

InP/InGaAsP/InGaAs 雪崩光電二極體之 TCAD 模擬、 護環效應與暗電流分析 TCAD simulation, guard ring effect and dark current analysis of InP/InGaAsP/InGaAs avalanche photodiode

高英倫 Ying-Lun Kao

指導教授:林浩雄博士 Advisor: Hao-Hsiung Lin, Ph.D.

中華民國 109 年 1 月 January, 2020





誌謝

短短雨年研究所讓我成長許多,在這過程中非常感謝周結學長。總 是不辭辛勞地聆聽我的研究煩惱,教我怎麼適應繁忙的研究所生活, 排解研究壓力。如果不是周結學長的幫助,我可能到碩二都很難進入 狀況,所以真的是非常感謝周結學長的熱心協助。另外也要感謝志騰, 經常很有耐心地跟我討論許多元件物理問題,經常帶給我很大的啟 發。在你畢業後,有很多研究心得不再好與你分享,少了一位這麼好 的研究夥伴真是可惜。非常感謝你過去這一年來的協助與陪伴。感謝 良軒教我怎麼量測元件,沒有你的無私分享,我實在沒辦法量測這麼 多元件,所以真的很感謝你。最後是朝政學長。如果不是你幫我設定 好 TCAD 模型,我很可能還在摸索階段中。也感謝你非常有耐心地教 我很多東西,實在是非常感謝、感激不盡。

再來是很感謝林浩雄教授的指導,提供我 TCAD 相關的研究主題, 讓我能夠發揮物理專長以及培養對程式能力,以及教我怎麼在有限的 時間內,尋找有價值的參考文獻與研究題材,盡可能做出有價值的研 究。這種風險管理的精神是非常抽象的,所以非常感謝教授給我機會 學習磨煉。感謝顏叔叔與顏阿姨,沒有您們的經濟支柱,在這兩年, 每個月提供我一萬五的生活費,我是沒有辦法在僅有兩位家教的情況 下,專心學習做研究的。您們真的是我這輩子的恩人,真的是千言萬 語說不盡感激之情。最後是感謝我的女友,文芳。沒有妳的陪伴與關 心,我沒辦法在這兩年克服許多研究上的挑戰,學到許多艱澀的學 問。謝謝妳的不離不棄,在我需要妳的時候,都待在我的身邊,謝謝 妳。

iii





摘要

光偵測器的關鍵特性就在於其足夠小的暗電流與光電流增益。對於 前者,我們需要了解暗電流成因以設計足夠小暗電流的元件。對於後 者,由於 SAGCM 平面結構之雪崩光電二極體很可能發生邊緣崩潰, 降低元件增益。因此,我們需要設計護環(Guard ring)以抑制邊緣崩 潰。

為了研究雪崩光電二極體之暗電流成因,本研究首先藉由推演其 暗電流成因理論,包括能帶穿隧效應(band-to-band tunneling)與缺陷 輔助穿隧效應(trap-assisted tunneling),研究其理論參數之物理意義。 並推導出能用以擬合 Hurkx 缺陷輔助穿隧模型的擬合公式,以了解暗 電流成因。接著再藉由半導體工藝模擬軟體(Sentaurus TCAD)建立 其物理模型以設計具有最小暗電流之磊晶結構。最後,我們設計了多 種護環結構以研究護環效應,包括與中央區接觸的側護環(Attached Guard Ring, AGR),以及不與其接觸的懸護環(Floating Guard Ring, FGR)。

藉由樣品分析,我們發現擴散開口越大者,鋅擴散越淺。較深的 側護環元件,有著較大的元件增益與崩潰電壓,也就越能抑制邊緣崩 潰。懸護環離側護環越近,增益越小,越無法抑制邊緣崩潰。我們也 分析了部分元件之異常電性,提出了會造成提前擊穿、漏電流與崩潰 前之降電流等現象之模型。

關鍵字:雪崩光電二極體、護環、暗電流、能井輔助穿隧、能帶穿隧

v





Abstract

The key characteristics of photodetector is sufficiently small dark current and large gain. For the former, we need to understand the origin of dark current. For the latter, since it is very likely that the planar SAGCM APD has edge breakdown and thus has smaller gain, we need to design guard ring to supress edge breakdown.

To investigate the origin of dark current, we first derive the dominant dark current mechanisms, including band-to-band tunneling and trap-assisted tunneling. Then we could understand the physics meaning of their modeling parameters. For trap-assisted tunneling, we derive the Hurkx model and the corresponding fitting formula. Second, we use Sentaurus TCAD to simulate the avalanche photodiode, establishing the epitaxial structure which has small enough dark current. Finally, we design various guard ring structures to investigate its effects, including attached guard ring (AGR) and floating guard ring (FGR).

It is found that the larger the diffusion window is, the shallower the diffusion depth is. Deeper attached guard ring has higher gain and breakdown voltage, and thus suppressing edge breakdown. The closer floating guard ring has lower gain. We also analyze the anomalous I-V characteristics and propose the advanced punch through, surface leakage and guard-ring punch through models.

Keywords: Avalanche photodiode \circ Guard ring \circ Dark current \circ Trapassisted tunneling \circ Band-to-band tunneling





Contents

誌	謝		iii
摘	要		v
Ab	stract	t	vii
1	緒論		1
	1.1	研究背景	1
	1.2	研究動機	1
	1.3	研究目的	2
	1.4	研究方法	2
	1.5	論文架構	3
	1.6	名詞解釋	3
2	文獻	回顧	5
	2.1	元件結構	5
		2.1.1 磊晶結構	5
		2.1.2 平面結構	6
		2.1.3 護環結構	7
	2.2	暗電流成因	10
3	元件	模擬	13
	3.1	鋅擴散模型	13
	3.2	能帶穿隧模型	16

						101	5101		10010	210102	
		3.2.1	理論	•	101	X	ĥ	-	No.	36	5
		3.2.2	參數驗證	0101010	••	1	-	J. N.	GAN	21	1.
	3.3	SRH 後	夏合模型	1010L	Y			A. A.		24	1074 1
		3.3.1	等效質量近似	•		101	11.5	B IOT	, <u>B</u>	25	5
		3.3.2	Hurkx 缺陷輔助穿隧模型			. .	•			31	1
		3.3.3	Hurkx 模型有效性			. .				38	8
		3.3.4	原初生命期			· -				43	3
	3.4	撞擊游	離模型			· -				46	6
		3.4.1	Van Overstraeten-de Man 模型			, .				47	7
		3.4.2	Okuto-Crowell 模型			, .				48	3
		3.4.3	InP 文獻數據比較			, .	•			49)
	3.5	傳輸方	程式	•		, .	•	•		5()
	二川	<u>ا د ا د</u>								_	
4	九件	設計	. 14							5:	5
	4.1	磊晶結	「稱	•	• •		•	•		52	3
		4.1.1	設計流程	•			•	•		54	1
		4.1.2	以量子效率決定吸收層厚度	•		· -	•	•		54	1
		4.1.3	基本設計考量	•			•	•		57	7
		4.1.4	一維模擬:以低溫條件與暗電流求最佳參數	•		· -	•	•		58	3
		4.1.5	二維模擬:改變倍增層濃度與游離係數模型	•	• •	. .	•	•		61	1
	4.2	護環模	擬	•	• •	• •	•	•		65	5
		4.2.1	淺側護環	•		· -	•	•		65	5
		4.2.2	深側護環			· -				65	5
		4.2.3	側護環搭配懸護環	•		. .	•	•		68	3
	4.3	護環設	計			· -				68	3
		4.3.1	擴散順序	•		· -	•	•		69)
		4.3.2	護環尺寸	•	• •	· -	•	•		71	1
	4.4	接觸電	極設計							71	1

5	樣品	分析	x- 12 2	73
	5.1	樣品結	;構	73
	5.2	護環效	c應	75
		5.2.1	量測方式	75
		5.2.2	倍增層厚度	77
		5.2.3	主動區直徑	80
		5.2.4	懸護環距離	85
		5.2.5	側護環深度	88
		5.2.6	側護環直徑	91
		5.2.7	電極效應	93
		5.2.8	元件增益	94
	5.3	暗電流	ì分析	97
		5.3.1	擬合公式	97
		5.3.2	定溫擬合	99
		5.3.3	變溫擬合	101
	5.4	異常電	14	105
		5.4.1	短路現象	105
		5.4.2	漏流現象	105
		5.4.3	提前擊穿現象	109
		5.4.4	崩潰前之降電流	110
	5.5	量子效	[率	115
		5.5.1	光源頻譜	115
		5.5.2	元件增益	115
		5.5.3	結果討論	116
6	結論			119
Bil	bliogr	aphy		121





List of Figures

2.1	磊晶結構示意圖	6
2.2	塔台結構與平面結構示意圖	7
2.3	Bartdorf 與 Chynoweth 設計的護環結構	7
2.4	平面—圓弧形擴散輪廓示意圖	8
2.5	用以研究邊緣曲率半徑對崩潰電壓之影響所設計的特殊結構	9
2.6	雙懸護環結構示意圖	9
3.1	鋅擴散之 SIMS 數據與 TCAD 模擬結果之比較	15
3.2	能帶穿隧之能障模型	18
3.3	簡單立方晶格的布里淵區示意圖	19
3.4	能帶穿隧再生速率分佈示意圖	22
3.5	In _{0.53} Ga _{0.47} As P ⁺ N 陡接面二極體之 I-V 關係	23
3.6	$In_{0.53}Ga_{0.47}As P^+N$ 陡接面二極體之 $J/V - 1/E_m$ 關係	23
3.7	缺陷輔助穿隧機制示意圖 (1)	24
3.8	布拉赫與瓦尼爾函數空間分佈示意圖	27
3.9	缺陷輔助穿隧機制示意圖 (2)	32
3.10	SRH 復合過程	33
3.11	傳導帶與價帶之能量關係示意圖	40
3.12	InP 電子分佈函數之蒙地卡羅模擬	42
3.13	InP 之等效生命期	43
3.14	InP 之原初生命期	45
3.15	Baraff 理論與 Okuto-Crowell 模型比較圖	50
3.16	Cook 與 Taguchi 之 InP 游離係數比較圖	51

		Tran
4.1	磊晶結構設計流程圖	54
4.2	In _{0.53} Ga _{0.47} As 吸收係數	57
4.3	塔台結構模擬示意圖	59
4.4	一維塔台結構之倍增層厚度與電荷層濃度設計參數	60
4.5	平面結構模擬示意圖	61
4.6	倍增層濃度、游離模型與邊緣崩潰效應	62
4.7	In _{0.53} Ga _{0.47} As 吸收層最大電場與倍增層濃度之關係	63
4.8	邊緣崩潰之增益分析切線圖	63
4.9	邊緣崩潰之增益積分比較圖	64
4.10	淺側護環電性模擬	66
4.11	深側護環電性模擬	67
4.12	側護環搭配懸護環結構模擬示意圖	68
4.13	磊晶結構設計圖	69
4.14	主動區與護環之擴散順序差異示意圖	70
4.15	護環尺寸示意圖	71
4.16	接觸電極設計圖	72
5 1	日间桂二周	73
5.1	田因保阳回·····	73
5.2	送口有具处楼元音周	74
5.5	家的品面的一种小心园。	74
5. 1	位 适 届 厚 庄 於 確 : 元 任 经 楼 周	70
5.5	伯省倡, 子及 X 芯· 九 们 福 供 国 · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	78
5.0	位益届厚度放雁: 导测元件分佈圖	78
5.8	位 過 唇 度 放 確 : 映 雪 流 昜 測 社 卑	70
5.0	位 描 届 厚 庄 放 雁 · 吨 雪 法 景 測 社 果 對 景 測 力 序 之 緣 仆	70
5.10	市省信序及效心·咱电流重风后不到重风穴方之变化	79 80
5.10	王凱匹且任效應,例還來牧及的几什帶柵國	80
5.11	工助四且住双應・ 開設 依 牧 休 的 儿 什 給 傳 回	0U 01
5.12	土別四且徑效應・里测儿什分仰回	ð I 0 1
5.13	土町匝且徑双應・暄竜氚重測結禾(Y 為4`0 與 / 區)	81

		In
5.14	主動區直徑效應:較有參考價值的暗電流量測比較	82
5.15	主動區直徑效應:暗電流與直徑的關係(淺側護環)	82
5.16	主動區直徑效應:暗電流與直徑的關係(深側護環)	83
5.17	主動區直徑效應:擊穿、崩潰與降電流電壓統計圖(淺側護環)	83
5.18	主動區直徑效應:擊穿、崩潰與降電流電壓統計圖(深側護環)	84
5.19	懸護環效應:TCAD 摻質濃度與電場模擬	85
5.20	懸護環效應:TCAD 電流密度與 I-V 模擬	85
5.21	懸護環效應:擊穿、崩潰與降電流電壓分佈圖	86
5.22	懸護環效應:沒有懸護環的擴散開口效應示意圖	87
5.23	懸護環效應:不同懸護環距離造成的擴散開口效應示意圖	87
5.24	側護環深度效應:TCAD 之 I-V 模擬電性圖	88
5.25	側護環深度效應:TCAD 掺質濃度與電場模擬	88
5.26	側護環深度效應:中央電場與邊緣電場隨元件偏壓的變化	89
5.27	側護環深度效應:増益變化示意圖	89
5.28	側護環深度效應:搭配不同主動區直徑之電性比較圖	90
5.29	側護環深度效應:搭配不同懸護環距離之電性比較圖	90
5.30	側護環直徑效應:TCAD 掺質濃度與電場模擬	91
5.31	側護環直徑效應:TCAD 模擬 I-V 電性圖	91
5.32	側護環直徑效應:擊穿、崩潰與降電流電壓空間分佈圖	92
5.33	側護環直徑效應:擊穿、崩潰與降電流電壓趨勢圖	92
5.34	電極效應:電極示意圖	93
5.35	電極效應:電性比較圖	93
5.36	元件增益:元件之 PN 接面示意圖	94
5.37	元件增益:增益估算示意圖	95
5.38	元件增益:不同側護環深度之增益比較圖	96
5.39	元件增益:不同懸護環距離之增益比較圖	96
5.40	定溫擬合:100 μm 元件	99
5.41	定溫擬合:200 μm 元件	101
5.42	定溫擬合:800 μm 元件	102

	10/01/01/01/02
5.43	變溫擬合:100 μm 元件 102
5.44	變溫擬合:100 µm 元件之崩潰電壓與原初生命期對溫度的關係 102
5.45	變溫擬合:240 μm 元件 104
5.46	變溫擬合:240 μm 元件之崩潰電壓與原初生命期對溫度的關係 104
5.47	短路元件空間分佈與電性圖 105
5.48	漏流元件空間分佈與電性圖 106
5.49	漏電流之帶電氮化物模型106
5.50	異常電性:表面漏電流之 TCAD 模擬 I-V 圖
5.51	異常電性:漏流現象之 TCAD 摻質濃度與電場模擬 108
5.52	異常電性:漏流現象之 TCAD 電流密度與電子濃度模擬 108
5.53	異常電性:漏流現象之 TCAD 撞擊游離速率分佈模擬 108
5.54	提前擊穿元件空間分佈與電性圖 109
5.55	異常電性:提前擊穿之 I-V 模擬 109
5.56	異常電性:提前擊穿現象之 TCAD 摻質濃度 110
5.57	異常電性:提前擊穿現象之 TCAD 電場與電流密度 110
5.58	崩潰前降電流元件空間分佈與電性圖
5.59	崩潰前降電流之懸護環距離模擬111
5.60	崩潰前降電流之懸護環擊穿 I-V 圖
5.61	崩潰前降電流之光電流成分圖
5.62	崩潰前降電流之電場變化113
5.63	崩潰前降電流之撞擊游離率變化113
5.64	崩潰前降電流之電子濃度變化 113
5.65	崩潰前降電流之電洞濃度變化
5.66	崩潰前降電流之電子速度變化
5.67	崩潰前降電流之電洞速度變化
5.68	鹵素光源之功率頻譜量測
5.69	雪崩光電二極體之倍增示意圖 116
5.70	雪崩光電二極體之增益計算
5.71	量子效率頻譜



List of Tables

3.1	費米擴散模型參數	15
3.2	能帶穿隧模型參數	20
3.3	能帶穿隧模型擬合參數	22
3.4	缺陷輔助穿隧模型參數	38
3.5	Scharfetter 生命期模型參數	46
3.6	InP 撞擊游離模型參數 (1)	48
3.7	In _{0.53} Ga _{0.47} As 撞擊游離模型參數	48
3.8	In _{0.89} Ga _{0.11} As _{0.74} P _{0.26} 撞擊游離模型參數	49
3.9	InP之Baraff 撞擊游離理論參數	49
3.10	InP 之撞擊游離模型參數 (2)	50
4.1	磊晶結構設計參數	64
5.1	元件設計表	75
5.2	100 μm 元件之 TCAD 擬合參數	00
5.3	200 μm 與 800 μm 元件之 TCAD 擬合參數	01
5.4	變溫擬合:#T-APD 磊晶結構	03





Chapter 1

緒論

1.1 研究背景

近年興起了人工智慧的風潮,人們對於自駕車、無人機等任何關於人工智慧 的科技應用都甚感興趣,對於國防軍事工業而言亦是如此,而其中一個用以獲取 外在環境訊息的關鍵科技即光學雷達(light detection and ranging, Lidar)。由於 光學雷達具有極高解析度,能夠偵測相當微弱的光源,所以除了能夠用在自駕 車中的行人與障礙物偵測[1],也能用在軍事國防領域中的地形探測[2][3]、衛星 雷射測距[4][5] 與自然環境參數測量[6]等需要高解析度成像的場合。雖然雷達 (radio detection and ranging, Radar)也是使用電磁波測距離,但由於光學雷達是 使用極短的脈衝波,所以其解析度比使用無線電波的雷達更高出許多。因此,作 為光學雷達之光感測器的雪崩光電二極體(avalanche photodiode, APD)就格外 受重視[7]。而除了光學雷達會使用到雪崩光電二極體以外,舉凡像是量子密碼學 (quantum cryptography)[8]、時間解析光譜儀(time-resolved spectroscopy)[9]等 領域也都會用到雪崩光電二極體。

1.2 研究動機

由於市場對於解析度要求越來越高,而光偵測器的核心概念就是藉由照光前 後之劇烈電流變化,以作為測光判准。因此,倘若尚未照光時之暗電流太大,那 麼就會降低該光偵測器的解析度。換言之,雪崩光電二極體的暗電流成因始終是 人們所感興趣的議題。本論文的研究重點即為 SAGCM 分離式結構 (Separatedabsorption-grading-charge-multiplication, SAGCM)的 InP/InGaAsP/In_{0.53}Ga_{0.47}As 李 崩光電二極體之暗電流成因。而在諸多暗電流成因中,最重要的不外乎是缺陷輔 助穿隧電流 (trap-assisted tunneling, TAT)、能帶穿隧電流 (band-to-band tunneling) 與崩潰電流 (avalanche generation)。然而,常見的雪崩光電二極體 Hurkx TAT 電 流模型含有物理意義不明的等效穿隧質量參數 [10]。而即便了解其意義,目前也 缺乏將實驗數據對此模型擬合的方法,畢竟其中還涉及與製程環境密切相關的 SRH 生命期 (lifetime)參數,所以並不容易用此模型解釋元件電流成因。此外, 常見的吸收層臨界電場是基於缺乏電荷層之 SAM 分離式結構所計算得來的 [11], 而這並不見得適用於我們採用的 SAGCM 結構。

最後,雖然平面結構之 SAGCM-APD 有著護環(guard ring)設計,而能使元件於中央區崩潰以放大光訊號,但是護環設計相當困難,且現有文獻大多沒有提及更多關於護環設計細節。

1.3 研究目的

我希望能確認,在Hurkx 缺陷輔助穿隧效應模型中,穿隧等效質量之物理意 義,提出用以找出 Hurkx 模型參數之擬合公式,並針對 SAGCM 結構之雪崩光電 二極體提出能夠將能帶穿隧電流壓抑地足夠低的設計方法與結構參數。最後再藉 我們設計的各種擴散輪廓、光罩圖樣元件,進行電性分析並試著統整歸納出最佳 護環設計條件。

1.4 研究方法

由於 TAT 電流與製程條件有關,所以沒辦法事先模擬並找出正確參數。因 此,為了設計暗電流足夠小的元件,本研究將先以能相對較確定的能帶穿隧效 應出發。首先藉現有實驗數據 [11] 找到較可靠的能帶穿隧模型參數,接著使用 Sentaurus TCAD 模擬元件電性,以尋找最佳設計參數。再按照 Hurkx 模型的發展 脈絡 [10],從等效質量近似(Effective-mass approximation)理論出發,探求其穿 隧質量之物理意義。並且將 Hurkx 提出的電流模型,改寫為適合我們用來擬合的 數學形式,並代入上述推得的等效質量,由最小平方法擬合我們元件的I-V 實驗 數據,求得最佳擬合的缺陷能井(trap level)與SRH 生命期參數。最後,我們也 設計了幾種不同的護環結構,希望藉由擊穿電壓與崩潰電壓對護環構造之變化, 尋找最有效的護環結構。

1.5 論文架構

第一章概述了研究動機與目的,第二章將說明 APD 的結構發展脈絡、暗電流成因討論與名詞解釋。第三章將詳細說明於 Sentaurus TCAD 半導體元件工藝模擬軟體中,與 APD 電性密切相關的物理模型、設定參數、相關模擬實驗以及改善模擬收斂性的方法。第四章則說明元件設計與尋找最佳結構的方法。第五章則是樣品量測分析,包含樣品結構、I-V 電性分析等。

1.6 名詞解釋

- 1. 主動區:Active region,即外加偏壓控制的元件中央區。
- 2. 護環:Guard ring,用以抑制邊緣崩潰之擴散結構。
- 3. 懸護環: Floating guard ring,與主動區沒有接觸的護環。
- 4. 側護環: Attached guard ring, 與主動區互相接觸的護環。
- 5. 陡接面: Abrupt junction, 在本論文中是指如 P^+ -N 之二極體接面。
- 6. 禁帶: Forbidden region,指半導體能帶圖中,位於價帶與傳導帶之間的區域。
- 7. 能井:Trap level,是指摻質(impurity)在禁帶中產生的能階。
- 8. 缺陷輔助穿隧: Trap-assisted tunneling, 在本論文中是指 Hurkx 提出的 Trapassisted tunneling 模型 [10]。
- 9. 能帶穿隧:Band-to-band tunneling,與缺陷輔助穿隧並不同。能帶穿隧是直接由價帶穿隧至傳導帶,中間並沒有經過缺陷能井(trap level)的協助。

- 10. 刀差排:edge dislocation。若有個晶面並非延伸整個晶體,而是終止於某條線上,那麼這種不規則排列即被稱為刀差排。
- 原初生命期:即在常温 300 K,半導體內部沒有電場時的 SRH 生以區別受電場影響所變化之 SRH 生命期,即下式中的 Tp0、Tn0。

$$R_{\rm SRH} = \frac{np - n_i^2}{\frac{\tau_{p0}}{1 + \Gamma_p}(n + n_1) + \frac{\tau_{n0}}{1 + \Gamma_n}(p + p_1)}$$
(1.1)

12. 加速度等效質量:acceleration effective-mass,用以區分其他的等效質量定 義 [12]。具體而言,對於受到外力 $\mathbf{F} \equiv \hbar \mathbf{k}$ 之電子波包(wave packet) [13], 其加速度之第 i 個分量為

$$a_{i} = \frac{dv_{i}}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_{i}} \right) = \sum_{j} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^{2} \varepsilon}{\partial k_{i} \partial k_{j}} \dot{k}_{j} = \sum_{j} \frac{1}{\hbar^{2}} \frac{\partial^{2} \varepsilon}{\partial k_{i} \partial k_{j}} F_{j}$$
(1.2)

其中,加速度等效質量之反矩陣元素 (m⁻¹)_{ij} 為

$$\left(\frac{1}{m}\right)_{ij} \equiv \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k_i \partial k_j} \tag{1.3}$$

