$. 假设肖特基势垒电流是以热场发射电流为主, 则可得出[4]:

$$I = -A^* A T^2 \exp\left(\frac{-q\varphi_b}{n_j kT}\right) \times \exp\left(\frac{qV_j}{n_j kT}\right)\left[1 - \exp\left(\frac{-qV_j}{kT}\right)\right] \quad (1)$$

因为

$$|qV_j| \gg kT$$

所以

$$I \approx A^* A T^2 \exp\left(\frac{-q\varphi_b}{n_j kT}\right) \exp\left(\frac{-qV_j}{kT}\left(1 - \frac{1}{n_j}\right)\right) \quad (2)$$

又根据电路原理, $V_j = -V + IR_{ss}$

所以 $$I = A^* A T^2 \exp\left(\frac{-q\varphi_b}{n_j kT}\right) \times \exp\left(\frac{q}{kT}\left(1 - \frac{1}{n_j}\right)(V - IR_{ss})\right) \quad (3)$$

所以 $$\ln I = \ln I_{j0} + \frac{q}{kT}\left(1 - \frac{1}{n_j}\right)(V - IR_{ss}) \quad (4)$$

其中 $$I_{j0} = A^* A T^2 \exp\left(\frac{-q\varphi_b}{n_j kT}\right) \quad (5)$$

这样, 我们根据实验测得的电流-电压曲线, 通过最小二乘法对(4)式进行拟合, 可以得到基区体电阻 R_{ss} 以及 I_{j0}、n_j 和接触势垒高度 φ_b 这些 MS 界面参数.

3 实际 HgCdTe 光伏器件 MS 界面参数

3.1 参数获取

图 3、4 和 5 分别是 64×64 元面阵器件 M844 和 256×1 线列焦平面器件 L168、L221 随机选取部分光敏元测量得到的 I-V 曲线. M844 的半导体材料为分子束外延 $Hg_{1-x}Cd_xTe$, 电极材料为 Sn/Au; L168 和 L221 的半导体材料为液相外延 $Hg_{1-x}Cd_xTe$, 电极也为 Sn/Au. PN 结区面积均为 50μm×50μm, M844 的 P 区公共电极面积为 $5.2\times10^{-7}m^2$, L168 和 L221 的 p 区电极面积为 $3.89\times10^{-6}m^2$.

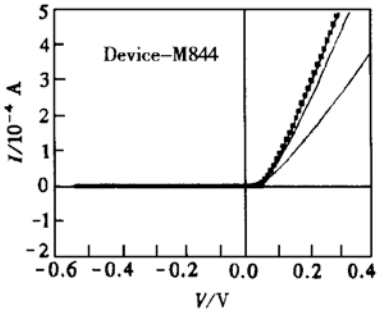

图 3 器件 M844 的 I-V 曲线

FIG. 3 I-V Characteristic of M844

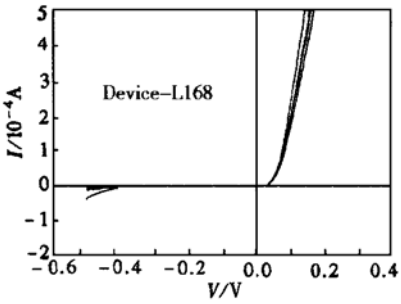

图 4 器件 L168 的 I-V 曲线

FIG. 4 I-V Characteristic of L168

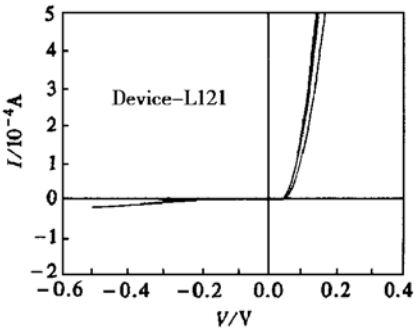

图 5 器件 L221 的 I-V 曲线

FIG. 5 I-V Characteristic of L221

我们对偏压大于 0.2V 以上的 I-V 数据用(4)式进行最小二乘法的拟合. 拟合过程中, 为便于计算, 将(4)式写成:

$$V = aI + b\ln I + c \quad (6)$$

其中　$a = R_{ss}$,　$b = \left[\frac{q}{kT}\left(1 - \frac{1}{n_j}\right)\right]^{-1}$,

$$c = -\ln I_{j0} \times \left[\frac{q}{kT}\left(1 - \frac{1}{n_j}\right)\right]^{-1} \tag{7}$$

分别对每一个器件中的若干探测元进行拟合,根据拟合得到的 a、b、c,再代入(7)、(5)式,就可以得到 I_{j0}、理想因子 n_j、基区体电阻 R_{ss} 以及接触势垒高度 φ_B. 计算结果列在表 1. 组分 x 为 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 中 Cd 的克分子数, p 为基区载流子浓度, μ 为基区迁移率.