由於 (m⁻¹)_{ij} 是來自外力與加速度之比例關系,所以稱之為加速度等效質量。



Chapter 2

文獻回顧

2.1 元件結構

2.1.1 磊晶結構

在各種光波波長中,由於1550 nm 波長對人眼較為安全(retina-safe)[14][15], 以及在光纖通訊時,相較於因 Al_xGa_{1-x}As 雷射而使用的 800-900 nm 波長,1550 nm 光訊號更不易在光纖中衰退[16],所以大多數光偵測器都偏好使用能吸收 1550 nm 波長的 In_{0.53}Ga_{0.47}As 作為吸光物質。為了偵測到極微弱的光源,甚至是 偵測到單顆光子,我們需要藉由載子的撞擊游離現象(impact ionization)產生雪 崩效應(avalanche breakdown)以放大極微弱入射光產生之極微弱光電流。因此, In_{0.53}Ga_{0.47}As 需要有足夠強的電場,如此載子才能快速地由電場獲得足夠能量以 撞擊游離出新的電子電洞對[17],這種奠基於晶格動量守恆與能量守恆所計算得 到的成功撞擊游離前之載子能量即被稱為閾值能量(threshold energy)[17][18]。

然而,因為訊號強度與元件之光電流與暗電流的電流差值正相關[19],因 此假如 In_{0.53}Ga_{0.47}As 電場太大,那麼很可能會因能帶穿隧效應而產生顯著暗電 流[20][11],從而降低訊號辨識度。因此,為了在保有 In_{0.53}Ga_{0.47}As 足夠低電場的 同時,仍能產生顯著撞擊游離效應,人們陸續提出將負責藉由撞擊游離效應以放 大微弱光電流的倍增區與負責吸收 1550 nm 光波的吸收區分離的結構,稱為 SAM 分離式雪崩光電二極體 (Separated-absorption-multiplication avalanche photodiode, SAM-APD)[19][21][22][23],如圖 (2.1a)。基本上人們仍採用 In_{0.53}Ga_{0.47}As 作 為吸收層,但是將發生雪崩效應的區域改為在與 $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ 晶格匹配 (latticematched)的 InP上,並在這兩層中間夾帶一具有高摻質濃度的電荷層 (charge layer)以將吸收層的高電場降得足夠低,以減少其能帶穿隧效應,因此又有人 將此結構稱之為 InP/InGaAs SACM-APD。由於 InP 能隙較大,所以其穿隧效應 相對雪崩效應較為不顯著,如此一來就能解決暗電流太大的問題。不過由於 InP 與 $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ 之價帶並不連續,所以電洞會累積在 $InP/In_{0.53}Ga_{0.47}As$ 的異質 接面上 [24],反而減少了元件頻寬。因此,為了減緩限制了元件頻寬的電洞積 累現象,Forrest [24]、Matsushima [25][26]、Yasuda [27] 與 Campbell [28] 等人提出 了在 InP 與 $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ 之間夾帶一層漸變層 (grading layer)的想法,基本上 這層漸變層是由 $In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}$ 化合物半導體組成,其能隙介於 InP 的寬能隙 與 $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ 的窄能隙之間,而這種結構就被進一步稱為 InP/InGaAsP/InGaAs SAGCM-APD,如圖 (2.1b)。現今的 1550 nm 雪崩光電二極體結構大多是以 InP/InGaAsP/InGaAs SAGCM-APD 為雛形去進一步改良而成的。



(b) SAGCM 磊晶結構

Figure 2.1: 磊晶結構示意圖

2.1.2 平面結構

除了內部磊晶結構,APD 又可根據其外形分為塔台(mesa)與平面(planar) 兩種結構,如下圖(2.2)所示。根據[29],塔台結構非常不適合用在實際元件操 作上,具體原因為塔台結構在 PN 接面周圍有顯著漏電流,而且可靠度較低[30],



Figure 2.2: 塔台結構與平面結構示意圖

2.1.3 護環結構

Chynoweth 等人 [31] 於 1956 年發現, PN 矽二極體在高逆偏時所發生的雪崩 效應,並非均勻地發生在 PN 接面上,反而是發生在許多個微小的亮點上,此現 象在當時被稱為微電漿現象 (microplasma)。而之所以會有亮點,是因為該元件 有顯著的輻射復合效應 (radiative recombination effect)。在 1958 年, Chynoweth 與 Pearson [32] 解釋了上述這些崩潰亮點通常發生在刃差排 (edge dislocation) 上,並且發現到,即便 PN 接面處並沒有任何的差排,那麼崩潰效應也不會發 生在均勻接面上,而是會發生在接面的邊緣。而只有當 PN 接面不僅沒有刃差 排,也沒有邊緣區時,元件才會均勻地在 PN 接面處發生崩潰。隨後,Bartdorf 與 Chynoweth [33] 於 1960 年利用低摻雜區作出了具有護環 (Guard ring) 的二極體結 構,以去除邊緣崩潰現象,如圖 (2.3)所示,其中的 π 區域即為低摻雜區。



Figure 2.3: Bartdorf 與 Chynoweth 設計的護環結構 [33]

對於雪崩光電二極體而言,之所以希望崩潰效應發生在中央區,是由於邊緣 崩潰會使元件在提高偏壓時,光電流增益最多不超過6,使得雪崩光電二極體沒 辦法顯著放大光電流 [30]。因此倘若要使雪崩光電二極體發揮其放大光訊號的功 能,那麼就一定得設計護環以降低邊緣區電場。一個理想的情況是,邊緣崩潰電 壓比中央崩潰電壓還要高,如此一來我們就不需擔心邊緣崩潰,也就不需要設計 護環。

然而在 1965 年,Gibbons 與 Kocsis [34] 即提到平面結構崩潰電壓往往都比塔 台結構來得小,其中一個可能就是平面結構的邊緣崩潰電壓比中央崩潰電壓來得 小,而塔台結構之崩潰電壓即平面結構之中央區崩潰電壓,所以平面結構在中央 區發生崩潰之前,其邊緣區就已經先崩潰了。對此,Armstrong、Gibbons、Kocsis 與 Sze 等人也陸續討論了邊緣擴散輪廓的曲率半徑與掺質濃度對崩潰電壓的影 響 [34][35][36]。他們假設擴散輪廓為理想的平面—圓弧形,如圖 (2.4)所示。並 假設在陡接面 (abrupt junction)情形下,求出偏壓對中央與邊緣電場的分佈,再 求出崩潰電壓隨擴散深度(邊緣區之圓弧半徑)或摻雜濃度的關係,最後得到了 與實驗一致的結果。Leistiko [37] 進一步設計了兩種特殊結構用以研究曲率半徑對 崩潰電壓的影響,如圖 (2.5)所示。用以探討中央區擴散深度不同,但邊緣曲率 半徑相同的情況下,崩潰電壓是否會有所不同,實驗結果顯示確實是邊緣曲率半 徑決定了崩潰電壓。



HIGH RESISTIVITY SUBSTRATE (P.)

Figure 2.4: 平面-圓弧形擴散輪廓示意圖 [34]

上述諸多分析讓我們確定邊緣崩潰的存在,因此倘若要使 APD 元件正常運作,那麼就一定得設計護環以改變邊緣區電場分佈,降低邊緣區電場,提高增



Figure 2.5: 用以研究邊緣曲率半徑對崩潰電壓之影響所設計的特殊結構 [37]

益。對此,Donnelly 於 1979 年設計了特殊 $p^+ - n - n^-$ 接面的護環結構以提升元 件增益 [38],Ando 於 1981 年提出應該設計護環已抑制使得增益只有 5.5 的邊緣崩 潰 [30],Shirai 於 1982 年藉由線性漸變 PN 接面護環 (linearly-graded junction)與 電荷層結構,將元件增益提升到 20 [39]。Liu 與 Forrest [40][41] 提出了雙懸護環 結構 (double floating guard ring),如圖 (2.6)所示。他們發現到沒有護環的元件 在崩潰時,電流爬升得比較緩 (soft breakdown),由此可見護環的功用 [40]。此外 他們在 [41] 進一步說明了護環原理,他們認為因為護環能夠擴展空乏區,所以才 使得等電位線變得更稀疏,邊緣電場更小。然而,即便設計了兩個懸護環,其邊 緣電場 E_2 似乎也沒有比中央電場 E_m 來得小,詳見 [41] 中之圖十,因此護環設計 仍不明確。綜上所述,無論如何,護環結構都是使平面結構之雪崩光電二極體正 常運作的關鍵,所以本研究也設計了幾種護環結構加以分析,將在第4、5章進一 步說明之。



Figure 2.6: 雙懸護環結構示意圖 [41]

2.2 暗電流成因

對於當前主流雪崩光電二極體的 SAGCM 分離式結構而言, 能帶穿隧電流 (band-to-band tunneling)已不再是最重要的因素,反而是先前被忽略的熱效應開 始扮演起關鍵角色 [42]。因此為了持續降低暗電流,我們需要進一步研究熱效應 產生的電流來源。雖然 Shockley [43] 等人早在 1952 年就提出電子經由缺陷能井 從價帶跳躍至傳導帶的 SRH 復合效應 (SRH recombination),但基於崩潰需求, InP 需要處在強電場中,並且 In_{0.53}Ga_{0.47}As 能隙 (band gap)並不大,因此並不 能排除電子在從缺陷能井跳躍至傳導帶的過程中,直接向旁邊穿隧至傳導帶的 可能性 [44],即所謂的缺陷輔助穿隧效應 (Trap-assisted tunneling, TAT)。因此, Hurkx [10] 在 1989 年提出了基於 SRH 復合效應且便於數值模擬的 TAT 模型, 說 明電場造成的缺陷輔助穿隧效應相當於縮短了 SRH 復合生命期 (field-enhanced SRH lifetime),即增強了 SRH 復合效應。

然而,Hurkx 沒有在文中完整交待其模型的推導過程,並提及他並不清楚此 穿隧質量應該帶多少的值,只知道 0.2 似乎是最佳選擇 [10],這使得人們對於其模 型該採用多少的穿隧質量似乎沒有共識。就我目前所知,只有在 X. Ji [45] 提及他 對 In_{0.78}Ga_{0.22}As 採用了 0.03 的等效質量以代入 Hurkx TAT 模型,至於 InP 則沒有 找到相關文獻。我將在第3.3節推導其理論,以確定其等效穿隧質量之物理意義。

除了等效穿隧質量以外,材料的缺陷能井(trap level)與生命期也是 Hurkx TAT 模型中的必要參數,但目前關於從元件 I-V 電性推算缺陷能井的方法似乎仍 僅能在假設沒有 TAT 效應的前提下,將暗電流對溫度倒數作圖並求其斜率,藉此 得到缺陷能井 [46],隨後再將其代入含有 TAT 效應的模型中,而這顯然是不一致 的做法,甚至此斜率可能也是元件偏壓的函數,從而無法決定究竟該使用哪個偏 壓下的擬合斜率。又因為 SRH 生命期相當難以測量,比較可靠的方法是使用數 值模擬的方式 [47],再加上 SRH 生命期跟該製程造成的缺陷濃度密切相關,所以 SRH 生命期的選擇也造成了使用 Hurkx TAT 模型的困難。事實上,Hurkx [48] 在 1992 年就有整理出適合用於擬合並求出缺陷能井與 SRH 生命期的公式雛型,只 不過似乎從來沒有被人拿來改寫並使用。對此,我會在樣品分析之第5.3.1節推導 其擬合公式並討論之。

最後,雖然當前採用之 SAGCM 分離式結構之能帶穿隧效應較小,但若需

要有著足夠小的暗電流,那麼仍需要針對選定的其他磊晶層之厚度與濃度,設 計合適的電荷層濃度,以將吸收層電場降得足夠低,使能帶穿隧電流足夠小。 許多文獻 [16] 採用的吸收層 200 kV/cm 臨界電場是基於 Ando [11] 於 1980 年的 分析。Ando 先設計了多種 N 型摻質濃度的 In_{0.53}Ga_{0.47}As 的 P⁺-N 二極體,並藉 能帶穿隧模型公式驗證 In_{0.53}Ga_{0.47}As 之暗電流來自能帶穿隧效應。接著再設計 InP/In_{0.53}Ga_{0.47}As SAM-APD,並指出因為 InP 崩潰所需電場都相同,所以 InP 無 可避免地造成了幾乎不隨 In_{0.53}Ga_{0.47}As 中之 N 型摻質濃度變化的能帶穿隧電 流,因此倘若要使 InP/In_{0.53}Ga_{0.47}As SAM 結構有最小的暗電流,那麼就必須讓 In_{0.53}Ga_{0.47}As 有著比 InP 還要小的能帶穿隧電流,藉此發現只有在 In_{0.53}Ga_{0.47}As 電場小於 200 kV/cm 時才會滿足此條件。然而,由於我們採用的 SAGCM 結構裡 比 SAM 結構多了一層電荷層 (charge layer),所以 Ando 提出的 200 kV/cm 最大吸 收層電場並不見得適用我們的 SAGCM 結構,我將在元件模擬之第3.2節說明針對 SAGCM 結構的能帶穿隧電流分析。





Chapter 3

元件模擬

我們使用的模擬軟體為由國家半導體研究中心(Taiwan Semiconductor Research Institute, TSRI) 贊助的 Synopsys Sentaurus 半導體工藝與元件模擬軟 體(Technology Computer Aided Design, TCAD)。本章將介紹對於雪崩光電二極 體而言最為重要的電性模型之理論與參數,包含了鋅擴散、能帶穿隧效應、缺陷 輔助穿隧效應與游離撞擊效應。

3.1 鋅擴散模型

常見擴散現象學模型(phenomenological model)為菲克定律(Fick's law)。根 據質量守恆定律,倘若沒有任何化學反應,那麼下式恆成立:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot J = 0 \tag{3.1}$$

其中,C為物質濃度(cm^{-3}),J為擴散通量(diffusion flux),為單位面積的擴散 速率,單位為(cm^{-3}/s)/ cm^{2} ,可使用菲克第一定律描述之:

$$J = -D\nabla C \tag{3.2}$$

其中, D 為擴散率 (diffusivity), 單位為 cm²/s。因此我們可將方程式 (3.2) 代入 方程式 (3.1) 中,即可得到廣義的——擴散率並非定值的——菲克第二定律: $\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot (D\nabla C)$ (3.3)

根據對現有磊晶廠的認識,原則上是以擴散的方式於 InP 中掺雜鋅(Zn) 原子。目前已有不少文獻探討鋅在 InP 中的擴散機制 [49] 及其 SIMS 量測結 果 [50][51]。根據 [49],由於鋅擴散屬於所謂的為間隙一空位缺陷(interstitialsubstitutional)機制,使其擴散率與載子濃度有關,因此,TCAD 中代表常數擴散 率的常數模型(constant model) [52] 即不適用,於是我們選擇了考慮擴散率與載 子濃度關係的費米模型(Fermi model) [51][52]。由於摻質 A 可能有著不同的價 電子數 c 的點缺陷活化態(active state),而每種點缺陷活化態又都對擴散速率 $\partial C_A/\partial t$ 都有所貢獻,因此,倘若該價電子數 z 之摻質 A 是以點缺陷 X (空位缺 陷或間隙缺陷)之型態嵌入該半導體晶格中,並且當此點缺陷被活化(active)時 帶有價電子數 c,那麼代表菲克第二定律的方程式(3.3) 即改寫為:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\sum_{X,c} D_{AX^c} \nabla C_A^z \right)$$
(3.4)

其中 D_{AX^c} 為此摻質 A 在該半導體中的等效擴散常數, C_A^z 為價電子數 z 之摻質 A 對擴散貢獻的等效濃度, 兩者依序為:

$$D_{AX^c} \equiv D_{AX^c}^0 \exp\left(-\frac{D_{AX^c}^E}{kT}\right) \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-c-z}$$
(3.5)

$$C_A^z \equiv C_A^+ \left(\frac{n}{n_i}\right)^z \tag{3.6}$$

其中,n為半導體中之電子濃度, n_i 為半導體本質濃度(intrinsic concentration), $D_{AX^c}^0$ 與 $D_{AX^c}^E$ 為等效擴散率 D_{AX^c} 對溫度T的阿瑞尼士模型參數。將方程式 (3.5)與(3.6)代入(3.4)後,即可得到TCAD中的費米模型數學形式:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = \nabla \cdot \left\{ \sum_{X,c} D^0_{AX^c} \exp\left(-\frac{D^E_{AX^c}}{kT}\right) \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-c-z} \nabla \left[C^+_A \left(\frac{n}{n_i}\right)^z\right] \right\}$$
(3.7)



其中, $C_{A,0}^{SS}$ 與 E_A 則為固體溶解度 C_A^{SS} 對溫度T之阿瑞尼士模型參數。上述提及之模型參數均列於表(3.1),其模擬結果與SIMS數據之比較如圖(3.1)所示 [51]。

Table 3.1: 費米擴散模型參數

	參數	參考文獻
z	2	
С	1	[51]
$C_{A,0}^{SS}({ m cm}^{-3})$	1.4×10^{25}	[50]
$E_A(\mathbf{eV})$	0.92	[50]
$D^0_{AX^c}(\mathrm{cm}^2/\mathrm{s})$	10^{-3}	[51]
$D^E_{AX^c}(\mathrm{eV})$	1.75	[51]



Figure 3.1: 鋅擴散之 SIMS 數據與 TCAD 模擬結果之比較

3.2 能帶穿隧模型

在 SAM-APD 中,能帶穿隧 (band-to-band tunneling) 被視為暗電流主要來 源 [20][53],因此許多學者提出足以抑制能帶穿隧電流的 APD 結構 [11][42][54][55][56], 其關鍵在於降低吸收層電場。根據 [57],倘若空乏區電場不隨位置變化,那麼陡 接面二極體之能帶穿隧電流密度 J 與元件偏壓 V 就有著如下簡單的關係:

$$J = cqVE_m \exp\left(-\frac{B'}{E_m}\right) \tag{3.9}$$

其中, q為基本電量, E_m 為空乏區內之最大電場, $c \cdot B'$ 為與能隙 $\varepsilon_g \cdot 穿隧質量 m* 有關的常數。此方程式的好處在於能夠藉由作 <math>\log(J/V) - 1/E_m$ 圖,由斜率與 截距求出係數 c 與 B',驗證此電流為能帶穿隧電流 [58]。然而,因為 TCAD 是依 據連續方程式模擬載子電流,

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \nabla \cdot \vec{J_n} + G_{\text{net,n}}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \nabla \cdot \vec{J_p} + G_{\text{net,p}}$$
(3.10)

所以能帶穿隧效應僅能以載子再生速率(generation rate)的形式代入模擬 [59], 單位為 $cm^{-3}s^{-1}$ 。在 Sentaurus TCAD 中, 此模型名為 Simple model:

$$G = AE^P \exp\left(-\frac{B}{E}\right) \tag{3.11}$$

因此,即便是陡接面結構,也無法將方程式(3.9)直接運用在數值模擬中。接下 來我將推導方程式(3.11),再求出能夠用以擬合A、B與P的方程式(3.9)。

3.2.1 理論

由於電場具有方向性,所以我們能夠將電子能量依照晶格動量 k 平行與垂直 穿隧的分量區分為 $\varepsilon_{\perp} \equiv \hbar^2 k_{\perp}^2 / 2m^* \cdot \varepsilon_{\parallel} \equiv \hbar^2 k_{\parallel}^2 / 2m^*$,

$$\varepsilon = \varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp} = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m^*}$$
(3.12)

其中, ε 為能帶能量, m^* 為諸多等效質量中的加速度等效質量(acceleration effective mass) [12]。加速度等效質量之定義為,對於受到外力 $\mathbf{F} = \hbar \mathbf{k}$ 之電子波包(wave packet) [13],其加速度之第i個分量為

$$a_{i} = \frac{dv_{i}}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_{i}} \right) = \sum_{j} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^{2} \varepsilon}{\partial k_{i} \partial k_{j}} \dot{k}_{j} = \sum_{j} \frac{1}{\hbar^{2}} \frac{\partial^{2} \varepsilon}{\partial k_{i} \partial k_{j}} F_{j}$$
(3.13)

其中,加速度等效質量之反矩陣元素 (m⁻¹)_{ii} 為

$$\left(\frac{1}{m}\right)_{ij} \equiv \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k_i \partial k_j} \tag{3.14}$$

在此我們進一步假設電子能量離傳導帶最低點 ε_c 並不遠,因此球狀拋物之能帶關係 (spherical and parabolic band) 成立,此即為方程式 (3.12) 之基礎:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) \approx \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$
 (3.15)

為了僅考慮外加電場對禁帶(forbidden region)造成的穿隧機率,可藉等效質量近似(Effective-mass approximation)將薛丁格方程式改寫為

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\phi}{dx^2} + U(x)\phi(x) = \varepsilon_{\parallel}\phi(x)$$
(3.16)

其中, $\phi(x)$ 為將波函數 $\psi(x)$ 以瓦尼爾函數(Wannier function)基底展開之係數, 詳見第3.3.1節。因此,當電場足夠大時,大量的價帶電子就能跨越禁帶中的能障, 直接穿隧至傳導帶中,其穿隧機率 P 可用 WKB 近似寫為 [60]:

$$P \equiv \left|\frac{\phi(x_2)}{\phi(x_1)}\right|^2 \approx \exp\left[-2\int_{x_1}^{x_2} \left|\sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2}\left(\varepsilon_{\parallel} - U\right)}\right| dx\right]$$
(3.17)

其中, x_1 與 x_2 為禁帶之外的穿隧起終點。雖然禁帶中的能障形式 $\varepsilon - U$ 並不清楚,但 J.L.Moll 基於 E.O.Kane 對 InSb 的研究 [60][61],推測禁帶能障應為如圖

(3.2)所示的下式:

$$\varepsilon - U = (\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp}) - U$$
$$= -\frac{(\varepsilon_g/2)^2 - \varepsilon_c^2}{\varepsilon_g}$$



其中 ε_g 為半導體能隙(band gap), ε_c 為 PN 接面之傳導帶能量,即 $\varepsilon_c = qEx$, E 為電場強度。因此,禁帶起終點為 $\varepsilon(x_{1,2}) - U = 0$ 的位置,

$$x_{1,2} = \pm \frac{1}{qE} \left[\left(\frac{\varepsilon_g}{2} \right)^2 + \varepsilon_g \varepsilon_\perp \right]^{1/2}$$
(3.19)

因此,穿隧機率 P 可進一步改寫為:

$$P \approx \exp\left\{-2\int_{x_1}^{x_2} \left| \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} \left[\frac{(\varepsilon_g/2)^2 - (qEx)^2}{\varepsilon_g} + \varepsilon_\perp \right]} \right| dx \right\}$$

$$= \exp\left(-\frac{\pi m^{*1/2} \varepsilon_g^{3/2}}{2\sqrt{2}q\hbar E}\right) \exp\left(-\frac{\varepsilon_\perp}{\bar{\varepsilon}}\right) \quad ; \quad \bar{\varepsilon} \equiv \frac{\sqrt{2}q\hbar E}{2\pi m^{*1/2} \varepsilon_g^{1/2}}$$
(3.20)



Figure 3.2: 能帶穿隧之能障模型。紅線為 $U - \varepsilon_{\parallel}$,即位於能帶邊緣(band edge) 之電子感受到的能障;緣線則為能帶 ε 。在 $\varepsilon_{\perp} = 0$ 時,能帶邊緣 x_1 、 x_2 即為古典物理下的轉折點(classical turning point),兩者間隔為 $|x_1 - x_2| = \varepsilon_g/qE$ 。然而倘若 $\varepsilon_{\perp} > 0$,那麼電子在走到能帶邊緣之前, 就會先在 x'_1 轉折。

接著考慮其穿隧通量(tunneling flux),即每秒每單位體積中有多少電量撞擊 於穿隧起點 x_1 試圖穿越該能障至傳導帶 x_2 ,單位為 C/(cm³·s)。考慮圖(3.3)之 布里淵區(Brillouin zone),對於垂直動量介於 \mathbf{k}_{\perp} 與 $\mathbf{k}_{\perp} + d\mathbf{k}_{\perp}$,且 $\dot{k}_{\parallel} = qE/\hbar$ 的


Figure 3.3: 簡單立方晶格的布里淵區示意圖 [62],圓形為基於球狀能帶 (spherical band) 假設所繪製之等能量線,箭頭為穿隧方向。其中 $k_x = 0$ 為與 k_y 獨立之轉折點 (turning point),最大位能發生在 |k| = 0。

電子,可得到其穿隧通量為:

$$\begin{aligned} \operatorname{Flux} \Big|_{\mathbf{k}_{\perp}}^{\mathbf{k}_{\perp}+d\mathbf{k}_{\perp}} &\equiv \lim_{\Delta t \to 0} q \frac{1}{\Delta t} \left[2 \times \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_{\perp}}^{\mathbf{k}_{\perp}+d\mathbf{k}_{\perp}} (1) \times f_{v}(\varepsilon) \right] = 2 \times q \lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t} \sum_{\mathbf{k}_{\perp}}^{\mathbf{k}_{\perp}+d\mathbf{k}_{\perp}} \frac{\Delta \mathbf{k}}{(2\pi)^{3}} \times f_{v}(\varepsilon) \\ &= \frac{2q}{(2\pi)^{3}} \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\Delta k_{\parallel}}{\Delta t} \sum_{\mathbf{k}_{\perp}}^{\mathbf{k}_{\perp}+d\mathbf{k}_{\perp}} \Delta \mathbf{k}_{\perp} \times f_{v}(\varepsilon) = \frac{q^{2}E}{4\pi^{3}\hbar} 2\pi k_{\perp} dk_{\perp} f_{v}(\varepsilon) \end{aligned}$$
(3.21)

其中, $f_v(\varepsilon)$ 為價帶之費米—狄拉克分佈函數 (Fermi-Dirac distribution),表示在該 能階上存在著電子之機率。再藉由 $\varepsilon_{\perp} = \hbar^2 k_{\perp}^2 / 2m^*$,可以得到對於垂直能量處在 $\varepsilon_{\perp} 與 \varepsilon_{\perp} + d\varepsilon_{\perp}$ 之電子,每單位半導體體積之穿隧通量為:

$$F_{\text{incident}} = \frac{q^2 E m^* f(\varepsilon)}{2\pi^2 \hbar^3} d\varepsilon_{\perp}$$
(3.22)

接著考慮半導體截面積為 A 且傳導帶能量為 ε 之對應能階恰好未佔據電子之機率 為 $1 - f_c(\varepsilon)$,可以得到,由價帶穿隧至傳導帶的穿隧電流即為:

 $\operatorname{Current}_{v}^{c} = \operatorname{Incident} \operatorname{flux} \times \operatorname{tunneling} \operatorname{probability} \times \operatorname{unoccupied} \operatorname{probability} \times \operatorname{volume}$

$$=\frac{q^2 E m^* f_v(\varepsilon)}{2\pi^2 \hbar^3} d\varepsilon_{\perp} \times \exp\left(-\frac{\pi m^{*1/2} \varepsilon_g^{3/2}}{2\sqrt{2}q E \hbar}\right) \exp\left(-\frac{\varepsilon_{\perp}}{\bar{\varepsilon}}\right) \times [1 - f_c(\varepsilon)] \times A dx$$
(3.23)

以相同方法可得到對於垂直能量介於 ε_{\perp} 與 $\varepsilon_{\perp} + d\varepsilon_{\perp}$ 之電子,從傳導帶穿隧至價

带之能带穿隧電流密度為:

$$dJ_{\rm BTB} = \frac{q^2 E m^*}{2\pi^2 \hbar^3} \exp\left(-\frac{\pi m^{*1/2} \varepsilon_g^{3/2}}{2\sqrt{2}q\hbar E}\right) \exp\left(-\frac{\varepsilon_\perp}{\bar{\varepsilon}}\right) \left[f_v(\varepsilon) - f_c(\varepsilon)\right] d\varepsilon_\perp dx \quad (3.24)$$

由於能帶穿隧之等效載子再生速率可定義為:

$$G_{\rm BTB} \equiv \frac{1}{q} \frac{dJ_{\rm BTB}}{dx} \tag{3.25}$$

所以在 $f_v(\varepsilon) \approx 1$ 、 $f_c(\varepsilon) \approx 0$ 之近似下,可以得到:

$$G_{\rm BTB}(x) = \frac{qm^*}{2\pi^2\hbar^3} E \exp\left(-\frac{\pi m^{*1/2}\varepsilon_g^{3/2}}{2\sqrt{2}q\hbar E}\right) \bar{\varepsilon} \int_0^{\varepsilon,\varepsilon_v-\varepsilon} \exp\left(-\frac{\varepsilon_\perp}{\bar{\varepsilon}}\right) d\left(\frac{\varepsilon_\perp}{\bar{\varepsilon}}\right)$$
(3.26)

上式之積分上限 $(\varepsilon, \varepsilon_v - \varepsilon)$ 取決於位置 x 上的穿隧能量 ε , 若 $\varepsilon < \varepsilon_v/2$, 則為前者, 反之則後者 [62]。由於通常 $\varepsilon \ll \varepsilon$, 所以該積分項可近似為 1。整理後可得:

$$G_{\rm BTB} = \left(\frac{2m^*}{\varepsilon_g}\right)^{1/2} \frac{q^2}{(2\pi)^3 \hbar^2} E^2 \exp\left[-\frac{\pi (2m^* \varepsilon_g^3)^{1/2} / 4q\hbar}{E}\right]$$
(3.27)

與 TCAD 模型方程式(3.11)相比較可以得到:

$$A = \left(\frac{2m^*}{\varepsilon_g}\right)^{1/2} \frac{q^2}{(2\pi)^3\hbar^2} \quad ; \quad P = 2 \quad ; \quad B = \frac{\pi(2m^*\varepsilon_g^3)^{1/2}}{4q\hbar} \tag{3.28}$$

由此可得各物質之理論參數,見表 (3.2)。其中 In_{0.6}Ga_{0.4}As_{0.598}P_{0.402} 之成分為使 能隙約略介於 InP 與 In_{0.53}Ga_{0.47}As 之間,對應波長為 1.1 μm 之其中一種成分。只 要能隙固定,那麼不論成分為何都不影響能帶穿隧模型參數。

Table 3.2: 能帶穿隧模型參數(Simple model)

	InP	$In_{0.53}Ga_{0.47}As$	$In_{0.6}Ga_{0.4}As_{0.598}P_{0.402}$
m^{*}/m_{0}	0.08 [63]	0.0463 [63]	0.052 [64]
$\varepsilon_g(\mathrm{eV})$	1.347 [65]	0.742 [64]	1.125 [66]
$A(cm^{-1}s^{-1}V^{-2})$	7.641×10^{19}	7.827×10^{19}	6.739×10^{19}
B(V/cm)	1.779×10^7	5.542×10^6	1.095×10^7
P	2	2	2

3.2.2 参數驗證

雖然已有表(3.2)中的能帶穿隧理論參數,但仍需驗證此參數是否正確, 因此我們可由載子再生速率以及連續方程式進一步推出電流密度對元件偏壓 的關係,依序如方程式(3.11)、(3.10)與(3.9)。由於我們目前僅討論穩態 (steady-state)情形,即載子濃度對時間之變化應為零,所以

$$\frac{\partial n}{\partial t} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial p}{\partial t} = 0 \tag{3.29}$$

此外假設元件物理量皆不隨 y、z座標變化,並且討論 $\vec{J_n}$ 與 $\vec{J_p}$ 皆相同,所以若我 們以電洞電流為例,其連續方程式(3.10)可進一步改寫為:

$$J_p(W) - J_p(0) = q \int_0^W G_{\text{net},p}(x) dx$$
 (3.30)

其中 W 為元件厚度。由於電子電洞流在兩電極上分別為主要電流,因此假設在 x = W時, $J_p(W) \gg J_n(W)$, $J_p(0) \ll J_n(0)$,並且 $J_p(x) + J_n(x) = J(x)$,J(x)處處相同,所以可將方程式(3.30)改寫為

$$J(x) \approx q \int_0^W G_{\text{net},p}(x') dx' \quad ; \quad 0 < x < W$$
 (3.31)

假設元件以能帶穿隧機制為主,即 $G_{\text{net,p}} \approx G_{\text{BTB}}$,因此可將上式進一步代入方程式 (3.11):

$$J(x) \approx q \int_0^W G_{\text{BTB}}(x) dx$$

= $q \int_0^W AE^P \exp\left(-\frac{B}{E}\right) dx$ (3.32)

由於方程式(3.32)難以積分,所以通常我們會將此積分式用 γW 等效元件厚度、 PN 接面最大電場 E_m 以及 $E_m W = 2V$ 關係寫為下式,此等效概念如圖(3.4)所示。

$$J(x) = qA\gamma WE_{\rm m}^{P} \exp\left(-\frac{B}{E_{\rm m}}\right) = 2qA\gamma VE_{\rm m}^{P-1} \exp\left(-\frac{B}{E_{\rm m}}\right)$$
(3.33)

將方程式(3.33)與方程式(3.9)比較後,可以得到



Figure 3.4: 能帶穿隧再生速率分佈示意圖。因為能帶穿隧速率(tunneling generation rate)對電場變化極大,所以能帶穿隧等效厚度 γW 通常遠小於實際厚度 W。

$$c = 2A\gamma \quad ; \quad P = 2 \quad ; \quad B = B' \tag{3.34}$$

因此倘若元件電流電壓符合方程式(3.9)之關係,那麼就可以由係數c、B'求得可用以代入 TCAD 中的能帶穿隧模型參數A、B與P。而驗證的方法即為將元件電流電壓作 $\log(J/V) - 1/E_m$ 之圖。具體來說,我們可以得到如下關係:

$$\ln (J/V) = -B'x - \ln(x) + \ln (cq) \quad ; \quad x \equiv E_m^{-1}$$

= $-Bx - (P-1)\ln(x) + \ln (2Aq\gamma)$ (3.35)

因此我們可藉上述方法分析 Ando 的 $In_{0.53}Ga_{0.47}As P^+-N$ 陡接面二極體 I-V 數 據 [11],如圖 (3.5)所示。在圖 (3.6)中,根據方程式 (3.35),我們預期各曲線 應有著相同的斜率 B = B'與截距 $ln(cq) = ln(2Aq\gamma)$,但實際狀況並非如此。根 據我們前述理論推導得到的表 (3.2),可以得到 $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ 的 $A \times B$ 與 P,因 此代入後可擬合得到 γ ,結果如表 (3.3)所示。圖 (3.5)中實心三角形為 Ando 論

Table 3.3: 能帶穿隧模型擬合參數	ίγ
-----------------------	----

N型掺質濃度	4×10^{15}	7×10^{15}	9×10^{15}	2×10^{16}	$\gamma_{\rm net}$
γ	4.06%	4.22%	4.29%	4.68%	7.95%

文中的數據,我們藉由 WebPlotDigitizer [67] 將其擷取出來,接著將這些數據繪製

成 $\log(J/V) - 1/E_m$ 關係,並作於圖(3.6)中。由於各濃度之 $\log(J/V) - 1/E_m$ 曲線並非理想直線,所以我們也將所有數據一起擬合方程式(3.33),得到表 (3.3)中之 $\gamma_{net} = 7.95\%$ 。最後再將此 γ_{net} 代入方程式(3.9)計算得到理想能帶穿 隧電流,如圖(3.5)中圓圈所示,同時也將由表(3.2)求得的參數 $A \cdot B \cdot P$ 代 入 TCAD 並模擬繪於圖(3.5)中實線。最後我們從圖(3.5)可知,顯然該元件



Figure 3.5: In_{0.53}Ga_{0.47}As P⁺N 陡接面二極體之 I-V 特性圖 [11],線上數字為 N 型 掺質濃度。



Figure 3.6: $In_{0.53}Ga_{0.47}$ As P⁺N 陡接面二極體之 $J/V - 1/E_m$ 關係

電流並非只有能帶穿隧電流,應該還有其他效應構成其暗電流,然而因為其模擬 I-V 趨勢與實驗值相去不遠,所以我相信上述能帶穿隧理論模型與其列於表(3.2) 中之參數應有其參考價值。

3.3 SRH 復合模型

半導體中常見的電流產生機制之一就是 SRH 復合機制 (SRH recombination), 價帶中的電子經由缺陷於禁帶中產生的能井 (trap level),向上躍升至傳導帶中。 或是電子由傳導帶釋放能量至缺陷能井中,並又再次回到傳導帶,這些都是可 能發生的隨機現象。一般來說,我們以 Shockley 於 1952 年提出的模型為模擬基 礎 [43][59],其方程式為如下:

$$R_{\rm SRH} = -G_{\rm SRH} = \frac{np - n_i^2}{\tau_p(n+n_1) + \tau_n(p+p_1)}$$
(3.36)

然而,上式並沒有考慮到電子在經由缺陷能井躍升至傳導帶的過程中,因 電場作用而直接穿隧至其他位置上之傳導帶的可能,如圖(3.7)所示。對此, 我們選用 TCAD 中的 Hurkx field-enhanced lifetime 模型模擬此缺陷輔助穿隧現象 (trap-assisted tunneling) [10][59]。



Figure 3.7: 缺陷輔助穿隧機制示意圖。電子由缺陷能井(P)上升至 P'後,隨即 穿隧至旁邊的 P"傳導帶能階上。

可能是因為 Hurkx 在論文中提及底下段落 [10],使得人們並不確定該使用什麼值作為其模型中的穿隧質量。

The exact value of m^* to be used is not clear and, moreover, depends on the crystal orientation. Theoretical treatments on Zener tunneling suggest a value between 0.1 and 0.3.

雖然有提到建議為 0.1 至 0.3,但他並沒有在文中詳細說明該分析過程。就目前 了解,除了 Hurkx 以外,至少還有兩位學者用不同的方法提出幾乎一樣的載子發 射率(emission rate,單位為 s⁻¹)。一是由 É. N. Korol'使用的格林函數法[68], 二是由 W.W. Anderson 提出的類似歐本海默法(Oppenheimer approach)的理論模 型[69]。由等效質量近似(Effective-mass approximation)出發的 Hurkx 與由格林 函數出發的 Korol',兩人由形式上看似不同的——由能井穿隧至傳導帶的——穿 隧機率,

$$e'_{n} = e_{n}^{\infty} \exp\left(-\frac{E_{i} - E}{kT}\right) \exp\left[-\frac{4}{3} \frac{(2m_{n}^{*})^{1/2} E^{3/2}}{q\hbar F}\right] [70]$$

$$e'_{n} = e_{n}^{\infty} \exp\left(-\frac{E - E_{t}}{kT}\right) \frac{Ai^{2}[\gamma(x - x_{E})]}{Ai^{2}(0)} [71]$$

給出了相同的載子發射率 [70][72]:

$$\frac{e_n}{e_{n0}} = 1 + \frac{E_c - E_t}{kT} \int_0^1 \exp\left(\frac{E_c - E_t}{kT}u - K_n u^{3/2}\right) du \quad ; \quad K_n \equiv \frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m_n^*(E_c - E_t)^3}}{q\hbar F}$$
(3.38)

其中, E_i 與 E_t 皆為能井位置 (trap level),但其能量參考點不同,詳見 [70] 之圖 一與 [71] 之圖二,此外 F 為電場強度, m^{*}_n 為電子加速度等效質量。然而,方程 式 (3.37) 則與 Anderson 結果有著係數的不同,詳見 [69] 中之方程式 (29)。就 我了解, Korol'推導時採用的近似方式與 Hurkx 截然不同,所以不同的推導方式, 即便有著相同的結果,可能伴隨著不同的有效性。

本文僅試圖由 Hurkx 角度探討其模型有效性與應用。因此我接下來會以 R.A. Smith 之解說為範本 [73],介紹 Hurkx 的等效質量理論基礎,推得其穿隧質量意義 即加速度等效質量的結論。接著再進一步試著推導 Hurkx 模型,了解 Hurkx 沒有 在相關文獻中提及的推導過程 [10][48][58][71],以了解其模型之有效性,分析可 能的誤差來源。

3.3.1 等效質量近似

在古典物理中,質量為 m_e 的自由電子(free electron)满足基本的牛頓力學,

$$m_e \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla V(\mathbf{r}) \tag{3.39}$$

而在量子力學中,則是可以直接將其改寫為薛丁格方程式,

$$\left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m_e}+V({\bf r})\right]\psi=E\psi$$



或是更廣義的哈密頓方程式(Hamiltonian equation),

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{r})\psi = H(-i\hbar\nabla, \mathbf{r})\psi = E\psi$$
(3.41)

倘若電子在具有週期性晶格位能 V_{lattice} 的半導體中,並且該半導體還被施加外界 電壓 V_{ext},那麼根據准古典近似(quasi-classical approximation) [74],粒子也能夠 有其對應的准古典方程式:

$$m^* \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -q\nabla V_{\text{ext}}$$
(3.42)

其中 q 為基本電量, m* 為電子之加速度等效質量, k 為已考慮週期位能 V_{lattice} 的 晶格動量 (crystal momentum)。然而由於此方程式必須用在電場足夠低的情況下 (小於 10⁵ V/cm), 即載子只會在單一能帶上運動的情況, 而沒辦法處理可能在能 帶之間穿隧的情況 [74][75], 所以我們需要有能夠簡化下列薛丁格方程式, 並且能 用以描述穿隧現象的方法。

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_e} + V_{\text{lattice}}(\mathbf{r}) + V_{\text{ext}}(\mathbf{r})\right] \psi = E\psi \qquad (3.43)$$

因此 Slater 於 1949 年提出了藉由將瓦尼爾函數(Wannier function)作為波函 數基底展開的方法 [76][73]。其結果可經推導寫為下式:

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r})\right] \phi = E\phi \qquad (3.44)$$

其中,週期性晶格位能 V_{lattice} 之效應已併入加速度等效質量 m*中,並且φ並不同 於波函數ψ,前者為後者之瓦尼爾函數基底之展開函數。由於此結果可將繁雜的 薛丁格方程式(3.43)簡化為僅需要外加電場與等效質量的形式,所以此方法名為 等效質量近似(Effecitve-mass approximation)。此近似是基於布拉赫函數(Bloch function)為一種週期性波動函數的特性,讓我們可對其作傅立葉轉換,得到在各單位晶胞(unit cell)中有值,而在其外就快速衰退的瓦尼爾函數,如底下方程式(3.45)與圖(3.8)所示。

$$w_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) = N^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} b_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$
(3.45)

其中,N為單位晶胞總數,n為能帶編號,k為晶格動量, R_i 為第j個單位晶胞



Figure 3.8: 布 拉 赫 與 瓦 尼 爾 函 數 空 間 分 佈 示 意 圖 [77] , 其 中 , $\Psi_{k_n}(x) = u_{nk}(x)e^{ikx}$, $w_n(x) = N^{-1/2}\sum_k e^{-ikR_j}\Psi_{k_n}(x)$ 。

(unit cell)之位置向量。因為布拉赫函數為標準正交基底 (orthonormal basis),所以瓦尼爾函數也同樣為標準正交基底。

$$\int_{V} w_{n'}^{*}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{j'}) w_{n}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{j}) d\mathbf{r} = \delta_{nn'} \delta_{jj'}$$
(3.46)

因此,我們能夠將任意波函數 $\psi(\mathbf{r})$ 以瓦尼爾函數 $w_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$ 展開,得到

$$\psi(\mathbf{r}) = \left(\frac{V}{N}\right)^{1/2} \sum_{n} \sum_{j} \phi_n(\mathbf{R}_j) w_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$$
(3.47)

其中, $(V/N)^{1/2}$ 為用以正規化 (normalization)之係數,並且 $\phi_n(\mathbf{R}_j)$ 為各基底之展開係數。在此我們進一步假設 $\phi_n(\mathbf{R}_j)$ 為一個對 \mathbf{R}_j 而言變化緩慢的函數,那

麼因為瓦尼爾函數 $w_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$ 在第 j 個晶胞外就會迅速遞減,所以我們能夠將 $\phi_n(\mathbf{R}_j)$ 視為一種振幅函數 (amplitude function),能藉此呈現出波函數 $\psi(\mathbf{r})$ 在第 j. 個單位晶胞內之強度。在這種 $\phi(\mathbf{R}_j)$ 具有對於 \mathbf{R}_j 緩慢變化特性的情況下,也有人 將其稱為包絡函數 (envelope function) [10]。我們可藉由考慮一個遠比晶體體積 V 還要小,但卻大到足以包含數個單位晶胞的體積 ΔV ,來更進一步了解此振幅 函數 $\phi_n(\mathbf{R}_j)$ 的特性。在這 ΔV 範圍中,其電子出現機率為

$$\Delta P = \int_{\Delta V} |\psi|^2 d\mathbf{r} \tag{3.48}$$

我們進一步將 $\psi(\mathbf{r})$ 代入其瓦尼爾函數展開式(3.47),並且假設僅有單 一特定能帶 m 有顯著貢獻(single-band approximation),即對於所有 $n \neq m$, $|\phi_m| \gg |\phi_n|$,因此將能帶下標 n 省略,我們得到

$$\Delta P = \frac{V}{N} \int_{\Delta V} \sum_{jj'} \phi^*(\mathbf{R}_{j'}) \phi(\mathbf{R}_j) w^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{j'}) w(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{r}$$
(3.49)

由於我們考慮的 ΔV 足夠小,所以基於 $\phi(\mathbf{R}_j)$ 之緩慢變化特性,我們可將位於 ΔV 內的 $\phi^*(\mathbf{R}_{j'})\phi(\mathbf{R}_j)$ 進一步簡化為 $|\phi(\mathbf{R}_j)|^2$,因此可得

$$\Delta P \approx \frac{V}{N} \left| \phi(\mathbf{R}_j) \right|^2 \int_{\Delta V} \sum_{jj'} w^* (\mathbf{r} - \mathbf{R}_{j'}) w(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{r}$$
(3.50)

基於瓦尼爾函數的快速遞減性質與標準正交性質(3.46),可以觀察到方程式 (3.50)中的積分式仍約略為1,並且僅將ΔV內部之單位晶胞加總起來,所以其 積分總和式即為NΔV/V,因此可以得到

$$\Delta P \approx \frac{V}{N} \left| \phi(\mathbf{R}_j) \right|^2 \left(\frac{N \Delta V}{V} \right) = \left| \phi(\mathbf{R}_j) \right|^2 \Delta V$$
(3.51)

因此,如果我們將常數 $\phi(\mathbf{R}_j)$ 改寫為對空間 r 之連續函數 $\phi(\mathbf{r})$,那麼方程式 (3.51) 即能改寫為相當於量子力學中的基礎公設——波恩定則 (Born rule):

$$\int_{V} |\phi(\mathbf{r})|^2 \, d\mathbf{r} = 1 \tag{3.52}$$

也就是說,等效質量近似方程式(3.44)中之 ϕ 雖然並不是波函數 ψ ,但是卻具有 著波函數 ψ 的機率詮釋意義。在了解 $\phi(\mathbf{r})$ 意義後,我們可開始化簡薛丁格波動方 程式(3.43)。首先將動能項與週期位能項併入 H_0 中,用以表示理想的週期晶格 哈密頓算符(Perfect crystal Hamiltonian),因此可將薛丁格波動方程式(3.43)改 寫為

$$[H_0 + V_{\text{ext}}(\mathbf{r})]\psi = E\psi \tag{3.53}$$

接著將 ψ 之瓦尼爾函數展開式(3.47)代入,將疊加指標j改為j',並採用單能帶近似(single-band approximation),忽略能帶下標n,再於左右式同乘 $w^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$ 積分,藉由瓦尼爾函數之標準正交基底特性(3.46)求得各展開係數 $\phi(\mathbf{R}_j)$ 之迭代關係式,總共有N條關係式,結果如下。

$$\sum_{j'} (H_0)_{jj'} \phi(\mathbf{R}_{j'}) + \sum_{j'} V_{jj'} \phi(\mathbf{R}_{j'}) = E\phi(\mathbf{R}_j)$$
(3.54)