表 1　实际 HgCdTe 光伏器件的电极界面参数

Table 1　MS Interface Parameters of HgCdTe PV Device

元件编号	组分 x	p/cm^{-3}	$\mu/(cm^2 \cdot V^{-1} \cdot s^{-1})$	规格	R_{ss}/Ω	n_j	I_{j0}/A	φ_B/eV
M844-1					665.9	1.234	9.93×10^{-6}	0.1298
M844-2	0.24	6.52×10^{15}	758	64×64	744.7	1.255	8.17×10^{-6}	0.1337
M844-3					433.2	1.394	7.77×10^{-6}	0.1407
L168-1					69.6	1.101	1.01×10^{-4}	0.1135
L168-2	0.231	2.51×10^{16}	551	256×1	76.1	1.103	0.89×10^{-4}	0.1146
L168-3					72.9	1.109	0.97×10^{-4}	0.1146
L221-1					26.6	1.106	0.95×10^{-4}	0.1145
L221-2	0.233	6.90×10^{15}	721	256×1	23.4	1.109	1.00×10^{-4}	0.1144
L221-3					26.5	1.106	0.92×10^{-4}	0.1147

3.2　结果讨论

3.2.1　基区体电阻 R_{ss}

上面的计算结果将器件的串联电阻中的基区体电阻和电极接触电阻分离开来. 基区体电阻 R_{ss} 是由器件 p 区电阻率、基区厚度以及 p 区、n 区电极之间的尺寸决定的. L168 和 L221 都是液相外延(LPE)材料制作的 256×1 结构器件, 材料性质、组分接近, 所以两个器件的 R_{ss} 差别不大, 主要来自芯片厚度的差别. 而分子束外延(MBE)材料制作的 64×64 元器件 M844, 结构与其它两个器件不同, 所以与 L168 和 L221 相比, R_{ss} 差别也很大.

3.2.2　n_j、I_{j0} 和 φ_B

我们得到了三个器件不同的电极接触参数: 理想因子 n_j、I_{j0} 以及接触势垒高度 φ_B. 从表中数据可以看出, 器件 L168 和 L221 的电极界面参数非常一致, 说明目前的电极工艺比较稳定, 这些参数反映的就是目前电极工艺条件下组分 x 等于 0.23 左右的 LPE-HgCdTe 的金-半接触质量. M844 情况有所不同, n_j 较高, 说明界面输运中隧穿电流或复合电流成分较大. 势垒高度 φ_B 的形成因素较复杂, 一般认为与金属功函数、半导体功函数、界面态以及镜像力等因素有关. 现在我们对上面得到的势垒高度值作一讨论.

我们选用的电极材料是 Sn/Au. Sn 的功函数 W_m 为 4.43eV[3], $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 的 $\Phi_s = E_0 - E_v$(E_0 为真空能级, E_v 为价带顶) ≈4.9eV ($x = 0.2$)[8]. 考虑 p 型 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 载流子的统计分布, 因为液氮温度下 $x = 0.2$ 的 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 价带顶的有效状态密度: $N_v = 2\frac{(2\pi m_p^* kT)^{3/2}}{h^3}$[9], 经计算为 $3.46\times10^{15}cm^{-3}$, 而三个器件的载流子浓度都比较高, 所以费米能级进入价带, 载流子发生简并, 服从费米分布. 费米能级位置可以通过式(8)求出:

$$p_0 = N_v \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{1/2}\left(\frac{E_v - E_F}{kT}\right) \tag{8}$$

其中　$F_{1/2}(\xi)$ 是费米积分. 经估算, M844、L168 和 L221 的费米能级分别在价带顶下面约 0.0093、0.0292 和 0.00963eV 的位置. 这样 M844、L168 和 L221 的功函数 W_s 分别为 4.91、4.93 和 4.91eV, Sn 的功函数差分别为 0.480、0.499 和 0.480eV, 而上面得到的势垒高度值却比这个值小很多. 可见功函数以外的因素影响很大.

镜像力引起的势垒降低可通过公式(9)[3]算得, 约为 1.83×10^{-5}eV, 影响很小.

$$\Delta\varphi_B = \left\{\frac{q^3 N_d}{8\pi^2(\epsilon_s')^2\epsilon_s}\left(V_d - \frac{kT}{q}\right)\right\}^{1/4} \tag{9}$$

其中　ϵ_s 为静态介电常数; ϵ_s' 为高频介电常数, 分别取于文献[4]中数值.

考虑界面态的影响, 如果样品界面态密度很高, 则势垒高度被"锁定"[3]在

$$\varphi_B \approx E_g - \varphi_0 \tag{10}$$

即所谓"Bardeen"限. E_g 为禁带宽度, φ_0 为界面态能

级相对于价带顶的位置. 我们用 Hansen 公式[10]分别计算两个器件的禁带宽度, 估算出器件 M844 和 L168 三个光敏元的界面态能级位置 φ_0(价带顶上面), 见表 2.