其中,

$$(H_0)_{jj'} \equiv \int w^* (\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) H_0 w(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{j'}) d\mathbf{r}$$

$$V_{jj'} \equiv \int w^* (\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) w(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{j'}) d\mathbf{r}$$
(3.55)

由於 $(H_0)_{jj'}$ 之積分範圍為整個晶體,所以可將其中的 $w(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$ 平移改寫為

$$(H_0)_{jj'} = \int w^*(\mathbf{r}) H_0 w(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{j'} + \mathbf{R}_j) d\mathbf{r}$$
(3.56)

由此可見 $(H_0)_{jj'}$ 為 $\mathbf{R} - \mathbf{R}_j$ 之函數,

$$(H_0)_{jj'} = h_0(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'})$$
(3.57)

此外,由於 $w(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$ 為在第j個單位晶胞外快速衰退之函數,所以 $V_{jj'}$ 只有在 $j \approx j'$ 才有值。因此倘若我們進一步假設 $V(\mathbf{r})$ 為相對 \mathbf{R}_j 緩慢變化的函數,那麼 可以得到 $V_{jj'} \approx V_{\text{ext}}(\mathbf{R}_j)\delta_{jj'}$,因此可將方程式(3.54)改寫為

$$\sum_{j'} h_0(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'})\phi(\mathbf{R}_{j'}) + V_{\text{ext}}(\mathbf{R}_j)\phi(\mathbf{R}_j) = E\phi(\mathbf{R}_j)$$
(3.58)

原則上,只要我們解出方程式(3.58)中的φ(**R**_j),那就能進一步計算穿隧機 率。其關鍵在於其理想的能帶色散關係 E(**k**),根據方程式(3.53),可以得到在尚 未施加外界電場時之能量關係:

$$H_0 b_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E(\mathbf{k}) b_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad \rightarrow \quad E(\mathbf{k}) = \int b_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) H_0 b_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$
(3.59)

因此,我們可將瓦尼爾函數(3.45)做傳立葉轉換,將布拉赫函數 $b_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 改為由瓦尼爾函數為基底展開,

$$b_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = N^{-1/2} \sum_{j} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{j}} w_{n}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{j})$$
(3.60)

接著代入方程式(3.59)中,可以得到

$$E(\mathbf{k}) = N^{-1} \sum_{jj'} h_0(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'}) e^{-i(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'}) \cdot \mathbf{k}} = \sum_{j'} h_0(\mathbf{R}_j) e^{-i\mathbf{R}_j \cdot \mathbf{k}}$$
(3.61)

注意到倘若將動量算符 $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} = -i\hbar \nabla$ 代入,即 $\mathbf{k} = -i\nabla$,那麼 $e^{-i\mathbf{R}_{j}\cdot\mathbf{k}} = e^{-\mathbf{R}_{j}\cdot\nabla}$ 則為量子力學中的平移算符 (translation operator),我們可以用多變數泰勒展開來 理解其效果:

$$\phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{j'}) = \phi(\mathbf{r}) - \mathbf{R}_{j'} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}) + \frac{(\mathbf{R}_{j'} \cdot \nabla)[\mathbf{R}_{j'} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r})]}{2} - \cdots$$
$$= \left[1 - (\mathbf{R}_{j'} \cdot \nabla) + \frac{1}{2} (\mathbf{R}_{j'} \cdot \nabla)^2 - \cdots\right] \phi(r) \qquad (3.62)$$
$$= e^{-\mathbf{R}_{j'} \cdot \nabla} \phi(\mathbf{r})$$

為了利用上述 $\phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{j'}) = e^{-\mathbf{R}_{j'} \cdot \nabla} \phi(\mathbf{r})$ 之關係,我們將方程式(3.58)中的第一項 平移其指標 j,可改寫為

$$\sum_{j'} h_0(\mathbf{R}_{j'})\phi(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'}) + V_{\text{ext}}(\mathbf{R}_j)\phi(\mathbf{R}_j) = E\phi(\mathbf{R}_j)$$
(3.63)

再將 $\phi(\mathbf{R}_i)$ 改寫為對空間位置向量 r 之連續函數 $\phi(\mathbf{r})$,

$$\sum_{j'} h_0(\mathbf{R}_{j'})\phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{j'}) + V_{\text{ext}}(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) = E\phi(\mathbf{r})$$



最後,我們藉由方程式(3.61)與(3.62),可以得到

$$[E(-i\nabla) + V_{\text{ext}}(\mathbf{r})]\phi(\mathbf{r}) = E\phi(\mathbf{r})$$
(3.65)

進一步而言,倘若該晶體在尚未施加電場時之 $E(\mathbf{k})$ 關係滿足拋物球狀近似 (parabolic and spherical approximation),

$$E(\mathbf{k}) \approx \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad \to \quad E(-i\nabla) \approx -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*}$$
(3.66)

那麼就可將方程式(3.65)改寫為

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r})\right] \phi(\mathbf{r}) = E\phi(\mathbf{r})$$
(3.67)

綜上所述,基於下述假設,我們能夠將薛丁格方程式 $[H_0 + V_{\text{ext}}(\mathbf{r})]\psi = E\psi$ 改 寫為方程式 (3.67),此即為等效質量近似。

- 1. 對於任何 $n \neq m$, $|\phi_m(\mathbf{R}_j)| \gg |\phi_n(\mathbf{R}_{j'})|$, 即單能帶假設。
- 2. $V_{ii'} \approx V_{\text{ext}}(\mathbf{R}_i)\delta_{ii'}$,即電場足夠小之假設。
- 3. $E(\mathbf{k}) \approx \hbar^2 k^2 / 2m^*$,即拋物球狀能帶假設。

3.3.2 Hurkx 缺陷輔助穿隧模型

Hurkx 假設晶體受到向 x 軸正向之均勻電場 [10],即沒有任何摻雜的情況, $V_{\text{ext}}(x) = qFx$,如圖 (3.9)所示,而非均勻摻雜的 $V_{\text{ext}}(x) \sim x^2$,所以其等效質量 方程式為

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*} + qFx\right)\phi(x) = E\phi(x) \tag{3.68}$$

接著做變數轉換,令 $u = \gamma(x - x_E)$,其中 $\gamma \equiv (2m^*qF\hbar^{-2})^{1/3}$,以及 $x_E = E/qF$,



Figure 3.9: 缺陷輔助機制示意圖。電子向右穿隧之振幅函數為 $\phi_E(x)$,其意義如方 程式(3.52)所示。 x_E 為其對應之傳導帶能階位置, δ 為缺陷能井 E_T 之對應傳導帶位置。

因而將方程式(3.68)改寫為

$$\frac{d^2\phi}{du^2} - u\phi = 0 \tag{3.69}$$

此方程式有著艾里函數(Airy function)的微分方程解,

$$\phi(x) = C_1 A i \left[\gamma(x - x_E) \right] + C_2 B i \left[\gamma(x - x_E) \right]$$
(3.70)

又因為 $\lim_{x\to\infty} Bi(x) = \infty$,並由圖 (3.9) 可知 $\lim_{x\to\infty} \phi(x) = 0$,由此可得方程式 (3.70) 之 $C_2 = 0$,所以定義其解為

$$\phi_E(x) \equiv C_1 A i \left[\gamma(x - x_E) \right] \tag{3.71}$$

3.3.2.1 SRH 廣義表達式

由於 Hurkx 是基於 SRH 廣義表達式推出其模型,所以需要在此說明何謂廣義 表達式。根據 Shockley 當年提出的復合模型 [43],如圖(3.10)所示,假若能井 濃度為 N_T,於能井上佔據電子的機率為 f_T,即

$$f_T = \left[1 + \exp\left(\frac{E_T - E_F}{kT}\right)\right]^{-1}$$
(3.72)

並且載子發射率為 e, 捕捉率為 c, 那麼參與圖 (3.10) 中 (a)、(b) 過程之電子濃度時變率為

$$\frac{dn}{dt} = -c_n n N_T (1 - f_T) + e_n N_T f_T$$
(3.73)

doi:10.6342/NTU201904385

同樣地,參與圖(3.10)中(c)、(d)過程之電洞濃度時變率為

$$\frac{dp}{dt} = -c_p p N_T f_T + e_n N_T (1 - f_T)$$



因此, 位於缺陷能井上之電子數 N_T 之時變率為

$$\frac{dN_T^-}{dt} = -\frac{dn}{dt} + \frac{dp}{dt}$$
(3.75)

倘若我們僅假設位於缺陷能井上之電子數不變,使得 dn/dt = dp/dt,那麼我們可以得出底下之 SRH 廣義表達式 [71][78]。

$$R_{\rm SRH} \equiv -\frac{dn}{dt} = -\frac{dp}{dt} = N_T \frac{c_p c_n p n - e_n e_p}{c_n n + c_p p + e_n + e_p}$$
(3.76)

在推得廣義表達式後,Hurkx 進一步論證,在熱平衡,即dn/dt = dp/dt = 0,並



Figure 3.10: SRH 復合過程。由單能階之缺陷中心產生之電子電洞復合過程。

且施加電壓時,可推得其載子發射率與等效載子濃度會放大為

$$\frac{e_n}{e_{n0}} = \frac{n_t}{n} = 1 + \Gamma_n$$

$$\frac{e_p}{e_{p0}} = \frac{p_t}{p} = 1 + \Gamma_p$$
(3.77)

其中, $e_{n0}(e_{p0})$ 、n(p)為沒有外加電場時之電子(電洞)發射率與電子(電洞)濃度,至於 Γ 則為場效倍增因子(field-enhanced factor),基於缺陷輔助穿隧效應而

產生的放大因子。最後可藉方程式(3.76)與(3.77)推出



$$R_{\rm SRH} = \frac{np - n_i^2}{\frac{\tau_{p0}}{1 + \Gamma_p}(n + n_1) + \frac{\tau_{n0}}{1 + \Gamma_n}(p + p_1)}$$

接下來會依序推導考慮缺陷輔助穿隧效應時的等效載子濃度與發射率,再整理得 出方程式 (3.78)。

3.3.2.2 等效载子濃度

由圖 (3.9) 與方程式 (3.52)、(3.71) 可得,電子由 x_E 穿隧至 $x > x_E$ 之機 率為

$$T_E(x) \equiv \frac{|\phi_E(x)|^2}{|\phi_E(x_E)|^2} = \frac{Ai^2 \left[\gamma(x - x_E)\right]}{Ai^2(0)}$$
(3.79)

因此,計算位於x之電子濃度時,除了考慮傳導帶上各個 $E > E_c(x)$ 之能量貢獻時,我們也得考慮藉由鄰近傳導帶 ($\delta < x_E < x$)穿隧至x之電子,因此電子濃度為

$$n_{t} = \int_{E_{T}(x)}^{E_{c}(x)} g(E)f(E)T_{E}(x)dE + \int_{E_{c}(x)}^{\infty} g(E)f(E)dE$$

$$= \int_{E_{T}(x)}^{E_{c}(x)} \left(-\frac{dn}{dx}\right)_{x=x_{E}} T_{E}(x)dE + n(x)$$

$$= n(x) + \int_{\delta}^{x} \left(-\frac{dn}{dx}\right)_{x=x_{E}} \frac{Ai^{2}\left[\gamma(x-x_{E})\right]}{Ai^{2}(0)}dx_{E}$$
 (3.80)

其中, n_t 為考慮缺陷輔助穿隧效應(Trap-assisted tunneling,TAT)時的等效電子 濃度,而n則為沒有考慮TAT時之電子濃度,g(E)為能階密度函數(density of states),f(E)為費米—狄拉克分佈函數, δ 為能夠穿隧至 $E_T(x)$ 之最小x座標, 因為在 $x < \delta$ 之傳導帶能階都比 $E_T(x)$ 還要小,而無法穿隧至 $E_T(x)$ 。接著即處 理 $(-dn/dx)_{x=x_E}$:

$$\left(-\frac{dn}{dx}\right)_{x=x_E} = -\frac{d}{dx} \left[n_i \exp\left(\frac{E_{Fn} - E_i}{kT}\right)\right]_{x=x_E}$$
$$= n_i \exp\left[\frac{E_{Fn} - E_i(x_E)}{kT}\right] \frac{qF}{kT}$$
$$= n(x) \frac{qF}{kT} \exp\left[\frac{E_i(x) - E_i(x_E)}{kT}\right]$$
(3.81)

doi:10.6342/NTU201904385

因此,將方程式(3.81)代入(3.80)中,可以得到

た、將方程式 (3.81) 代入 (3.80) 中、可以得到

$$n_t(x) = n(x) \left\{ 1 + \frac{qF}{kT} \int_{\delta}^{x} \exp\left[\frac{E_i(x) - E_i(x_E)}{kT}\right] \frac{Ai^2 [\gamma(x - x_E)]}{Ai^2(0)} dx_E \right\}$$

$$= n(x) \left\{ 1 + \frac{1}{kT} \int_{E_T(x)}^{E_c(x)} \exp\left(\frac{E_c - E'}{kT}\right) \frac{Ai^2 [\gamma(x - x_E)]}{Ai^2(0)} dE' \right\}$$
(3.82)

最後,為了與待會推導的發射率比較,令E = Ec - E',其中 $E_c = qFx$,

$$n_t(x) = n(x) \left\{ 1 + \frac{1}{kT} \int_0^{E_c - E_T} \exp\left(\frac{E}{kT}\right) \frac{Ai^2 (2m_n^* \gamma^{-2} \hbar^{-2} E)}{Ai^2(0)} dE \right\}$$
(3.83)

電洞濃度也可由類似方法推得,值得注意的是方程式(3.79)之穿隧機率, 若將其中 m* 代入電子加速度等效質量 m*n,則此為電子 TAT 機率,若代入電洞等 效質量 m^{*}_p,則為電洞穿隧機率。在此不贅述電洞之詳細推導,其結果如下。

$$p_t(x) = \int_{-\infty}^{E_v(x)} g(E) \left[1 - f(E)\right] dE + \int_{E_v(x)}^{E_T(x)} g(E) \left[1 - f(E)\right] T_E(x) dE$$

$$= p(x) \left\{ 1 + \frac{1}{kT} \int_0^{E_T - E_v} \exp\left(\frac{E}{kT}\right) \frac{Ai^2 (2m_p^* \gamma^{-2} \hbar^{-2} E)}{Ai^2(0)} dE \right\}$$
(3.84)

3.3.2.3 等效載子發射率

根據 Vincent [70] 與圖 (3.7), 電子發射時需先從能井 (P) 經由熱致發射到 P'(PP'), 再經由 TAT 穿隧至隔壁的傳導帶能階 P'(P'P''), 因此藉由 TAT 發射 至傳導帶的電子發射率,為上述兩過程之機率乘積,最後再加上直接由缺陷能井 $E_T(x)$ 熱致發射到傳導帶 $E_c(x)$ 的正常熱發射率,即為電子總發射率:

 $e_n = (\text{thermal emission}) + (\text{trap-assisted tunneling})$

$$= e_n^{\infty} \exp\left(-\frac{E_c - E_T}{kT}\right) + \int_{E_T}^{E_c} e_n^{\infty} \exp\left(-\frac{E' - E_T}{kT}\right) T_E(x) d\left(\frac{E'}{kT}\right)$$
(3.85)

其中,據我推測,Hurkx 將上式之 $T_{E}(x)$ 視為方程式(3.79),然而這並不符合 我的物理直覺;我覺得位於傳導帶上的波函數分佈 $\phi_E(x)$,以及位於能井上的 波函數分佈 $\psi_T(x)$ 應該是不同的,而非對稱的。然而似乎只有這樣才能推出 $n_t/n = e_n/e_{n0}$ 的 Hurkx 結論。因此, 現階段我仍將 $T_E(x)$ 視為方程式 (3.79), 繼 續推導下去:

資推導下去:

$$e_n = e_n^{\infty} \exp\left(-\frac{E_c - E_T}{kT}\right) + \int_{E_T}^{E_c} e_n^{\infty} \exp\left(-\frac{E' - E_T}{kT}\right) \frac{Ai^2 \left[\gamma(x - x_E)\right]}{Ai^2(0)} d\binom{E'}{kT}$$
(3.86)

接著令 $E = qFx - E' = E_c - E'$,可以得到

$$e_{n} = e_{n}^{\infty} \exp\left(-\frac{E_{c} - E_{T}}{kT}\right)$$

$$+ e_{n}^{\infty} \left(-\frac{E_{c} - E_{T}}{kT}\right) \frac{1}{kT} \int_{0}^{E_{c} - E_{T}} \exp\left(\frac{E}{kT}\right) \frac{Ai^{2}(2m_{n}^{*}\gamma^{-2}\hbar^{-2}E)}{Ai^{2}(0)} dE$$

$$= e_{n}^{\infty} \exp\left(-\frac{E_{c} - E_{T}}{kT}\right) \left[1 + \frac{1}{kT} \int_{0}^{E_{c} - E_{T}} \exp\left(\frac{E}{kT}\right) \frac{Ai^{2}(2m_{n}^{*}\gamma^{-2}\hbar^{-2}E)}{Ai^{2}(0)} dE\right]$$
(3.87)

我們定義沒有 TAT 效應之發射率 en0 定義為:

$$e_{n0} \equiv e_n^{\infty} \exp\left(-\frac{E_c - E_T}{kT}\right)$$
(3.88)

因此可得與 Hurkx [71] 相同的方程式:

$$e_n = e_{n0} \left[1 + \frac{1}{kT} \int_0^{E_c - E_T} \exp\left(\frac{E}{kT}\right) \frac{Ai^2 (2m_n^* \gamma^{-2} \hbar^{-2} E)}{Ai^2(0)} dE \right]$$
(3.89)

我們與電子濃度 n_t——即方程式 (3.83) ——相比較可得到電子之濃度與發射率都 以相同倍率放大,因此我們定義電子之缺陷輔助穿隧倍增因子 Γ_n 為

$$\Gamma_n \equiv \frac{n_t - n}{n} = \frac{e_n - e_{n0}}{e_{n0}} = \frac{1}{kT} \int_0^{E_c - E_T} \exp\left(\frac{E}{kT}\right) \frac{Ai^2 (2m_n^* \gamma^{-2} \hbar^{-2} E)}{Ai^2(0)} dE \quad (3.90)$$

同樣地,電洞之缺陷輔助穿隧倍增因子 Γ_p 為

$$\Gamma_p \equiv \frac{p_t - p}{p} = \frac{e_p - e_{p0}}{e_{p0}} = \frac{1}{kT} \int_0^{E_T - E_v} \exp\left(\frac{E}{kT}\right) \frac{Ai^2 (2m_p^* \gamma^{-2} \hbar^{-2} E)}{Ai^2(0)} dE \quad (3.91)$$

在得到載子濃度與發射率之放大關係後,我們可將其代入 SRH 廣(3.76)中,

$$R_{\text{SRH}} = N_T \frac{c_p c_n n_t p_t - e_n e_p}{c_n n_t + c_p p_t + e_n + e_p}$$

= $N_T \frac{(1 + \Gamma_n)(1 + \Gamma_p)c_p c_n n_p - (1 + \Gamma_n)(1 + \Gamma_p)e_{n0}e_{p0}}{(1 + \Gamma_n)c_n n + (1 + \Gamma_p)c_p p + (1 + \Gamma_n)e_{n0} + (1 + \Gamma_p)e_{p0}}$ (3.92)
= $\frac{n_p - (e_{n0}/c_n)(e_{p0}/c_p)}{\frac{1}{N_T c_p(1 + \Gamma_p)} \left(n + \frac{e_{n0}}{c_n}\right) + \frac{1}{N_T c_n(1 + \Gamma_n)} \left(p + \frac{e_{p0}}{c_p}\right)}$

考慮穩態條件,dn/dt = dp/dt = 0,因此根據方程式(3.73)、(3.74)可得

$$\frac{e_{n0}}{c_n} = n_i \exp\left(\frac{E_T - E_i}{kT}\right) \equiv n_1$$

$$\frac{e_{p0}}{c_p} = n_i \exp\left(\frac{E_i - E_T}{kT}\right) \equiv p_1$$
(3.93)

並且令 $\tau_{p0} = (N_T c_p)^{-1}$ 、 $\tau_{n0} = (N_T c_n)^{-1}$,代入後即得到考慮缺陷輔助穿隧效應的 SRH 復合模型

$$R_{\rm SRH} = \frac{np - n_i^2}{\frac{\tau_{p0}}{1 + \Gamma_p} \left(n + n_1\right) + \frac{\tau_{n0}}{1 + \Gamma_n} \left(p + p_1\right)}$$
(3.94)

3.3.2.5 穿隧倍增因子

Hurkx 提到可利用艾里函數的漸進行為(asymptotic behavior)進一步將倍增 因子 Γ 近似為便於數值積分的形式 [71]

$$Ai(y) \sim \exp\left(-\frac{2}{3}y^{3/2}\right) \tag{3.95}$$

代入倍增因子方程式(3.90)、(3.91)後可得 TCAD 中的 Hurkx 場效倍增因子模型 [59]

$$\Gamma_{n,p} = \frac{\Delta E_{n,p}}{kT} \int_0^1 \exp\left(\frac{\Delta E_{n,p}}{kT}u - K_{n,p}u^{3/2}\right) du$$
(3.96)

doi:10.6342/NTU201904385



並且,

$$K_{n,p} \equiv \frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m_{n,p}^* \Delta E_{n,p}^3}}{q\hbar F}$$
(3.98)

因此,綜上所述,TCAD之 Hurkx 模型參數僅為需要由實驗決定的缺陷能并 E_T ,以及等效穿隧質量 $m_{n,p}^*$,並且此質量即為載子之加速度質量,列於表(3.4)中。

Table 3.4:	缺陷輔助穿隧模型參數	(Hurkx model))
------------	------------	---------------	---

	InP	In _{0.53} Ga _{0.47} As	$In_{0.6}Ga_{0.4}As_{0.598}P_{0.402}$
m_{n}^{*}/m_{0}	0.08 [63]	0.0463 [63]	0.052 [64]
m_p^*/m_0	0.86 [79]	0.45 [79]	0.49 [80]
$\dot{E_T}$	Experiment	Experiment	Experiment

3.3.3 Hurkx 模型有效性

上述所作近似與假設為

- 1. 單能帶近似: $|\phi_m(\mathbf{R}_j)| \gg |\phi_n(\mathbf{R}_{j'})|, \forall n \neq m$
- 2. 電位變化近似: $V_{jj'} \approx V_{\text{ext}}(\mathbf{R}_j)\delta_{jj'}$
- 3. 掺質濃度近似:V(x) = qFx
- 4. 拋物球狀能帶近似: $E(\mathbf{k}) \approx \hbar^2 k^2 / 2m^*$

底下我將一一討論之。



為了討論單能帶假設造成的誤差,我們得放鬆這個假設,並討論在何種情況下,才能夠合理地做此近似。在做這一切近似之前,我們推論起點為由瓦尼爾 函數展開之薛丁格方程式(3.54),在此我們保留 $\sum_{j'} V_{jj'} \phi(\mathbf{R}_{j'})$,並且將第一項 $\sum (H_0)_{jj'} \phi(\mathbf{R}_{j'})$ 代入方程式(3.61)、(3.62),可得到

$$E_n(-i\nabla)\phi_n(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\phi_n(\mathbf{r}) + \sum_{n'(\neq n)} V_{nn'}\phi_{n'}(\mathbf{r}) = E\phi_n(\mathbf{r})$$
(3.99)

因此,倘若構成電子波函數的不僅有傳導帶上之瓦尼爾函數(n = c),還包括了價帶上之瓦尼爾函數(n = v),那麼我們可藉此雙能帶近似(two-band approximation)來討論單能帶近似條件。針對傳導帶與價帶展開方程式<math>(3.99)可得

$$E_{c}(-i\nabla)\phi_{c}(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\phi_{c}(\mathbf{r}) + V_{vc}\phi_{v}(\mathbf{r}) = E\phi_{c}(\mathbf{r})$$

$$E_{v}(-i\nabla)\phi_{v}(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\phi_{v}(\mathbf{r}) + V_{cv}\phi_{c}(\mathbf{r}) = E\phi_{v}(\mathbf{r})$$
(3.100)

接著先令 $V_{vc} = 0$,計算出 $\phi_c(\mathbf{r})$,即可由下式求出 $\phi_v(\mathbf{r})$,再代回原式求出更進一步的 $\phi_c(\mathbf{r})$,可如此遞迴下去以得到穩定的 $\phi_c \circ \phi_v \circ$ 不過在此我們做一次迭代即可 (零階近似,zeroth-order approximation):

$$[E_v(-i\nabla) + V(\mathbf{r}) - E]\phi_v(\mathbf{r}) = -V_{cv}\phi_c(\mathbf{r})$$
(3.101)

我們令 $E_v(-i\nabla) = -E_g - E'_v$, 如圖 (3.11) 所示, 代入可得

$$\left[-E_g - E'_v(-i\nabla) + V(\mathbf{r}) - E\right]\phi_v(\mathbf{r}) = -V_{cv}\phi_c(\mathbf{r})$$
(3.102)

因此,倘若 $E_q \gg E'_v(\mathbf{k})$,那麼就可以得到

$$\left[-E_g - 0 + V(\mathbf{r}) - E\right]\phi_v(\mathbf{r}) \approx -V_{cv}\phi_c(\mathbf{r})$$
(3.103)

doi:10.6342/NTU201904385



Figure 3.11: 傳導帶與價帶之能量關係示意圖

接著由於 $V(\mathbf{r})$ 與E通常有著相同的數量級,所以得到

$$-E_g\phi_v(\mathbf{r}) \approx -V_{cv}\phi_c(\mathbf{r}) \quad \rightarrow \quad |\phi_v(\mathbf{r})| \approx \left|\frac{V_{cv}}{E_g}\right| |\phi_c(\mathbf{r})| \tag{3.104}$$

進一步而言,通常 $|V_{cv}| < |E| \approx |V_{applied}|$,所以

$$|\phi_v(\mathbf{r})| \approx \left| \frac{V_{\text{applied}}}{E_g} \right| |\phi_c(\mathbf{r})|$$
 (3.105)

因此,倘若元件偏壓太大,大到超過能隙 Eg 的程度,那麼此近似可能就不再成 立。L.V.Keldysh 在 1963 年有提出同時考慮傳導帶與價帶並解出等效質量近似的 辦法,詳見 [81]。

3.3.3.2 電位變化近似

此近似要求的是電位在兩單位晶格間之電位變化足夠小,因此假設晶體偏壓 Vapplied 均勻分配在 x 方向之每個單位晶胞中,那麼可得

$$V_{\text{ext}}(\mathbf{R}_{j+1}) - V_{\text{ext}}(\mathbf{R}_j) \approx \frac{V_{\text{applied}}}{N_x} \approx \frac{V_{\text{applied}}}{N^{1/3}}$$
 (3.106)



根據高斯定律,在均勻摻質濃度 $\rho = q(N_D - N_A)$ 的情況下,

$$\frac{dF}{dx} = \frac{q(N_D - N_A)}{\epsilon} \tag{3.107}$$

其電場 F 與電位能 V 分佈為

$$F(x) = -F_{\max} + \frac{q(N_D - N_A)}{\epsilon} x$$

$$V(x) = V(0) - qF_{\max}x + \frac{q^2(N_D - N_A)}{2\epsilon} x^2$$
(3.108)

因此,Hurkx 的 V(x) = qFx 假設顯然蘊涵了沒有摻質的假設。不過雖然實際 摻雜濃度不為零,使得電場會隨著位置而改變,但由於我們元件的倍增層與吸收 層摻質濃度都相當低,所以我認為將該兩區電場視為常數並使用 Hurkx 模型之誤 差並不大,詳見第4、5章。

3.3.3.4 抛物球狀能帶近似

所謂的拋物球狀近似, $E(\mathbf{k}) \approx \hbar^2 k^2 / 2m^*$,其實假設了電子只會在 Г谷 (valley)之中,然而對於我們的倍增層 InP 而言,由於 Г谷等效質量不大,以及 InP 處之電場特別大,所以電子很容易具有高能量,產生谷間散射 (intervalley scattering),使得前述之單能帶近似不再成立,拋物球狀能帶近似也就不成立。除 此之外,即便僅有谷內散射 (intravalley scattering),這時也因其具有高能量而必 須考慮能帶之非拋物性 (nonparabolicity),使得用來考慮等效質量近似之哈密頓 $E(-i\nabla) + V$ 變得十分複雜,因此很可能不適用於具有高電場之 InP 倍增層。反 之,對於低電場的吸收層 In_{0.53}Ga_{0.47}As。

圖(3.12)是 InP 在不同均勻電場下,電子能量與其於各谷之分佈關係 [82], 由此可知當電場高於 10^4 V/cm,電子就逐漸由 Γ 谷散射至 L 谷。而由於 InP 之崩 潰電場為 10^5 V/cm 數量級,所以大部分的電子很可能已經散射至 L 谷。





Figure 3.12: InP 電子分佈函數之蒙地卡羅模擬 [82]

所謂的原初生命期即方程式(3.94)中之 τ_{p0} 與 τ_{n0} 。在 Sentaurus TCAD中,由 於經常在矽中觀察到摻質濃度與生命期之關係,即所謂的夏菲特關係(Scharfetter relation)[83][84],所以軟體預設了 Scharfetter 生命期模型:

$$\tau_{\rm dop}(N_A + N_D) = \tau_{\rm min} + \frac{\tau_{\rm max} - \tau_{\rm min}}{1 + \left(\frac{N_A + N_D}{N_{\rm ref}}\right)^{\gamma}}$$
(3.109)

然而,對於 InP 與 In_{0.53}Ga_{0.47}As 而言,此關係並不明顯。雖然有些人會藉圖 (3.13)來說明 InP 也具有夏菲特關係,但這並非原初生命期,而是與測量生命 期時所注入之過量載子濃度、摻質濃度等相對大小有關的等效生命期(effective lifetime),至於原初生命期則仍須從此關係中萃取出來。舉例而言,由於等效生



Figure 3.13: InP 之等效生命期 [47][85][86][87][88][89][90][91][92],其中 [N]、[P] 表示該實驗樣品之摻雜性質。

命期定義為[93]

$$\tau_{\rm eff} \equiv \frac{\Delta n}{R_{\rm net}} \tag{3.110}$$

其中, Δn 為隨時間改變的過量載子濃度(excess carrier concentration),並且載子 復合可分為輻射與非輻射機制,即 $R_{net} = R_r + R_{nr}$,在N型InP中,因此倘若假 設 $\Delta n \approx \Delta p$,所以

所以
$$R_r = B\left[(n_0 + \Delta n)(p_0 + \Delta p) - n_0 p_0\right] \approx B(n_0 + \Delta n)\Delta n$$
(3.111)

1010101010

6761

其中, B 為輻射復合速率常數 (radiative recombination rate constant)。而對於非輻射機制,考慮 SRH 復合模型,

$$R_{\rm nr} = \frac{(n_0 + \Delta n)(p_0 + \Delta p) - n_0 p_0}{\tau_{p0}(n_0 + \Delta n + n_1) + \tau_{n0}(p_0 + \Delta p + p_1)} \\\approx \frac{(n_0 + \Delta n)\Delta n}{\tau_{p0}(n_0 + \Delta n + n_1) + \tau_{n0}(p_0 + \Delta n + p_1)}$$
(3.112)

因此,在過量載子濃度足夠低的情況下(low-injection level), $n_0 \gg p_0 \gg \Delta n, p_1, n_1$,可以得到

$$R_{\rm r} \approx B n_0 \Delta n \tag{3.113}$$
$$R_{\rm nr} \approx \frac{n_0 \Delta n}{\tau_{p0} n_0 + \tau_{n0} p_0}$$

使得總復合速率為:

$$R_{\text{net}} \approx \left(B + \frac{1}{\tau_{p0}n_0 + \tau_{n0}p_0}\right) n_0 \Delta n \tag{3.114}$$

因此,代入 $\tau_{\rm eff} = \Delta n/R_{\rm net}$,可得等效生命期為

$$\tau_{\rm eff} = \frac{\tau_{p0} + \tau_{n0} p_0 / n_0}{1 + B n_0 \left(\tau_{p0} + \tau_{n0} p_0 / n_0\right)} \approx \frac{\tau_{p0}}{1 + B n_0 \tau_{p0}}$$
(3.115)

因此,就以這例子來說,需要進一步改變掺雜濃度 n_0 ,然後觀察 τ_{eff} 對 n_0 之關係,並用方程式 (3.115) 擬合,才能夠得到 SRH 原初生命期,詳見 [86]。此外,Ahrenkiel 有對於常見的光致發光 (Photoluminescence) 實驗結果提出理論模型 [92]:

$$I(t) \approx F_0 \exp\left(-\frac{t}{\tau_{\text{eff}}}\right) \left[\frac{e^{\alpha^2 D_n t}}{\alpha} \operatorname{erfc}\left(\alpha \sqrt{D_n t}\right)\right]$$
(3.116)

其中,I(t)為隨時間衰退的晶體發光強度(intensity),

$$I(t) \equiv \int_{V} \exp\left(-\beta x\right) \Delta n dV$$



 α 為晶體對該光源的吸收係數(absorption coefficient), β 為晶體對本身發出的光 的自吸收係數(self-absorption coefficient),並假設 $\beta \ll \alpha$, D_n 則為電子擴散率 (diffusivity)。因此,在測量到發光強度 I(t)後,可將方程式(3.116)對 I(t)擬 合,以求出等效生命期 τ_{eff} 。然而上述情況是等效生命期與過量載子濃度無關的理 想狀況,即 τ_{eff} 並非 Δn 之函數。倘若 $\tau_{eff} = \tau_{eff}(\Delta n)$,那麼則需要用數值模擬的 方式來求得 SRH 原初生命期 [47]。圖(3.14)為目前已知的 InP 原初生命期數據, 因為現有數據太少,所以並沒辦法確定其生命期應為多少。

有許多因素會影響生命期,例如高濃度的 SRH 復合中心會造成非常短的等效 生命期 [47],並且 P 型摻質可能會誘導出較深的復合中心 [47],使得 P 型晶體之 等效生命期通常都比 N 型來得小 [47][85]。製程也對生命期有顯著影響 [86][87], 例如差排 (dislocation) 與摻質都可作為復合中心 [94]。化合物半導體之成分組成 也會對生命期有影響 [92]。因此,目前並沒有辦法確定 InP 與 In_{0.53}Ga_{0.47}As 之原 初生命期。



綜上所述,生命期很可能僅能透過實驗數據擬合得來,詳見第5.3.1節。而在

Figure 3.14: InP 之原初生命期 [47][63][79][86][95]



Table 3.5: 原初生命期模型參數(Scharfetter model)

	InP	$In_{0.53}Ga_{0.47}As$	$In_{0.6}Ga_{0.4}As_{0.598}P_{0.402}$
$ au_{\min}$	None	None	None
$\tau_{\rm max}$	Experiment	Experiment	Experiment
$N_{\rm ref}$	None	None	None
γ	None	None	None

3.4 撞擊游離模型

撞擊游離係數模型基本上是依循著 Chynoweth law [96] 而建立,並且 Capasso 對於撞擊游離物理機制作了非常詳細全面的解說 [17],

$$\alpha(F) = A \exp\left(-\frac{B}{F}\right) \tag{3.118}$$

其中,F為該位置上之電場 (V/cm)。這些模型同樣藉由再生速率 (generation rate) 的形式與電流密度建立連結:

$$G_{\rm ii} = \alpha_n n v_n + \alpha_p p v_p \tag{3.119}$$

其中, v 為載子漂移速度 (drift velocity)。基於游離係數與溫度、電場以及局域性 的不同關係, TCAD 至少提供了 Van Overstraeten-de Man 模型 [97]、Okuto-Crowell 模型 [98] 以及 Lackner 模型 [99]。雖然本研究並沒有用到 Lackner 模型, 但因為它 能夠模擬撞擊游離現象的非局域性 [99][100][101][102], 而這在極薄倍增層時會顯 著發生,所以還是有其重要性。

3.4.1 Van Overstraeten-de Man 模型

此模型的特點為,能夠藉由中介電場 F₀,將電場範圍劃分成兩不同 並依序使用不同的 A、B 係數。而這些係數隨溫度的變化關係為

$$A = \gamma a, \quad B = \gamma b, \quad \gamma \equiv \frac{\tanh\left(\frac{\hbar\omega_{\rm op}}{2kT_0}\right)}{\tanh\left(\frac{\hbar\omega_{\rm op}}{2kT}\right)} \tag{3.120}$$

其中, ω_{op} 為變溫擬合參數, T_0 為 TCAD 預設之常溫 300 K, $a \cdot b$ 則為 $A \cdot B$ 係數於常溫之數值。因此,對於不同的電場範圍,其游離係數為

$$\alpha = \begin{cases} \gamma a_{\text{low}} \exp\left(-\frac{\gamma b_{\text{low}}}{F}\right), & F \le F_0 \\\\ \gamma a_{\text{high}} \exp\left(-\frac{\gamma b_{\text{high}}}{F}\right), & F_0 \le F \end{cases}$$
(3.121)

Cook 於 1982 年提出適合此模型的 InP 參數 [103],參數有三段電場範圍,分 別是 $2.4 - 3.8 \times 10^5$ V/cm、 $3.8 - 5.6 \times 10^5$ V/cm 以及 $5.3 - 7.7 \times 10^5$ V/cm。然 而,[103] 僅有在 $T_0 = 300$ K 之參數,所以其 $\hbar \omega_{op}$ 暫定為矽的 0.063 eV [97],在 此取其中 $2.4 - 5.6 \times 10^5$ V/cm 範圍之兩段參數,以 $F_0 = 3.8 \times 10^5$ V/cm 為中介 電場,列於表 (3.6)。

Pearsall 於 1980 年提出 $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ 在 2×10^5 V/cm 至 2.5×10^5 V/cm 電場 範圍之游離係數 [17][104],並沒有分段電場範圍,也只有常溫參數,所以將其 F_0 設定為任意值,將 $\hbar\omega_{op}$ 設定為矽的 0.063 eV,並且不區分強場與弱場之參數,列 於表 (3.7)。

最後則是 InGaAsP, Osaka 於 1984 提出對於 $\langle 100 \rangle$ In_{0.67}Ga_{0.33}As_{0.7}P_{0.3} ($E_g = 0.92 \text{ eV}$) 適用於 $3.3 \times 10^5 \text{ V/cm} < F < 4.3 \times 10^5 \text{ V/cm}$ 的常溫游離係數 [105], 以及對於 $\langle 100 \rangle$ In_{0.82}Ga_{0.18}As_{0.39}P_{0.61} ($E_g = 1.11 \text{ eV}$) 適用於 $4 \times 10^5 \text{ V/cm} < F < 5 \times 10^5 \text{ V/cm}$ 的常溫游離係數 [106]。此外, Takanashi 與 Horikoshi 也於 1979 年 針對 In_{0.89}Ga_{0.11}As_{0.74}P_{0.26} ($E_g = 1.13 \text{ eV}$) 提出適用於 $2.85 \times 10^5 \text{ V/cm} < F < 4 \times 10^5 \text{ V/cm}$ 的常溫游離係數 [107]。由於僅有 [107] 提供對於 Chynoweth law 的常溫擬合參數,所以在此我們僅引用其參數,列於表 (3.8)。

電子	電洞	單位
1.12×10^7	4.79×10^{6}	cm^{-1}
$2.93 imes 10^6$	1.62×10^6	cm^{-1}
3.11×10^6	2.55×10^6	cm^{-1}
$2.64 imes 10^6$	2.11×10^6	cm^{-1}
3.85×10^5	3.85×10^5	V/cm
0.063	0.063	eV
	電子 1.12×10^7 2.93×10^6 3.11×10^6 2.64×10^6 3.85×10^5 0.063	電子電洞 1.12×10^7 4.79×10^6 2.93×10^6 1.62×10^6 3.11×10^6 2.55×10^6 2.64×10^6 2.11×10^6 3.85×10^5 3.85×10^5 0.063 0.063

Table 3.6: InP 撞擊游離模型參數(Van Overstraeten-de Man 模型)

Table 3.7: In_{0.53}Ga_{0.47}As 撞擊游離模型參數(Van Overstraeten-de Man 模型)[104]

參數	電子	電洞	單位
a_{low}	1.0×10^9	1.38×10^8	cm^{-1}
a_{high}	1.0×10^9	1.38×10^8	cm^{-1}
$b_{\rm low}$	3.6×10^6	2.7×10^6	cm^{-1}
b_{high}	$3.6 imes 10^6$	$2.7 imes 10^6$	cm^{-1}
$\tilde{E_0}$	4×10^5	4×10^5	V/cm
$\hbar\omega_{ m op}$	0.063	0.063	eV

3.4.2 Okuto-Crowell 模型

相較於 Van Overstraeten-de Man 模型, Okuto-Crowell 模型沒有分段電場範圍, 並且其係數對溫度的關係為簡單的線性函數,如下所示:

$$\alpha(F) = a \left[1 + c \left(T - T_0\right)\right] F^{\gamma} \exp\left\{-\left\{\frac{b \left[1 + d \left(T - T_0\right)\right]}{F}\right\}^{\delta}\right\}$$
(3.122)

雖然 Taguchi 於 1986 年提出 InP 在 25°C 至 175°C 下的 InP 游離係數 [108],但是由於 Taguchi 所使用的物理模型並非方程式(3.122),而是:

$$\alpha_{n,p}(F) = \left(\frac{qF}{E_{\text{th}}}\right) \exp\left\{0.217 \left(\frac{E_{\text{th}}}{E_{\text{R}}}\right)^{1.14} - \left\{\left[0.217 \left(\frac{E_{\text{th}}}{E_{\text{R}}}\right)^{1.14}\right]^2 + \left(\frac{E_{\text{th}}}{qF\lambda}\right)^2\right\}^{1/2}\right\}$$
(3.123)

因此,需要將上述模型給出的 α_{n,p}(F),針對方程式(3.122) 擬合,才能得到 Okuto-Crowell 模型可用的模型參數。至於方程式(3.123) 則是 Baraff 經由波茲 曼方程式(Boltzmann transport equation)發展的撞擊游離理論[109],爾後再經由 Okuto 與 Crowell 推導得出的——可用在較大電場範圍下的——解析方程式[110]。

在方程式(3.123)中, Eth 為載子發生撞擊游離所需之閾值能量(threshold

參數	電子	電洞	單位
a_{low}	2.46×10^8	2.15×10^7	cm^{-1}
a_{high}	2.46×10^8	2.15×10^7	cm^{-1}
b_{low}	3.20×10^6	$3.07 imes 10^6$	cm^{-1}
b_{high}	3.20×10^6	3.07×10^6	cm^{-1}
E_0	4×10^5	4×10^5	V/cm
$\hbar\omega_{\mathrm{op}}$	0.063	0.063	eV

Table 3.8: In_{0.89}Ga_{0.11}As_{0.74}P_{0.26} 撞擊游離模型參數(Van Overstraeten-de Man 模型) [107]

energy),而 InP 之電子與電洞的常溫 E_{th} 依序為 1.84 eV、1.65 eV [111],並假設 其與能隙之溫度係數皆為 -2.9×10^{-4} eV/°C[112]。根據 [113], E_R 為拉曼光聲子 能量 (Raman optical phonon energy), λ 為產生光聲子所需之平均自由徑 (carrier mean free path),並且兩者與溫度之關係為

$$E_{\rm R} = E_{\rm R0} \tanh\left(\frac{E_{\rm R0}}{2kT}\right)$$

$$\lambda = \lambda_0 \tanh\left(\frac{E_{\rm R0}}{2kT}\right)$$
(3.124)

上述相關參數均列於表(3.9)中。最後,我的擬合結果如圖(3.15)所示,而適 用於方程式(3.122)之參數則列於表(3.10)。從圖(3.15)可以看到,直到電場 小於 3×10^5 V/cm 前, $\alpha_n \cdot \alpha_p$ 都有良好擬合。對於崩潰電場約為 5×10^5 V/cm 的 InP 而言,相信這樣的擬合結果足以給出合理的元件電性模擬。

Table 3.9: InP 之 Baraff 撞擊游離理論參數 [108]

參數	$E_{\rm th}({\rm eV})$	$E_{\rm R0}({\rm meV})$	$E_{\rm R}({\rm meV})$ at $25^{\circ}{ m C}$	$\lambda_0(\text{\AA})$	λ (Å) at 25°C
電子	1.84	46	32.9	41.7	29.8
電洞	1.65	36	21.8	41.3	25.0

3.4.3 InP 文獻數據比較

現有文獻為 Cook 於 1982 年提出適合 Van Overstraeten-de Man 模型的實驗數 據與模型參數 [103],以及 Taguchi 於 1986 年提出適合 Okuto-Crowell 模型的變溫 實驗數據,以及其 Baraff 理論參數 [108]。因此我們可將兩者共同擁有的常溫參

Table 3.10: InP 撞擊游離模型參數(Okuto-Crowell 模型)

參數	電子	電洞	單位
a	0.2885	4.6632	V^{-1}
b	$9.7885 imes 10^5$	$9.1762 imes 10^5$	V/cm
c	3.2237×10^{-4}	3.7237×10^{-4}	K^{-1}
d	9.1731×10^{-4}	1.0244×10^{-3}	K^{-1}
γ	1.052	0.8623	[—]
δ	1.8	1.8149	[-]



Figure 3.15: Baraff 理論與 Okuto-Crowell 模型比較圖。可以看到對於電場高於 3×10^5 V/cm 的游離係數都有良好擬合。

數加以做圖比較,如圖(3.16)所示。從圖(3.16)可看到 Cook 的游離係數在電 場為 5×10⁵ V/cm 時比 Taguchi 的游離係數還要大,所以採用 Cook 數據之 Van Overstraeten-de Man 模型預測的崩潰電壓會比採用 Taguchi 數據之 Okuto-Crowell 模型預測的崩潰電壓還要小。

3.5 傳輸方程式

以物理角度而言,當元件在運作時,元件是處在非平衡態之熱力學系統。而 描述非平衡態統計行為演化過程的方程式即為波茲曼方程式(Boltzmann transport



Figure 3.16: Cook 與 Taguchi 之 InP 游離係數比較圖 [103][108]。藍色實線為 Van Overstraeten-de Man 模型得出的游離係數,紅色實線為 Okuto-Crowell 模型得出的游離係數。

equation) [114]:

$$\frac{\partial}{\partial t}f_{n}(\mathbf{r},\mathbf{k},t) + v_{n}(\mathbf{k})\cdot\nabla_{x}f_{n} - \frac{q\mathbf{E}}{\hbar}\cdot\nabla_{\mathbf{k}}f_{n} = Q_{n}(f_{n}) + I_{n}(f_{n},f_{p})$$

$$\frac{\partial}{\partial t}f_{p}(\mathbf{r},\mathbf{k},t) + v_{p}(\mathbf{k})\cdot\nabla_{x}f_{p} - \frac{q\mathbf{E}}{\hbar}\cdot\nabla_{\mathbf{k}}f_{p} = Q_{p}(f_{p}) + I_{p}(f_{n},f_{p})$$
(3.125)

其中, E 在此為電場, $f_n \cdot f_p$ 為電子與電洞的費米—狄拉克分佈函數, $Q_n (Q_p)$ 為電子(電洞)之間的碰撞算符, $I_n (I_p)$ 為傳導帶中的電子(價帶中的電洞)經歷復合再生效應的算符, 而 $v_n \cdot v_p$ 則為:

$$v_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E_n(\mathbf{k}), \quad v_p(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E_p(\mathbf{k})$$
(3.126)