表 2 实际 HgCdTe 光伏器件的电极界面态能级位置

Table 2 MS Interface State Energy Level of HgCdTe PV Device

元件编号	组分 x	E_g/eV	φ_0/eV	φ_0/eV
M844-1			0.1298	0.0177
M844-2	0.24	0.1475	0.1337	0.0138
M844-3			0.1407	0.0068
L168-1			0.1135	0.0195
L168-2	0.231	0.1330	0.1146	0.0184
L168-3			0.1146	0.0184
L221-1			0.1145	0.0217
L221-2	0.233	0.1362	0.1144	0.0218
L221-3			0.1147	0.0215

势垒高度被"锁定"在"Bardeen"限, 此时的界面态密度 D_s 很大. 因器件镀膜前暴露在空气中生成一层薄自然氧化膜, 这里暂且假设界面态是由自然氧化膜引入的, 则界面态密度满足: $(q\delta_d D_s/\epsilon_i) \gg 1$[3]. δ_d 是氧化膜厚度, 假设为 2nm, ϵ_i 为氧化膜介电常数. 相对介电常数 ϵ_{ir} 近似为折射率的平方, 而自然氧化膜折射率为 2.1[11], 所以 ϵ_i 为 3.9×10^{-11}F/m. 计算结果表明, 上述器件表观界面态密度 D_s 至少大于 $1.22\times10^{17}(\mathrm{eV}^{-1}\cdot\mathrm{m}^{-2})$, 即 $1.22\times10^{13}(\mathrm{eV}^{-1}\cdot\mathrm{cm}^{-2})$. 这一界面态密度比通常报道的 HgCdTe 表面钝化膜界面态密度 10^{10}—$10^{12}(\mathrm{eV}^{-1}\cdot\mathrm{cm}^{-2})$[11]大一个量级, 所以 MS 界面态可能还与其它因素有关, 比如金属原子的淀积诱发某种缺陷能级.

4 结语

本文利用热场发射理论和最小二乘法拟合, 对实际碲镉汞光伏器件正向大偏压下的电流-电压特性进行了分析、计算, 提取了 MS 界面参数, 并对这些参数进行了讨论. 结果表明, Sn/Au 薄膜与碲镉汞器件的电极界面的势垒高度锁定在"Bardeen"限, 界面密度比介质膜-碲镉汞的大一个量级, 作者认为可能与金属原子的淀积诱发某种缺陷能级有关.

参考文献

[1] M. Z. Tidrow, W. A. Beck, W. W. Clark *et al.*, SPIE, 1999, **3629**: 100.

[2] TANG Dingyuan, Infrared Physics and Technology, 1974, **6**: 345[汤定元, 红外物理与技术, 1974, **6**: 345].

[3] E. H. Rhoderick, Metal-Semiconductor Contacts, Clarendon Press, Oxford, 1980.

[4] John Brice and Peter Cappered, Properties of Mercury Cadmium Telluride, London: INSPEC, 1987.

[5] D. J. Friedman, I. Lindau and W. E. Spicer, Properties of Mercury Cadmium Telluride, EMIS Datareviews Series No. 3, INSPEC. IEE, 1987, 171.

[6] D. J. Friedman, I. Lindau and W. E. Spicer, Properties of Mercury Cadmium Telluride, EMIS Datareviews Series No. 3, INSPEC. IEE, 1987, 164.

[7] W. E. Spicer, D. J. Friedman and G. P. Carey, J. Vac. Sci. Technol., 1988, **A6**: 2746.

[8] Casselman T. N., Sher A., Silbermam J., Spicer W. E. *et al.*, J. Vac. Sci. Technol., 1983, **A1**(3): 1692.

[9] LIU En-ke, ZHU Bing-sheng *et al.*, Semiconductor Physics, National Defence Industry Press, 1979[刘恩科, 朱秉升, 等编, 半导体物理学, 国防工业出版社, 1979].

[10] G. L. Hansen, J. L. Schmit and T. N. Casselman, J. Appl. Phys., 1982, **53**(10): 7099.

[11] Y. Nemirovsky and G. Bahir, J. Vac. Sci. Technol., 1989, **A7**(2): 450.

MS Interface Parameters Extracted from Current-Voltage Characteristic of PV Device*

HU Xiao-ning, LI Yan-jin and FANG Jia-xiong

(*State Key Laboratories of Transducer Technology, Shanghai Institute of Technical Physics, The Chinese Academy of Sciences, Shanghai* 200083, *China*)

Abstract: The MS interface parameters are extracted from HgCdTe PV devices' current-voltage characteristic by applying Thermionic-Field Emission (TFE) theory and numerical analysis. Discussion shows that the barrier height of Sn/Au-HgCdTe contact is pinned at "Bardeen limit" and the interface state density is one magnitude higher than that of the dielectric film-HgCdTe interface.

Key words: MS interface; current-voltage characteristic; HgCdTe PV device

PACC: 7240; 7320; 7330; 7340S

Article ID: 0253-4177(2001)11-1439-05

* Supported Supported by National Natural Science Foundation of China Under Grant No. 19805014.

HU Xiao-ning was born in 1968, doctor, whose major is in fabrication and physics of infrared detector.

Received 2 November 2000, revised manuscript received 13 February 2001

©2001 The Chinese Institute of Electronics