接著可藉由求矩法(Moment method) [114][115] 求出零階矩的連續方程式 (Zero-order moment: Continuity equations)、一階矩近似得來之漂移擴散方程式 (drift-diffusion equations)與更高階矩之流體動力方程式(hydrodynamic equations)。 也就是說,零階矩之波茲曼方程式會得到粒子數守恆律,一階矩得到粒子流密度 守恆律,而更高階矩會得到能量守恆律(conservation of energy flux)。 在 Sentaurus TCAD 中,連續方程式 (continuity equation) 為預設必要模型

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_n = qR_{\text{net,n}} + q\frac{\partial n}{\partial t}$$
$$-\nabla \cdot \mathbf{J}_p = qR_{\text{net,p}} + q\frac{\partial p}{\partial t}$$



其中, $\mathbf{J}_{n,p}$ 為電子(電洞)電流,單位為 A/cm^2 ,而 $R_{net,n}$ 則為電子復合速率 (recombination rate),單位為 $cm^{-3}s^{-1}$, n(p) 則為電子(電洞)濃度。

而對於波茲曼方程式的更高階矩,TCAD提供了Drift-Diffusion、Thermodynamic、Hydrodynamic與Monte Carlo四種模型供選擇。Drift-Diffusion模型適合恆 溫模擬。Thermodynamic模型適合用在高功率元件,適合模擬顯著之局部熱效應 (self-heating)。Hydrodynamic模型適合用在強電場且需考慮載子能量時,並特別 適合用在小面積元件上。最後的Monte-Carlo模擬則為在全能帶結構 (full-band structure,即不取能帶結構之局部近似,如拋物球狀近似, $E \approx \hbar^2 k^2/2m^*$),直接 對波茲曼方程式 (3.125)求解。

當元件離熱平衡不遠時,Drift-Diffusion 模型為波茲曼方程之良好近似[116]。 然而,當元件處於強電場甚至發生崩潰現象時[59][116],則需要進一步將波 茲曼方程式取其更高階矩,以近似得出能考慮顯著熱流效應之流體動力模型 (Hydrodynamic model)[116]。然而,雖然光偵測器因強電場造成之雪崩效應而不 適合此方程式[116],但經模擬比較發現其對崩潰電壓之預測以及對電流模擬之影 響並不顯著,並且Drift-Diffusion 模型之 CPU 演算時間足夠短,所以我們仍採用 Drift-Diffusion 模型[59]。



Chapter 4

元件設計

本研究為國家中山科學研究院之學術合作計劃案之其中一部份,此計劃是為了能夠開發未來可應用於光掃描雷射雷達的 0.9 – 1.7 µm 短波長紅外線波段 SAGCM-InP/InGaAsP/InGaAs 雪崩光電偵測器。本章將說明下述四項規格及檢驗 護環效用之設計:

1. 崩潰電壓落於 $V_b = 50 \pm 20$ V。

2. 對於主動區直徑為100 μm 的元件而言,於0.9V_b 時之暗電流需小於500 nA。

3. 於 1550 nm 時,元件量子效率需達 50%。

4. 便於比常溫低 100° C 之低溫下操作, 即 $T = -70^{\circ}$ C。

本章節將說明使用 Sentaurus TCAD 模擬設計元件的具體作法與護環設計。

4.1 磊晶結構

由於我們採用 SAGCM 結構,各層依序為吸收層、漸變層、電荷層與倍增 層,所以我們需要設計的參數為這四層之厚度與摻質濃度。其中,因為只有 In_{0.53}Ga_{0.47}As 能吸收 1550 nm 波長之光,所以吸收層參數即可決定量子效率。至 於 In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y} 漸變層,我們設定其厚度為 0.1 μm,其成分比例則以磊晶廠 方便為主,目的為減少電洞於能帶不連續處之累積,提升元件頻寬 [24]。因此, 我們需要特別設計的磊晶層為吸收層、電荷層與倍增層。 由於各層濃度與厚度變因極多,所以設計時需先在特定參數、模型條件範圍 內,尋找看似可行的設計條件,接著再微調先前之特定參數與模型,觀察其變化, 其結果皆達穩定為止,如圖(4.1)所示。

在由量子效率決定了吸收層厚度後,依圖(4.1),基於電性與磊晶廠之基本 條件,初步選擇了吸收層濃度、倍增層濃度與電荷層厚度作為固定參數,並對其 初始化。再由元件目標規格決定剩餘未定參數,即倍增層厚度與電荷層濃度。接 著再回頭嘗試其他倍增層濃度與游離係數模型,觀察原先選擇是否為最佳選擇。 倘若為最佳選擇,則完成元件設計。



Figure 4.1: 磊晶結構設計流程圖

4.1.2 以量子效率決定吸收層厚度

倘若吸收層太薄,那麼大部分的光在被吸收之前即穿透之,所以必須要有足夠的吸收層厚度。然而,倘若吸收層太厚,那麼會使載子傳輸時間(transit time) 太長,降低元件頻寬[117],不利於高速操作環境。因此我們以足夠高之量子效率 為最低設計標準。
量子效率定義為每顆光子平均生成的電子電洞對數目,此係數必然小於1。 為了建立量子效率與元件結構之關係,假設光子照射強度為 Φ_0 (Incident photon intensity,每秒照射到每單位面積之晶體表面上之光子數,單位為 $cm^{-2}s^{-1}$),並 且照光區反射係數為R,那麼表面光子入射強度 Φ 即為

$$\Phi = (1 - R)\Phi_0 \tag{4.1}$$

假設表面入射光子強度 Φ (cm⁻²s⁻¹)產生的光電流為 $I_{ph,0}$ (C cm⁻²s⁻¹),而在經 過增益為 M 之倍增層放大後,外部量測到之光電流為 $I_{ph} = MI_{ph,0}$,那麼對於照 射面積為 A 的晶體而言,其量子效率 η 為

$$\eta \equiv \frac{\text{carrier pairs per second}}{\text{absorbed photons per second}}$$

$$= \frac{I_{\text{ph},0}/q}{A\Phi} = \frac{I_{\text{ph}}/(qM)}{(1-R)A\Phi_0} < 1$$
(4.2)

值得注意的是,量子效率的定義是相對已成功入射——即沒有被反射的——晶體 光子數目而言,而不是相對尚未考慮光反射現象的照射光子數目而言。因此,量 子效率 η 僅與吸光材料本身的特性有關(即本質性質,intrinsic property),而與元 件中其他成分材料造成的反射係數R、增益M 無關。然而,由於我們僅能測量到 元件外部參數,如光源之發光功率,以及被放大過後的光電流 $I_{\rm ph} = MI_{\rm ph,0}$,所以 我們仍需元件中其他成分材料特性參數來換算得到吸光區量子效率。因此,假設 照光功率為 $P_{\rm ph}$ (單位為 Js^{-1}),光頻率為 ν ,那麼其照射光子強度與照光功率關 係為 $A\Phi_0 = P_{\rm ph}/h\nu$ 。因此,量子效率 η 與照光功率 $P_{\rm ph}$ 、經放大後之光電流 $I_{\rm ph}$ 、 增益M與照光區反射率R之關係為:

$$\eta = \frac{I_{\rm ph,0}h\nu}{q(1-R)P_{\rm ph}} = \frac{I_{\rm ph}h\nu}{q(1-R)MP_{\rm ph}}$$
(4.3)

由於已確定量子效率 η 、表面光子入射強度 Φ 與光電流 $I_{ph,0}$ 的關係,如方程式 (4.2)所示,所以將著討論表面入射光子強度 Φ 與光電流 $I_{ph,0}$ 的關係。所謂的光 吸收現象為,光子強度 $\Phi(x)$ 會隨著深度而遞減,而與表面光子入射強度 Φ 不同。

55

吸光現象之現象學模型(Phenomenological model)為下式:

10101010

$$\alpha \equiv -\frac{1}{\Phi}\frac{d\Phi}{dx}, \quad \frac{d\alpha}{dx} = 0$$

其中, α 為吸光程度的吸收係數, α 越大則越會吸光,x為晶體深度,越往晶體內部x越大。假設 In_{0.53}Ga_{0.47}As 的吸光現象確實有著符合方程式(4.4)定義的常數 吸收係數 α ,那麼光電子電洞對產生速率 $G_{ph}(x)$ (cm⁻³s⁻¹)就可由 α 表示為:

$$G_{\rm ph}(x) \equiv -\frac{d\Phi}{dx} = \alpha \Phi(x)$$
 (4.5)

由於吸收係數為常數,所以根據方程式 (4.4),可以得到光子強度隨x遞減之函 數為:

$$\Phi(x) = \Phi(0) \exp(-\alpha x) \tag{4.6}$$

將方程式(4.6)代入方程式(4.5)可得

$$G_{\rm ph}(x) = \alpha \Phi(0) \exp\left(-\alpha x\right) \tag{4.7}$$

其中, $\Phi(0)$ 即為表面入射光子強度 Φ 。綜上所述,我們可由描述光吸收現象之現 象學參數 α ,表示出光電子電洞對之生成速率 $G_{ph}(x)$,接著就可將其代入方程式 (3.10)中,並在穩態條件下 ($\partial n/\partial t = \partial p/\partial t = 0$),得到元件光電流密度 J_{ph} 為:

$$J_{\rm ph} = \underbrace{q \int_{\rm InP} G_{\rm net}(x) dx}_{MJ_{\rm ph,0} - J_{\rm ph,0}} + \underbrace{q \int_{\rm InGaAsP} G_{\rm net}(x) dx}_{\approx 0} + \underbrace{q \int_{\rm InGaAs} G_{\rm net}(x) dx}_{J_{\rm ph,0}}$$
(4.8)

因此我們可得光電流 Iph,0 為

$$I_{\rm ph,0} = Aq \int_0^{d_{\rm InGaAs}} G_{\rm net}(x) dx \tag{4.9}$$

其中, d_{InGaAs} 為吸收層厚度,x為 InGaAs 晶體深度,以 InGaAsP/InGaAs 界面處為x = 0,並以遠離倍增層 InP 方向為x遞增方向。雖然除了由光子產生電子電洞對以外,還有諸如第3章所說明的能帶穿隧、SRH 復合與雪崩效應,但由於照光

強度通常都大到使得光電子電洞對產生速率遠大於上述效應的程度,所以在電壓 足夠大,使得空乏區佈滿 InGaAs 吸收層時, $G_{\text{net}}(x) \approx G_{\text{ph}}(x)$,因此: $I_{\text{ph},0} \approx Aq \int_{\alpha}^{d_{\text{InGaAs}}} \alpha \Phi(0) \exp(-\alpha x) dx = Aq \Phi(0) \left[1 - \exp(-\alpha d_{\text{InGaAs}})\right]$ (4.10)

最後代入方程式(4.2),即得量子效率與吸收層厚度 d_{InGaAs} 之關係:

$$\eta = 1 - \exp\left(-\alpha d_{\text{InGaAs}}\right) \tag{4.11}$$

根據圖(4.2), $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ 對 1550 nm 波長之吸收係數約略介於 6085 cm⁻¹ 與 7140 cm⁻¹ 之間,所以若吸收層厚度為 3 μ m,則量子效率應有 83% — 88%,能滿 足量子效率高於 50% 的目標規格,所以我們將吸收層厚度定為 3 μ m。



Figure 4.2: In_{0.53}Ga_{0.47}As 吸收係數 [118][119]

4.1.3 基本設計考量

4.1.3.1 倍增層濃度

由於我們希望僅有 InP 倍增層發生顯著倍增效應,並且 5×10⁵ V/cm 上下之 高電場,所以我們希望倍增層之摻質濃度越小越好,使其電場都相當高,而不是 倍增層上半區有足夠高電場,但下半區之電場則不夠高,這樣會使元件電性控制



由於倍增效應僅發生在倍增層,並且我們需要藉由電荷層將倍增層之高電場 下降得足夠低,使得其後之吸收層能有足夠小的電場,以降低能帶穿隧效應造成 的暗電流,所以電荷層不僅需要高濃度,也需要極薄的厚度來快速下降電場,以 免發生顯著倍增效應。因此,我們選擇 $0.1 \, \mu m$ 的電荷層厚度。除了避免發生顯 著倍增效應以外,我們也得避免元件在擊穿之前即先崩潰的現象。具體來說,假 設倍增層厚度 d_M ,濃度為 N_M ,電荷層厚度為 d_c ,濃度為 N_c ,那麼在空乏近似 (depletion approximation)下,其擊穿電壓為

$$V_{\rm pt} = \frac{q(N_M d_M^2 + N_c d_c^2)}{2\epsilon} + \frac{qN_c d_c d_M}{\epsilon}$$
(4.12)

也就是說,擊穿電壓隨著 N_c、d_c 而單調遞增。因此若電荷層太厚,那麼擊穿電壓 V_{pt} 就會超過崩潰電壓 V_b,即提前崩潰。倘若元件提前崩潰,那麼元件崩潰時,吸 收層仍無電場,所以即便吸收層吸收了光子,產生了大量電洞,也沒辦法被電場 帶往倍增層以放大電流、產生倍增效應。換言之,為了避免元件提前崩潰,電荷 層厚度也必須足夠小才行。

4.1.3.3 吸收層濃度

由於希望吸收層電場足夠低,但也不能夠完全沒有電場,所以將吸收層濃度 設定為目前已知全新光電成長的最低吸收層濃度,即1×10¹⁵ cm⁻³。若倍增層與 吸收層濃度皆為零,那麼控制兩者電場之變因就僅為電荷層,使得電場設計變得 更為簡單,因此總是將倍增層與吸收層濃度設計得足夠低。

4.1.4 一維模擬:以低溫條件與暗電流求最佳參數

目前未定參數為倍增層厚度與電荷層濃度,接著以底下條件推得最佳參數:

1. 崩潰電壓落於 $V_b = 50 \pm 20$ V。

2. 對於主動區直徑為 100 μm 的元件而言,於 0.9Vb 時之暗電流需小於 500 nA。
 3. 便於比常溫低 100°C 之低溫下操作,即 T = -70°C。

藉第3章的元件模擬參數, 套用 1 × 10¹⁶ cm⁻³ 倍增層濃度, 0.1 μ m 電荷層厚度, 0.1 μ m 漸變層厚度, 1 × 10¹⁵ cm⁻³ 吸收層濃度, 3 μ m 吸收層厚度之結構參數, 以及使用 Cook [103] 之 InP 游離係數 (Van Overstraeten-de Man 模型),進行多種倍增層厚度與電荷層濃度之一維電性模擬,其模擬掺質結構與模擬結果如圖 (4.3)、(4.4) 所示,其中藍色大圓點為最後選定的參數。圖 (4.4a) 為擊穿電壓、崩潰電壓與倍增層厚度、電荷層濃度的關係圖,其中上方實線為崩潰電壓,下方虛線為擊穿電壓,兩條黑色水平虛線表示崩潰電壓目標規格,即 $V_b = 50 \pm 20$ V。並以各種顏色表示不同的倍增層厚度,如其線條標籤所示,單位為 μ m,並且橫軸為電荷層濃度。圖 (4.4b) 為元件於 0.9 V_b 時之能帶穿隧電流對不同倍增層厚度 興電荷層濃度之關係圖,即下式:

$$J_{\rm BTB}(0.9V_{\rm b}) = q \int_0^d G_{\rm BTB}(x, 0.9V_{\rm b}) dx$$
(4.13)

其中, d 為元件厚度。圖(4.4b)中不同顏色之線條表示不同倍增層厚度, 如線條標籤所示, 而橫軸則為電荷層濃度, 上方黑虛線為當元件直徑為 100 μ m時, 暗電流為 $I_d(0.9V_b) = 500$ nA 之暗電流密度 $J(0.9V_b) \approx 6.4$ mA/cm²。



Figure 4.3: 塔台結構模擬示意圖。顏色表示摻質濃度,紅色系為N型摻質,藍色 系為P型摻質。顏色越深,摻質濃度越高。元件結構由上而下依序為 鋅擴散層、倍增層、電荷層、漸變層、吸收層、緩衝層與基板,緩衝 層與基板皆為紅色。

如圖(4.4a)所示,對任何倍增層厚度而言,電荷層濃度越大則越難擊穿,



(a) 擊穿電壓、崩潰電壓、倍增層厚度、電(b)於 0.9Vb 之能帶穿隧電流對倍增層厚度、 荷層濃與設計參數之關係。 電荷層濃度與設計參數之關係。

Figure 4.4: 一維塔台結構之倍增層厚度與電荷層濃度設計參數

因此偏壓都落在倍增層中,使倍增層電場上升越快,越早崩潰。當電荷層濃度大 到一定值,擊穿電壓即超過崩潰電壓,使得崩潰先於擊穿。圖(4.4a)對此情形 的呈現為擊穿電壓與崩潰電壓收斂為一水平線;表示當元件提前崩潰時,不論電 荷層濃度為何,崩潰電壓都為定值。至於此時擊穿電壓如何隨電荷層濃度變化, 則沒有呈現於圖中。為了便於低溫操作,我們必須避免低溫時提前崩潰。由於 崩潰電壓之溫度係數為 +0.105 V/°C [120][121],所以要求常溫崩潰電壓必須高 於擊穿電壓 10 V,使其即便於零下 -70°C 也不會提前崩潰。僅有電荷層濃度高 於 $1.65 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 者才能满足 $V_b = 50 \pm 20 \text{ V}$ 。然而,倍增層越厚,發生提前 崩潰之電荷層濃度也越小,所以需要足夠薄的倍增層,才能滿足低溫操作條件, $V_b - V_{\text{pt}} \ge 10 \text{ V}$ 。

另一方面,雖然因為無法得知磊晶廠之製程環境,而無法推測 In_{0.53}Ga_{0.47}As 中可能的缺陷能井,從而無法推估其真實暗電流,也不確定其 InP 之游離係數, 但為了讓元件在 0.9V_b 時有盡可能小的暗電流,我們將設法降低能單純以磊晶結 構控制的吸收層能帶穿隧電流。

根據圖(4.4b),雖然大部分參數皆符合 J(0.9V_b) < 6.4 mA/cm² 之目標規格, 但仍可盡量減少暗電流,提高元件敏感度。在眾多考慮下,我們選擇藍色大圓點 參數。在圖(4.4a)中,兩個藍色大圓點分別表示在倍增層厚度為 0.6 μm、電荷層



4.1.5 二維模擬:改變倍增層濃度與游離係數模型

因為實際結構為平面結構,而非上一節所模擬的塔台結構,所以在由塔台結構之電性模擬決定中央區所需要的倍增層厚度與電荷層濃度(變動參數)後,我 們接著固定電荷層濃度,以實際平面結構,進行二維模擬,即設計流程圖(4.1) 中的「將變動參數值視為新固定參數值」的步驟。藉由二維模擬,觀察倍增層厚 度、游離係數、倍增層濃度的最佳條件。平面模擬之摻質分佈結構如圖(4.5)所 示,其結果如圖(4.6)所示。



Figure 4.5: 平面結構模擬示意圖。顏色表示摻質濃度,紅色系為N型摻質,藍色 系為P型摻質。顏色越深,摻質濃度越高。元件結構由上而下依序為 鋅擴散層、倍增層、電荷層、漸變層、吸收層、緩衝層與基板,緩衝 層與基板皆為紅色。

圖(4.6)比較了在1×10¹⁶ cm⁻³ 與2×10¹⁶ cm⁻³ 的倍增層濃度條件下,中央 崩潰電壓(Center)、邊緣崩潰電壓(Edge)以及擊穿電壓(虛線)與Cook [103]、 Taguchi [108] 游離係數之關係。如先前於第3.4.3節之分析,由於Taguchi 之游離係 數在強電場時較小,所以其崩潰所需之電壓亦較大。此外,圖(4.6)中的中央崩 潰曲線其實是使用圖(4.3)之塔台結構所模擬得來,倘若以圖(4.5)結構模擬, 那麼僅會得到一組崩潰電壓分佈,即邊緣崩潰電壓。雖然兩者是在不同結構下進 行模擬,但其磊晶結構完全相同,因此能作圖比較之。此外,隨著倍增層越來越 厚,擊穿電壓也逐漸與崩潰電壓靠近並重合,重合時即發生提前崩潰。而在這兩



(a) 倍增層濃度為1×10¹⁶ cm⁻³ 時之倍增層
 (b) 倍增層濃度為2×10¹⁶ cm⁻³ 時之倍增層
 濃度、游離模型與邊緣崩潰效應
 濃度、游離模型與邊緣崩潰效應

Figure 4.6: 倍增層濃度、游離模型與邊緣崩潰效應

種倍增層濃度中,可看到邊緣崩潰電壓總是小於中央崩潰電壓,使得平面結構元 件必然會發生邊緣崩潰。

有趣的是,在一定倍增層厚度後,即1×10¹⁶ cm⁻³ 的1.24 μm 與2×10¹⁶ cm⁻³ 的 0.78 μm,平面結構會發生表面崩潰現象,如兩圖中之彩色長方形縮圖所示。 此縮圖顏色深淺表示電流密度,顏色越紅,電流密度越大;顏色越藍,電流密度 越小。而在發生表面崩潰時,其崩潰電壓反而會隨倍增層厚度而遞減。

其中比較重要的結果是,如圖(4.6a)所示,對於 1×10^{16} cm⁻³ 之倍增層濃 度而言,倍增層厚度為 0.6μ m的崩潰電壓落在60.3 - 70.9 V 之間,所以此濃度 可能會使元件無法達到崩潰電壓落於 $V_b = 50 \pm 20$ V 的目標規格。反之,倘若倍 增層濃度為 2×10^{16} cm⁻³,如圖(4.6b)所示,那麼在倍增層厚度為 0.6μ m時, 崩潰電壓僅為43.7 - 53.3 V,能安全達標。由此可見,我們似乎應該將倍增層濃 度調整為 2×10^{16} cm⁻³。

然而,2×10¹⁶ cm⁻³ 的倍增層濃度有兩個缺點。第一,擴散深度必須恰好 落於 0.6 μm 附近,其能容許的誤差非常小。如圖(4.6b)所示,倘若倍增層厚 度由 0.6 μm 增加為 0.78 μm,那麼隨即發生表面崩潰。雖然在 0.78 – 0.89 μm 之 間,似乎有著一段邊緣崩潰電壓高於中央崩潰電壓,能使元件在不需要護環的情 況下,直接發生中央崩潰的區域,但是這區域非常小,很可能不會發生。因此倘 若選擇 2×10¹⁶ cm⁻³ 的倍增層濃度,那麼只要有一點擴散深度誤差,元件崩潰 電壓很可能就不在預期範圍內。第二,根據空乏近似(depletion approximation), 2×10^{16} cm⁻³ 的倍增層濃度,很可能使倍增層厚度為 0.6 μ m 左右之元件,在中央 崩潰時之吸收層最大電場低於 100 kV/cm,使得吸收層載子傳輸速度不夠快,降 低元件頻寬 [41],如圖(4.7)所示,圖中曲線是採用 Cook 之 InP 游離係數 [103]。 因此,基於這兩點,我們仍然將倍增層濃度設定為 1×10¹⁶ cm⁻³。



Figure 4.7: 元件中央崩潰時, In_{0.53}Ga_{0.47}As 吸收層最大電場與倍增層濃度之關係

此外,為了驗證表面崩潰的存在,我們也針對倍增層濃度為1×10¹⁶ cm⁻³ 的 結構,沿著元件中央區、邊緣區與表面,在圖(4.6a)中之邊緣與表面崩潰電壓 下,計算其電子增益積分,觀察其變化,如圖(4.8)、圖(4.9)所示。



Figure 4.8: 邊緣崩潰之增益分析切線圖

圖(4.8)兩圖最左側鉛直虛線為中央區切線,與其相距 7.95 μm 之鉛直虛線 為邊緣切線,至於水平虛線則為表面切線。圖(4.9)中之電子電洞增益積分 f_n



Figure 4.9: 邊緣崩潰之增益積分比較圖

定義與增益 $M_{n,p}$ 之關係依序為[122]:

$$f_n \equiv 1 - \frac{1}{M_n} = \int_{r_p}^{r_n} \alpha_n(F) \exp\left\{-\int_{r_p}^r \left[\alpha_n(F) - \alpha_p(F)\right] dr'\right\} dr$$

$$f_p \equiv 1 - \frac{1}{M_p} = \int_{r_p}^{r_n} \alpha_p(F) \exp\left\{\int_{r_p}^r \left[\alpha_n(F) - \alpha_p(F)\right] dr'\right\} dr$$
(4.14)

當 f_{n,p} 趨於 1 時,該切線路徑上之增益 M_{n,p} 趨於無窮大。因此,當邊緣 (Corner)崩潰時,中央區尚未崩潰。而在倍增層足夠厚時,邊緣增益積分反而上 升得比表面區還要慢;表面增益積分達到 1 時,邊緣與中央區都未崩潰。由此可 見,圖(4.6a)應為合理的崩潰模擬結果。綜上所述,最後的磊晶結構設計參數 列於表(4.1)中。此外,由於邊緣崩潰現象的存在,我們需要護環以抑制邊緣崩 潰。

結構	厚度	濃度			
倍增層	$0.6 \ \mu m$	$1 imes 10^{16} ext{ cm}^{-3}$			
电荷层	$0.1 \ \mu m$	$2.2 imes10^{17}~\mathrm{cm}^{-3}$			
漸變層	$0.1 \ \mu m$	以磊晶廠方便為主			
吸收層	$3 \ \mu m$	$1 imes 10^{15}~\mathrm{cm}^{-3}$			

Table 4.1: 磊晶結構設計參數

4.2 護環模擬

我們嘗試了兩種與中央區接觸的側護環結構(Attached Guard Ring, AGR)模擬,分別為淺側護環與深側護環。至於與中央區有段距離,沒有接觸中央區、側 護環的懸護環結構(Floating Guard Ring, FGR),則因為始終沒辦法完成其崩潰 模擬,所以並沒有得到護環設計的相關結論。底下我將說明上述三種護環結構的 模擬結果。

4.2.1 淺側護環

圖(4.10)依序列出濃度分佈,崩潰時的電場、電流密度分佈與元件電性分 佈。因為淺側護環結構在發生崩潰時,中央區電流密度遠大於周圍電流密度,所 以淺側護環結構似乎能抑制邊緣崩潰。然而,仔細看圖(4.10d)會發現,元件的 崩潰模擬沒有很好的收斂現象,它的崩潰電流無法再計算得更高。為了增加收 斂性,我不僅使用 Sentaurus TCAD 提供的外加電阻法(External resistor method), 也將傳輸方程式由常見的 Drift-Diffusion 模型,更改為 Hydrodynamic 模型。原則 上,物理模型越真實,越容易收斂[123]。除此之外,其中央區崩潰電壓也不符合 圖(4.6a)與圖(4.9)的計算。具體來說,圖(4.10)之模擬採用 0.81 μm 的倍增 層結構以及 Cook 的 InP 游離係數[103]。因此根據圖(4.6a),其中央區崩潰電壓 應為 55.6 V。然而,圖(4.10d)中顯示其崩潰電壓為 50 V,因此仍不確定此護環 作用,或許是發生了無法由電流密度圖(4.10c)觀察到的邊緣崩潰。

4.2.2 深側護環

同樣地,圖(4.11)依序列出濃度分佈,崩潰時的電場、電流密度分佈與元 件電性分佈。由圖(4.11c)可清晰看見深側護環結構元件發生了邊緣崩潰。進一 步而言,邊緣崩潰只會將深側護環區底下的電洞電流放大數百倍,至於中央區底 下的電洞電流,則因為中央區尚未崩潰,而沒有將其跟著放大,如圖(4.11b)所 示。因此,倘若發生邊緣崩潰的元件照了光,那麼其崩潰訊號也不會是完整的光 電流訊號。綜上所述,深側護環並無法抑制邊緣崩潰。





Figure 4.10: 淺側護環電性模擬





Figure 4.11: 深側護環電性模擬

4.2.3 側護環搭配懸護環

圖(4.12)為側護環搭配懸護環的結構模擬示意圖,顏色表示摻質濃度。由 於模擬結果總是在觀察到崩潰現象之前就發散而中斷模擬,所以沒辦法由此結構 確認其護環效應。倘若要提高收斂性,未來或許可以嘗試:

1. 將 Drift-Diffusion 模型更改為 Hydrodynamic 模型,並比較兩者電性差異。

2. 使用外接電阻以增加模擬收斂性。

3. 確保電流密度與電場強度變化大的區域之網格足夠細緻與均勻。



4. 將貢獻游離效應之等效電場模型由 Eparallel 更改為 EparallelToInterface。

Figure 4.12: 側護環搭配懸護環結構模擬示意圖。白色細線為空乏區邊界,藍色表示 P 型鋅摻雜區,黃紅色系表示 N 型摻雜區,越紅表示 N 型摻質濃度 越高。

綜上所述,我們的磊晶結構設計如圖(4.13)所示。

4.3 護環設計

根據上一節,我們認為或許淺側護環有助於抑制邊緣崩潰,因此我們設計了 淺側護環結構。此外,由於不確定懸護環效果,所以我們也設計了同時具有淺側 護環以及懸護環的結構,如先前提及之圖(4.10a)與圖(4.12)所示。



Figure 4.13: 磊晶結構設計圖

4.3.1 擴散順序

為了測試側護環深度的效果,我們藉由不同的擴散順序,來設計出不同擴散 深度的淺側護環。圖(4.14)即為擴散與電極製程圖。除此之外,我們也設計了 只有淺側護環,而沒有懸護環的結構,其製程與圖(4.14)相同,差別僅在於沒 有懸護環。

圖(4.14a)與(4.14b)顯示了相同擴散環境,但不同擴散壁(diffusion barrier) 的結果。兩者都有擴散懸護環,差別僅在主動區與側護環的擴散。圖(4.14a)擴 散了大圓,構成了主動區與側護環,然而圖(4.14b)僅擴散小圓,也就是只有主 動區的部分。此外,由於擴散環境相同,所以倘若擴散圓直徑不影響擴散深度, 那麼兩者之深度相同,即 $d_{L1} = d_{R1}$ 。接著進行第二道擴散,為了做出淺護環結 構,圖(4.14a)結構將接續圖(4.14c)的擴散,而圖(4.14b)結構則同樣接續圖 (4.14d)的擴散。由圖(4.14c)與圖(4.14d)可見,由於圖(4.14)之左排流程在 第一次擴散時就有擴散側護環,所以,假設在側護環上方有擴散壁的情況下,對 元件加熱也會促使側護環的鋅向下擴散,成長側護環,那麼這就會使得左排側護 環比右排側護環還要來得深,即 $d_{AL2} > d_{AR2}$ 。簡單來說,「先大再小」的擴散比 起「先小再大」的擴散有著更深的側護環。另外,第二道擴散也包含了懸護環, 所以兩種擴散之懸護環深度皆左排側護環深度相同。因為右排側護環是第二道擴 散才出現的,所以必然比較淺,使得 $d_{AR2} < d_{FR2} = d_{FL2} = d_{AL2}$ 。最後再將兩者一 起製作電極,結果如圖(4.14c)與圖(4.14f)所示,圖中黃色區域為抗反射鍍膜





Figure 4.14: 主動區與護環之擴散順序差異示意圖。左排(a、c、e)為先擴散大圓 再擴散小圓的製程,反之則為右排(b、d、f)。 (Anti-reflection coating),深藍色區域為由氮化物(Nitride)組成之擴散學

4.3.2 護環尺寸

如圖(4.15)所示,我們也設計了不同的護環尺寸,觀察其效應。其中包括 了淺側護環直徑(Attached guard ring diameter, AGR diameter),懸護環與側護環 之間隔(Floating guard ring spacing, FGR spacing)以及主動區直徑(Active region diameter)。由於這些尺寸都是由光罩寬度所定義,因為鋅也會向兩側擴散,所以 懸護環與側護環有可能已接觸。將於第5.2節搭配實際樣品與光罩圖案詳細說明設 計尺寸。



Figure 4.15: 護環尺寸示意圖

4.4 接觸電極設計

除了圖(4.14)中的電極以外,我們也另外設計了四種接觸電極,如圖(4.16) 所示,其中圖(4.16a)的大電極即為圖(4.14)中電極,與其相對的是圖(4.16b) 的小電極。另外其他三種比較組為設計一至設計三。整體來說,之所以設計不同 的電極,是為了觀察金屬電極底下的氮化物(抗反射鍍膜與擴散壁)是否能有效 阻擋電極之影響,抑或是使護環區成為等效金氧半元件,造成其他不好的效應。

由圖(4.16c)中之設計一可見,懸護環上方有著與中央區隔離的電極,所以 可以能夠在這兩個電極上施加不同的電壓組合,觀察其效應。例如,首先在中央 區電極施加連續逆偏壓,而懸護環電極則可固定在任意值,觀察其擊穿現象。此 外,由圖(4.16d)與圖(4.16e)之設計二與三,在測量其元件電性時,可互相比 較觀察設計二中的懸護環上方金屬是否會對懸護環造成影響。

71



電

極





(b) 接觸電極(小)

電

極



(d) 接觸電極設計二



(e) 接觸電極設計三

Figure 4.16: 接觸電極設計圖



Chapter 5

樣品分析

5.1 樣品結構

最初的晶圓模樣如圖(5.1a)所示。為了避免電極製程失敗,我們將晶圓切成 三片以分批完成製程。後來因負責電極製程的同學不小心讓晶圓掉落至地上,而 使晶圓碎成三、四片破片,如圖(5.1b)所示。圖(5.1b)中的左上圖為晶圓切割 後的模樣,其餘照片則為完成電極製程的該片晶圓破碎後的模樣。由於時間有限, 本研究僅分析圖(5.1b)中黃色方框內元件。



(a) 最初的晶圆

(b) 將晶圓切割並不小心破掉後之破片

Figure 5.1: 晶圓樣品圖

為了統計量測結果,我以圖(5.2)賦予每個元件獨特代碼。此代碼是由各元件之內外座標所構成。首先依設計圖樣,將晶圓以鉛直Y座標分為1至9區,接著再以水平X座標分為1至16區,此(X,Y)即為元件外座標,最後將每一子區



Figure 5.2: 元件代碼之內外座標,底圖為第二道擴散光罩,可概略呈現元件尺寸。

由全新光電提供之磊晶結構如圖(5.3)所示。其中,倍增層厚度與側護環擴 散深度是請全新光電由電化學電容法(Electrochemical CV-Profiling, ECV)決定, 其偵測極限為1×10¹⁷ cm⁻³,因此無法確定實際 PN 接面深度。



Figure 5.3: 樣品磊晶結構示意圖

5.2 護環效應

根據擴散順序圖(4.14)、護環設計尺寸圖(4.15)與元件座標圖(5.2),我 們將想觀察的各種效應,依照護環、電極設計等由上而下地依序排列於晶圓上, 如表(5.1)所示,本節將一一說明表中各種設計之元件結構、預期效應與量測結 果。

觀察效應	Y	у	Х	擴散	Active	AGR	FGR	電極
倍增層厚度	9	-	(1, 2, 3)	(1, 2, 1&2)	240	-	-	大
倍增层厚度	8	-	(1, 2, 3)	(1, 2, 1&2)	240	-	-	小
主動區直徑	7	3	-	先大後小	50	100	4	大
主動區直徑	$\overline{7}$	2	-	先大後小	100	150	4	大
主動區直徑	$\overline{7}$	1	-	先大後小	200	250	4	大
主動區直徑	6	3	-	先大後小	400	450	4	大
主動區直徑	6	2	-	先大後小	800	850	4	大
主動區直徑	6	1	-	先大後小	1600	1650	4	大
懸護環距離	5	4	-	先大後小	200	250	3	大
懸護環距離	5	3	-	先大後小	200	250	4	大
懸護環距離	5	2	-	先大後小	200	250	5	大
懸護環距離	5	1	-	先大後小	200	250	∞	大
主動區直徑	4	3	-	先小後大	50	100	4	大
主動區直徑	4	2	-	先小後大	100	150	4	大
主動區直徑	4	1	-	先小後大	200	250	4	大
懸護環距離	3	3	-	先小後大	200	250	3	大
懸護環距離	3	2	-	先小後大	200	250	5	大
懸護環距離	3	1	-	先小後大	200	250	∞	大
側護環直徑	2	3	(1, 2, 3)	先大後小	50	(110, 100, 90)	4	大
側護環直徑	2	2	(1, 2, 3)	先大後小	100	(160, 150, 140)	4	大
側護環直徑	2	1	(1, 2, 3)	先大後小	200	(260, 250, 240)	4	大
電極樣式	1	4	-	先大後小	200	250	3	設計一
電極樣式	1	3	-	先大後小	200	250	3	設計二
電極樣式	1	2	-	先大後小	200	250	3	設計三
MIS	1	1	-	-	-	-	-	-

Table 5.1: 元件設計表。除了元件座標沒有單位,其他單位皆為 µm。

5.2.1 量测方式

首先將元件放在光學顯微鏡下之銅座上,元件直接接觸銅座,其中並沒有銀膠。元件背面僅為1-8×10¹⁸ cm⁻³之N型矽摻雜 InP,也就是說,元件並沒有經過任何歐姆接觸處理。接著從惠普 HP4156A 半導體參數分析儀接出兩根探針

(probe tip),一根探針下於銅座上任意位置,另一根探針則直接下於元件表面之 金屬接觸墊片(Pad)上,如圖(5.4c)與圖(5.4b)所示。由此可藉由半導體參 數分析儀之兩探針提供元件跨壓,量測元件尚未照射任何光源時之暗電流。另一 方面,我們使用 BioSurplus 之 LP-220B 鹵素燈電源供應器,再將其光源通過短波 長濾波片以及 Zolix 分光儀,提供 1550 nm 波長之光源,最後由光纖將此光源導 引至光學顯微鏡上,經由元件中央主動區抗反射鍍膜,穿透 InP 倍增層,照射至 In_{0.53}Ga_{0.47}As 吸收層中,以產生光電流,儀器如圖(5.4a)與圖(5.4d)所示。



(a) BioSurplus LP-220B 鹵素燈電源供應器



(b) HP4156A 半導體參數分析儀



(c) 光學顯微鏡與銅座



(d) Zolix 分光儀

Figure 5.4: 實驗儀器

5.2.2 倍增層厚度

5.2.2.1 元件結構與預期結果



此系列元件的結構最為簡單,沒有任何護環,而只有主動區,為元件設計表 (5.1)中,Y座標為8與9的設計圖樣,其具體結構變化依序如圖(5.5)所示。 其擴散輪廓與電流密度模擬依序如圖(4.5)與圖(4.8)所示,為最單純的平面結 構。此外,雖然圖(4.6a)為擊穿電壓與崩潰電壓與倍增層厚度之模擬結果,但該 模擬所使用的磊晶結構為原先設計之磊晶結構圖(4.13),而非由磊晶廠提供的實 際樣品磊晶結構圖(5.3)。而由圖(5.3)中磊晶結構模擬得出的擊穿電壓、崩潰 電壓與倍增層厚度的關係如圖(5.6)所示。



(a) Y 座標為 8 之小電極與擴散輪廓變化圖



(b) Y 座標為9之大電極與擴散輪廓變化圖

Figure 5.5: 元件結構圖

元件結構圖(5.5)中顯示了兩組設計,Y座標為8之設計為小電極設計,而 Y座標為9之設計為大電極設計,兩者差別僅在於金屬電極是否有超過中央區之 擴散。此外,這兩組設計之中央主動區光罩開口寬度皆為240μm,然而由於鋅除 了向下擴散以外,也應會向兩側擴散,所以無法確定金屬電極下方所佔之鋅擴散 比例。圖中A、B與C三點為可能的擊穿與崩潰電壓發生位置,綠色表示發生擊 穿位置,紅色表示發生崩潰位置。理想擴散具有水平對稱性,所以A與C之電性



Figure 5.6: 以實際樣品磊晶結構模擬的擊穿電壓、崩潰電壓與倍增層厚度之關係

應完全相同。而不論電極設計為何,依據圖(5.6)之預測,A、B與C三點應該 同時擊穿下方電荷層,至於崩潰則應該是邊緣之A、C兩點先發生,再來才是中 央區B點發生崩潰。

此外,元件設計表(5.1)中的 x 座標為(1,2,3)以及擴散為(1,2,1&2)指的 是,元件製作時經歷的擴散道次。也就是說, x 座標為1的元件只有經歷第1次 擴散, x 座標為3的元件則依序經歷了第1次與第2次擴散,使其鋅擴散較深, 倍增層較薄。元件結構圖(5.5)即呈現了擴散深度依 x 座標遞增順序而應有的變 化。

5.2.2.2 量測結果

由於時間有限,因此我僅隨機挑選數個元件量測電性,如圖(5.7)所示,圖 中黃圈為已量過的元件。



Figure 5.7: 量測元件分佈圖, 黃圈為已被量測過的元件。

圖(5.8)為I-V量測結果,可以看見幾乎所有元件在5V內即崩潰,此現象 是模擬電性圖(5.6)所不預期的。其短路原因可能是圖(5.5)中的電極附近有大



Figure 5.8: 暗電流量測結果

量正電荷所造成的提前表面崩潰與漏電流。此正電荷可能來源為:

- 1. 圖(5.5)中深藍色部分的氮化物擴散壁上有殘餘正電荷。
- 使用乾蝕刻挖出電極與鋅擴散區之接觸孔時,乾蝕刻氣體與 InP 或周圍的氮 化物反應生成正電荷。

倘若是原有氮化物擴散壁上有殘餘正電 荷,那麼就無法解釋為何可於隨後其他元件量 測到正常電性,因此我推測比較有可能是乾蝕 刻造成之正電荷累積。除此之外,也可能是如 圖(4.8b)所示之表面崩潰,但是卻沒有在以實 際元件磊晶結構之模擬結果觀察到此現象。如 圖(5.6)所示,平面結構之邊緣崩潰電壓隨著 倍增層厚度遞增,而非圖(4.6a)所示的情況, 倍增層足夠厚時即開始發生表面崩潰。



Figure 5.9: 暗電流量測結果對量 測次序之變化

除此之外,我也觀察到量測次序對結果之 影響,如圖(5.9)所示,各條同色曲線表示不

同的量測次序。以紫線代表之4933元件為例,第一次量測時之暗電流,在5.6V時發生崩潰。這時電流並沒有爆增至100μA,而是暴增約100倍至10nA後,即 較緩慢地上升,隨後又在41V崩潰。第二次量測時變成於0.77V崩潰,並且電 流直接爆增至100µA。由於並沒有在其他元件量測中觀察到此現象,所以排除了 探針因素,推測應為電極附近有顯著電荷積累現象所導致。綜上所述,上述數據 無法觀察倍增層厚度效應,我認為比較有可能使元件提前崩潰的原因是,電極製 程使得電極附近有殘餘正電荷,而這些殘餘正電荷進一步造成提前崩潰,我將在 第5.4.2節詳細說明表面漏流理論、模型與模擬結果。

5.2.3 主動區直徑

5.2.3.1 元件結構

如元件結構圖(5.10)與圖(5.11)所示,此為設計表(5.1)中Y座標為4、 6、7的元件,其中Y為4之元件因為先擴散直徑較小的主動區,再擴散直徑較大 的側護環,所以其側護環較Y為6、7之元件為淺。這幾組元件有側護環也有懸 護環,其中除了主動區直徑有所不同以外,其餘幾何結構皆相同。圖中也標示了 與 InP 接觸之電極位置、氮化物上方的金屬電極位置等。



Figure 5.10: 側護環較淺的元件結構圖 (Y座標為4), 圖中A至G點為可能的擊 穿與崩潰發生位置。



Figure 5.11: 側護環較深的元件結構圖 (Y座標為6與7), 圖中A至G點為可能 的擊穿與崩潰發生位置。

目前已量測之元件如圖(5.12)所示,由於元件數量繁多,所以在此僅呈現 部分元件電性結果,如圖(5.13)所示。從圖(5.13)可見主動區直徑為1600μm 的元件都已損毀,沒有正常電性。50μm 與200μm 元件則有異常的提前擊穿現 象,甚至還有嚴重漏電流的淺側護環(Y為4區)之200μm 元件,詳見第5.4.2節 之分析。



(a) Y 為 4 區 (淺側護環)



(b) Y 為 6、7 區 (深側護環)





Figure 5.13: 電流量測結果,Y 為 4、6、7。

5.2.3.3 暗電流比例

除了主動區面積以外,其餘結構尺寸完全相同,所以推測此系列元件的暗電 流應與側護環面積成正比。為了比較暗電流與主動直徑的關係,我們挑選幾組電 性較正常的量測結果來分析,並且在不同偏壓下取電流對直徑做對數圖,依序如 圖(5.14)、圖(5.15)與圖(5.16)所示。



Figure 5.14: 較有參考價值的 I-V 電性比較



Figure 5.15: 暗電流與直徑的關係,Y為4區(淺側護環)

假設電流 I 與直徑 D 之關係為:

$$I = \pi \left(D/2 \right)^2 J_{\text{bulk}} + \pi D J_{\text{surface}}$$
(5.1)

那麼在相同偏壓下,不同直徑 D 之元件電流應有著如下關係:

$$\log_{10} (I) \approx \begin{cases} \log_{10} (D) + \log_{10} (\pi J_{\text{surface}}), & \text{if surface leakage dominates} \\ 2\log_{10} (D) + \log_{10} \left(\frac{\pi}{4} J_{\text{bulk}}\right), & \text{if bulk current dominates} \end{cases}$$
(5.2)

從圖 (5.15) 與圖 (5.16) 可見,這些元件的暗電流基本上都是以表面漏電流為



Figure 5.16: 暗電流與直徑的關係, Y 為 6、7 區 (深側護環)

主,全對數圖斜率都約為1,其電流密度大的區域大多是沿著元件的圓柱表面。 此外,以深側護環(Y為6與7)之擊穿前電流而言,半徑越小,其斜率逐漸由1 轉變為1/3,也就是有著 I ~ D^{1/3} 的關係,不過擊穿後就沒有如此關係。一個可 能的解釋為,50 μm 元件在擊穿之前的暗電流機制與其他元件不同,除此之外皆 相同。然而我目前並沒有想到之所以如此的進一步可能原因。

5.2.3.4 擊穿、崩潰與降電流電壓

如元件結構圖(5.10)與 圖(5.11)所示,雖然可能的 擊穿位置為A至G點,但是因 為側護環下方的倍增層厚度約 為1.8μm,而根據圖(5.6), 其對應擊穿電壓約為80V, 所以在元件崩潰前可能不會 觀察到護環擊穿現象,詳見 第5.4.4節。也就是說,只有元 件結構圖中的C、D、E點可能 發生擊穿。

除了擊穿電壓與崩潰電壓 以外,我們從圖(5.13)也有



Figure 5.17: Y 為 4 區之擊穿、崩潰與降電流電壓 統計圖,右下圖為各直徑的平均電性 分佈趨勢。

83



Figure 5.18: 擊穿、崩潰與降電流電壓統計圖。這裡僅有直徑為 50 μm 至 800 μm 的元件數據,至於 1600 μm 元件則有嚴重漏電流現象而無法量測。此 外,右下圖為各直徑的平均電性分佈趨勢。

看見提前擊穿現象,我將此命名為 V_{pt2},也可從圖(5.14b)的光電流觀察到 崩潰前的電流下降現象,我將電流開始下降的電壓命名為「降電流電壓」,V_r (reduced-current voltage),量測統計結果如圖(5.17)與圖(5.18)所示。圖中為 上述四種電壓對元件於晶圓上的水平 X 座標作圖,最後再將各直徑元件各電壓的 平均值與標準差對直徑作圖。

由圖(5.18)可觀察到擴散均勻性應該不錯,各電壓大致都與水平X座標無 關。然而,擊穿電壓卻隨著直徑遞增;擴散光罩開口直徑越小,擴散越深,使 得倍增層厚度更小,擊穿電壓越小。從圖(5.18)來看,雖然最大與最小的擊 穿電壓則有將近10V的落差,但若以圖(5.6)中的擊穿電壓與倍增層厚度模 擬來看,其實擴散深度大概也僅差了約0.12 μm,並不是很顯著。並且,不論 側護環深度為何,崩潰電壓分佈大致上也與直徑無關。倘若元件游離係數介於 Cook [103]與 Taguchi [108]所量數據之間,那麼此現象也與圖(5.6)中,擊穿電 壓位於25-35V範圍內的崩潰電壓分佈一致。最後,除了800 μm 元件,其他的 元件都有觀察到崩潰前的降電流現象,詳見第5.4.4節的分析。至於提前擊穿現象 則隨機分佈。由於側護環下方之 InP 相當厚,所以提前擊穿現象不可能是側護環 所導致,其中一個可能是電荷層磊晶時的不均勻所造成,詳見第5.4.3節。

84

5.2.4 懸護環距離

5.2.4.1 元件結構與預期結果



我們設計了淺與深側護環的變化懸護環結構,其中針對深側護環結構做 TCAD 模擬,如圖(5.19)、圖(5.19)所示。從模擬 I-V 圖(5.20a)可看見,擊 穿電壓與崩潰電壓都不隨懸護環距離而改變,但是崩潰前卻都有降電流現象,如 圖(5.20b)所示,第5.4.4節會詳細說明此現象。因此,單就擊穿電壓與崩潰電壓 而言,懸護環似乎都沒有效果。這可能是因為我們模擬的懸護環不夠寬,所以才 沒觀察到懸護環對擊穿電壓與崩潰電壓的顯著影響。



(a) 摻雜濃度分佈圖



(b) 崩潰時之電流密度分佈圖

Figure 5.19: TCAD 掺質濃度與電場模擬。





圖(5.21)為深側護環與淺側護環結構的懸護環距離效應分佈圖。由深側護 環數據圖(5.21b)可見,擊穿電壓顯然隨著懸護環越遠而越小,但由淺側護環數 據圖(5.21a)來看,擊穿似乎不受懸護環影響。因此,這可能表示著懸護環效應 與側護環深度有關。側護環越深,懸護環越能影響中央區電場。



Figure 5.21: 擊穿、崩潰與降電流電壓分佈圖

此外,圖(5.21b)顯示了懸護環越近,擊穿電壓 V_{pt}越大,但是懸護環擊穿 電壓 V_r(詳見第5.4.4節)卻越小的擴散開口效應現象。如圖(5.23)與圖(5.22) 所示,對於沒有懸護環的擴散而言,由於擴散開口兩側有許多氣體分子尚未擴散, 所以都會集中到唯一的擴散開口中,使其擴散得最深,擊穿電壓最小。然而,對 於有懸護環的結構而言,懸護環距離越大者,其主動區兩側之擴散壁也越大,所 以留下較多氣體分子,使其鋅擴散較深,擊穿電壓也就較小,但是此擊穿電壓仍 然比沒有懸護環的結構還要高。另外,由於磊晶片尺寸固定,所以懸護環距離越 大者,元件中間的擴散壁越小,使得懸護環擴散深度越淺,造成懸護環擊穿電壓 越大。綜上所述,懸護環越近崩潰電壓越高的現象,可能並不是懸護環對邊緣增 益的抑制表現,而是擴散開口效應使其有著較厚倍增層,也就提高了崩潰電壓。



Figure 5.22: 沒有懸護環的擴散開口效應示意圖





Figure 5.23: 不同懸護環距離造成的擴散開口效應示意圖

5.2.5 側護環深度

5.2.5.1 元件結構與預期結果

如擴散順序差異圖(4.14)所示,先擴散 側護環者,側護環經歷擴散時間較長。極端而 言,倘若沒有側護環,那麼當元件偏壓越來越 大時,寬度不大的中央區很可能沒有足夠大的 空乏區影響懸護環,並且也會讓中央區發生邊 緣崩潰。因此我們預期,先擴散側護環,使得 側護環較深者,擁有較大的崩潰電壓,即抑制 了邊緣崩潰。因此,我們藉由 Taguchi 游離係 數 [108] 與 TCAD,模擬了不同側護環深度的 結構,其中,中央區倍增層厚度均為 0.4 μm, 如圖(5.25)所示。



Figure 5.24: TCAD 之 I-V 電性圖



(a) 摻雜濃度分佈圖

(b) 40 V 時之電場分佈圖

Figure 5.25: TCAD 摻質濃度與電場模擬。白色細線為空乏區邊界,區域顏色越紅 則該物理量越大,顏色越藍則越小。

由其 I-V 圖 (5.24) 可清楚看見, 側護環確實能夠提升崩潰電壓。雖然此崩 潰電壓仍低於圖 (5.6) 中的理想中央區崩潰, 但卻明顯比其邊緣崩潰電壓——圖 (5.24) 中藍線——還要高出 5 V 左右。進一步而言,圖 (5.26) 為倍增層的中央 區與邊緣區的電場變化圖,圖 (5.26a) 為取點位置,而圖 (5.26b) 則為中央區與 邊緣區電場的比例分佈,可看見側護環越深,邊緣之於中央電場比值越小,所以 邊緣崩潰的抑制效果越好。



Figure 5.26: 中央電場與邊緣電場隨元件偏壓的變化

除了由邊緣電場與中央電場的比例變化來分析側護環效果以外,也可以用增 益來觀察其效果。我們以圖(5.26a)中兩點之鉛直切線上的各電壓下的電場分佈, 代入方程式(4.14)以計算元件實際電洞增益 M_p。如圖(5.27a)所示,可見側護 環能抑制邊緣增益,並且中央增益下降幅度較小,所以確實能有效提高元件整體 增益,詳見第5.2.8節。此外,通常以擊穿後的光電流平坦區作為增益為1的參考 點,如圖(5.27b)所示,然而,只要有電場,元件實際增益就必然大於1。從圖 (5.27a)也可看見,元件在擊穿後的增益為1.37-1.41,所以若將光電流平坦區起 點增益定為1,再將後續電流與其相除計算相對增益,那麼其相對增益必然小於 實際增益,可參考第5.2.8節的說明。



Figure 5.27: 增益變化示意圖

圖(5.28)與圖(5.29)為側護環深度實驗數據圖。圖中的Active→AGR 是指 先擴散主動區,再擴散側護環的元件,也就是側護環深度較淺的元件。由圖可見 深側護環的崩潰電壓較大,與前述模擬結果相同。由此可知,深側護環較能夠抑 制邊緣崩潰,而對於擊穿電壓則似乎沒有顯著影響。



Figure 5.28: 擊穿、崩潰與降電流電壓分佈圖(不同主動區直徑)



Figure 5.29: 擊穿、崩潰與降電流電壓分佈圖(不同懸護環距離)
5.2.6 側護環直徑

5.2.6.1 元件結構與預期結果



此系列元件為固定主動區直徑與懸護環離側護環的距離,但是改變側護環直徑,其模擬結構與電性如圖(5.30)、圖(5.31)所示。我們模擬了四種不同側護環半徑的元件,分別是9μm、10μm、11μm、12μm。由 I-V 電性圖(5.31)可知,不論側護環直徑為何,其主動區擊穿電壓與崩潰電壓皆不變。也就是說,比起側護環直徑,其深度對抑制邊緣崩潰更為重要。此外,根據第5.4.4節的分析,我們知道崩潰前的降電流電壓與懸護環擊穿電壓正相關,而由於側護環與懸護環之間的間隔相同,所以側護環直徑的不同,並不會影響到懸護環擊穿。



(a) 掺質濃度分佈圖

(b) 崩潰時之電場分佈圖

Figure 5.30: TCAD 摻質濃度與電場模擬, 白色細線為空乏區邊界。



Figure 5.31: TCAD 模擬 I-V 電性圖

量測結果如圖(5.32)、圖(5.33)所示。圖(5.32)中的週期現象是來自擴散 光罩的設計是每三個一組,如表(5.1)所示,由左而右為側護環直徑(AGR)遞 減方向。將相同側護環直徑的電性加總平均後,可繪出圖(5.33)數據。可以看 到隨著側護環直徑越大,崩潰電壓也越大,而這與先前在主動區直徑(第5.2.3節) 所觀察到的現象一致,即擴散開口越小,擴散得越深,擊穿電壓越小。

此外,崩潰前降電流電壓 V_r 也隨著擊穿電壓上升。事實上,根據第5.4.4節的 討論,我們可以知道崩潰前降電流電壓 V_r 就是懸護環擊穿電壓。而懸護環擊穿電 壓與側護環深度有直接關係,懸護環擊穿電壓 V_r 越大,表示懸護環越淺。由此可 更加確定擴散開口越大者,擴散深度越深的結論。



Figure 5.32: 擊穿、崩潰與降電流電壓空間分佈圖



Figure 5.33: 擊穿、崩潰與降電流電壓趨勢圖

由於表(5.1)中的電極設計一元件皆短路,所以僅有電極設計二一一的結 果,如圖(5.34)與圖(5.35)所示。由此可見不論懸護環上方有無金屬電極,皆 不影響懸護環之空乏區,也就不影響其擊穿與崩潰電性。此外,因為電極下方的 氮化層厚度為0.35 µm,詳見樣品磊晶結構圖(5.3),所以這表示著0.35 µm 之氮 化層足以屏蔽電極對懸護環的影響。此外,這似乎也表示了其電極下方的氮化層 並沒有正電荷,其正電荷造成的漏電流效應則詳見第5.4.2節的討論。



Figure 5.34: 電極示意圖



Figure 5.35: 電性比較圖

設計護環的目的為抑制邊緣崩潰,而之所以需要抑制邊緣崩潰,是因為倘若 邊緣區比中央區還要提早崩潰,提前達到足夠高的增益,那麼此元件的增益將會 比中央區先崩潰的增益還要來得小。如圖(5.36)所示,假設電流密度皆為J₀, 那麼元件的平均增益為

$$M_{\rm avg} \approx \frac{A_{\rm center} M_{\rm center} J_0 + A_{\rm edge} M_{\rm edge} J_0}{(A_{\rm center} + A_{\rm edge}) J_0}$$
(5.3)

由於只有當增益上升數倍時,才能夠觀察到電流暴增現象,因此,



Figure 5.36: 元件之 PN 接面示意圖

1. 若邊緣區先於 $0.9V_b$ 達到足夠高的增益 $M_{0.9V_b}$,則 $M_{0.9V_b} = M_{edge} \gg M_{center}$:

$$M_{\text{avg,edge}} \approx \frac{A_{\text{edge}} M_{\text{edge}}}{A_{\text{center}} + A_{\text{edge}}} = \frac{A_{\text{edge}}}{A_{\text{center}} + A_{\text{edge}}} M_{0.9V_b}$$
(5.4)

2. 若中央區先於 $0.9V_b$ 達到足夠高的增益 $M_{0.9V_b}$, 則 $M_{0.9V_b} = M_{center} \gg M_{edge}$:

$$M_{\text{avg,center}} \approx \frac{A_{\text{center}} M_{\text{center}}}{A_{\text{center}} + A_{\text{edge}}} = \frac{A_{\text{center}}}{A_{\text{center}} + A_{\text{edge}}} M_{0.9V_b}$$
(5.5)

doi:10.6342/NTU201904385



$$M_{\rm avg, edge} \gg M_{\rm avg, center}$$

通常是將光電流平坦區起始點的增益定義為1,此時的電壓名為Vm1,然而因 為只要有電場,那麼就會有撞擊游離現象,所以實際上此時增益必然比1 還要大, 可參考第5.2.5節的增益討論。倘若此假設成立,那麼就能夠將後續電壓下之電流 與 V_{m1} 之電流相除,就可以得到元件的(相對)增益:

Relative gain at
$$V \equiv \frac{I(V > V_{m1})}{I(V_{m1})}$$
 (5.7)

然而,在我們的元件中,有不少元件都有著崩潰前之降電流現象,如元件空間分 佈圖(5.58a)所示。圖中的淡藍色圓圈為已量測的元件,藍色三角形為發生崩潰 前降電流現象的元件標記。有些元件的降流電壓比 0.9V% 還要小,如圖 (5.37b) 所示,所以為了比較所有元件的相對增益,我以 0.8Vb 為參考電壓,而不以傳統 的 0.9V6 為參考電壓。



Figure 5.37: 增益估算示意圖

由此可以得到圖(5.38)與圖(5.39)的結果,由圖(5.38)所示,側護環越 深,增益越高,並且主動區面積越大,則依據方程式(5.4)與方程式(5.5)遞 減。此外,根據圖(5.39),懸護環越近,元件增益反而越小,所以先前於懸護環 距離一節(5.2.4)得到的崩潰電壓隨懸護環距離遞減的結果,其實並不是懸護環 抑制邊緣崩潰所導致的,而是基於擴散開口效應造成的現象。總而言之,較深的 側護環能夠有效抑制邊緣崩潰,提高元件增益,但是懸護環則不利於抑制邊緣崩 潰。



Figure 5.38: 不同側護環深度之增益比較圖



Figure 5.39: 不同懸護環距離之增益比較圖

5.3 暗電流分析

雖然僅有少數幾個元件的擊穿與崩潰電壓符合模擬結果,但倘若能將其與現 有物理模型擬合,或許也能更了解究竟是何種機制主導著元件的暗電流。如先前 的描述,在 SAGCM 結構下之暗電流成分理應由缺陷輔助穿隧效應為主,所以這 章將會說明如何由 Hurkx 的缺陷輔助穿隧模型推導出適合擬合 I-V 實驗數據的解 析公式。

5.3.1 擬合公式

在第3.3.2節,我們已詳細推導考慮缺陷輔助穿隧機制的 SRH 復合模型方程式 (3.94)。為了進一步化簡,我們假設將其中一種載子的穿隧倍增因子 Γ 換成另一 種載子的 Γ 後,其 SRH 復合速率仍約為相同。例如將 Γ_n 改為 Γ_p ,可得

$$R_{\text{SRH}} = \frac{np - n_i^2}{\frac{\tau_{p0}}{1 + \Gamma_p} (n + n_1) + \frac{\tau_{n0}}{1 + \Gamma_n} (p + p_1)}$$

$$\approx \frac{np - n_i^2}{\frac{\tau_{p0}}{1 + \Gamma_p} (n + n_1) + \frac{\tau_{n0}}{1 + \Gamma_p} (p + p_1)}$$
(5.8)

倘若上述近似成立,那麼有可能是因為:

1. $\Gamma_n \approx \Gamma_p$

2. $\tau_p \gg \tau_n$, $E_T - E_i \ll kT$, $\Gamma_p \gg \Gamma_n \rightarrow n + n_1 \approx p + p_1$

3. $E_T - E_i \gg kT \rightarrow n + n_1 \gg p + p_1 \rightarrow \tau_n(p + p_1) \ll \tau_p(n + n_1)$

也就是說,方程式 (5.8)的成立並不邏輯蘊涵 $\Gamma_n \approx \Gamma_p$ 。總而言之,倘若方程式 (5.8)近似成立,那麼就可進一步得出:

$$R_{\rm SRH} \approx (1 + \Gamma_p) R_{\rm SRH,0}, \quad R_{\rm SRH,0} \equiv \frac{np - n_i^2}{\tau_{p0}(n + n_1) + \tau_{n0}(p + p_1)}$$
 (5.9)



其中, A 為元件主動區面積, d 為空乏區厚度。根據 C.T. Sah [124], 在空乏區中, 由於 $E_{fp} - E_{fn} \gg kT$,所以可得

$$R_{\rm SRH,0} \approx -\frac{n_i}{\sqrt{\tau_{p0}\tau_{n0}}} \left[2\cosh\left(\frac{E_T - E_i}{kT} + \frac{1}{2}\ln\frac{\tau_{p0}}{\tau_{n0}}\right) \right]^{-1}$$
(5.11)

重要的是, R_{SRH,0} 不再是位置的函數, 所以可將其提出方程式(5.10)中的積分項,由此可得:

$$I_{\text{SRH}} \approx Aq |R_{\text{SRH},0}| (d+d_{\text{TAT}}), \quad d_{\text{TAT}} \equiv \int_0^d \Gamma_p(x) dx$$
 (5.12)

也就是說,倘若 $d_{TAT} \gg d$,則表示缺陷輔助效應十分顯著。根據 Hurkx [71],倘若電場沒有太大(對矽而言,此臨界電場約為 $9 \times 10^5 \text{ V/cm}$),那麼可進一步將穿 隧倍增因子 $\Gamma_{n,p}$ 近似為:

$$\Gamma_{n,p} \approx 2\sqrt{3\pi} \frac{|F|}{F_{\Gamma}} \exp\left[\left(\frac{F}{F_{\Gamma}}\right)^2\right], \quad F_{\Gamma} \equiv \frac{\sqrt{24m_{n,p}^*(kT)^3}}{q\hbar}$$
 (5.13)

假設空乏區內摻質濃度為定值 ND, 那麼根據高斯定律

$$\frac{dF}{dx} = \frac{qN_D}{\epsilon} \tag{5.14}$$

以及簡單的變數變換,就能將等效穿隧厚度 d_{TAT} 表示為

$$d_{\text{TAT}} = \int_{F_1}^{F_2} 2\sqrt{3\pi} \frac{|F|}{F_{\Gamma}} \exp\left[\left(\frac{F}{F_{\Gamma}}\right)^2\right] dx$$

$$= \frac{\sqrt{3\pi}\epsilon F_{\Gamma}}{qN_D} \left\{ \exp\left[\left(\frac{F_1}{F_{\Gamma}}\right)^2\right] - \exp\left[\left(\frac{F_2}{F_{\Gamma}}\right)^2\right] \right\}$$
(5.15)



最後,考慮半導體本質載子濃度與溫度的關係,

$$n_i(T) = \sqrt{N_{c300} N_{v300}} \left(\frac{T}{300}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{E_g(T)}{2kT}\right]$$
(5.17)

即得到最終能用以擬合 I-V 實驗數據,求得最佳參數的解析方程式:

$$I_{\text{SRH}}(V, T, \tau_{n0}, \tau_{p0}) = \frac{Aqn_i(T)}{\sqrt{\tau_{p0}\tau_{n0}}} \left[2\cosh\left(\frac{E_T - E_i}{kT} + \frac{1}{2}\ln\frac{\tau_{p0}}{\tau_{n0}}\right) \right]^{-1} \left[d + d_{\text{TAT}}(V) \right]$$
(5.18)

值得注意的是,因為等效穿隧厚度 d_{TAT} 是電壓的函數,需要有電壓與電場 F₁、F₂的關係,所以 d_{TAT}(V) 需要由 TCAD 得到。因此,我們需要先有元件磊晶濃度, 再代入 TCAD 模擬倍增層與吸收層的電位分佈與端電場的關係。



5.3.2 定溫擬合

Figure 5.40: 100 µm 元件定溫擬合分析

圖(5.40)為針對擊穿與崩潰電壓恰好符合模擬結果的元件 I-V 數據所進行 的定溫擬合結果(元件代碼為 1732),其倍增層厚度為 0.436 μm。從圖(5.40a) 可見,此元件在崩潰前之暗電流 *I*(0.9V_b) 約為 1.7 nA,滿足我們先前的 500 nA 需 求。擊穿前之暗電流皆為 InP 的 SRH 復合電流,並且由圖 (5.40b) 可見,崩潰前 之缺陷輔助穿隧效應十分顯著,即 $d_{TAT} \gg d$,因此我們擬合的方式為先由 Python 擬合求出最可能的缺陷能井 E_T 、原初生命期 $\tau_{n,p0}$,再代入 TCAD 中微調參數, 其參數列於表 (5.2) 中。崩潰前之暗電流成分則為崩潰效應造成的電流為主,即 下式

$$I_{\text{avalanche}} = Aq \int_0^d G_{\text{avalache}}(x) dx = Aq \int_0^d \left(\alpha_n n v_n + \alpha_p p v_p\right) dx$$
(5.19)

因此,吸收層的暗電流不僅不是由能帶穿隧效應為主(圖中沒有此條曲線),也不 是 SRH 復合效應造成的暗電流,反而是無法避免的崩潰電流。不過這並不表示崩 潰電流與吸收層無關。事實上是有關係的,具體來說,倘若我們改變吸收層之缺 陷能井 E_T,那麼崩潰電流也會隨之改變。這可以從方程式(5.19)中的載子濃度 n、p 來理解其影響。吸收層之 SRH 復合電流越大,吸收層貢獻產生更多電子電 洞對,使得元件達穩定態時之倍增層載子濃度勢必也跟著變得更多。

Table 5.2: 100 µm 元件之 TCAD 擬合參數

100 µm	InP	In _{0.53} Ga _{0.47} As
E_T	-0.02 eV	0.195 eV
$ au_{p0}$	6 ns	14.6 ns
$ au_{n0}$	0.1 ns	180 ns

然而,因為崩潰前暗電流並非以 SRH 復合電流效應為主,所以其實沒辦法使 用方程式(5.18)擬合 I-V 數據,因此,圖(5.40a)中的擊穿後電流是由方程式 (5.18)擬合得到約略正確的電流後,再經由 TCAD 中手動微調參數得來的。

此外,可以看到擊穿時之擬合並不好。因為 TCAD 僅能設定在空間上均勻 分布的缺陷能井,所以實際樣品可能有著不均勻濃度分佈的缺陷能井。或者說, 元件電荷層並沒有那麼均勻,所以擊穿時並不是所有位置之電荷層都同時被擊 穿,而是依序且緩慢地擊穿,如第5.4.3節與圖 (5.55)所示。對於直徑 200 μm 與 800 μm 的元件 I-V 擬合則如圖 (5.41) 與圖 (5.42)所示,代碼依序為 1721 與 1612,分析方法同 100 μm 元件,其參數列於表 (5.3)中。



Figure 5.41: 200 µm 元件定溫擬合分析,倍增層厚度為 0.470 µm。

5.3.3 變溫擬合

我們將代碼為 1412 的 100 μ m 元件拿去做變溫分析,使用 0.436 μ m 的倍增層 厚度與缺陷能井 $E_T = -0.02 \text{ eV}$,得到如圖 (5.45)的結果。由於目前僅有針對缺 陷輔助穿隧模型的擬合方程式,所以沒辦法用最小平方法擬合崩潰前的暗電流, 而只能手動微調崩潰前暗電流模型參數,所以在此就僅有擬合擊穿前暗電流。不 過我們也可由圖 (5.43b)可知,擊穿後之暗電流也有著顯著的缺陷輔助穿隧效應, 至於擊穿前則更為顯著。此外,如圖 (5.44a)所示,其崩潰電壓的變溫係數為 0.111 V/°C,非常接近理論值 0.105 V/°C [120][121]。在 Chau [121] 中有列出符合 Baraff 理論的方程式 (3.123)的 InP 倍增模型參數,其表一中的參考文獻九即為 我們 TCAD 中 Okuto-Crowell 模型所使用的參數,詳見表 (3.9)。雖然 0.105 V/°C 之溫度係數是 [120] 藉由 [121] 中的模型參數得來的。但 Chau 於 [121] 文中提及 了多組參數,所以並不確定何組參數最能描述我們元件的撞擊游離特性。至於圖 (5.44b)則為經由 TCAD 擬合得到的原初生命期與溫度的關係,可以看到其值大 約為 1 – 10 ns,大致符合 Yater 的原初生命期數據 [86],詳見圖 (3.14)。

101



Figure 5.42: 800 μm 元件定溫擬合分析,倍增層厚度為 0.643 μm。



Figure 5.43: 100 µm 元件變溫擬合分析,倍增層厚度為 0.436 µm。



Figure 5.44: 100 μm 元件之崩潰電壓與原初生命期對溫度的關係,倍增層厚度為 0.436 μm。

此外,我也分析了於前年委託全新光電磊晶擴散的元件,名為#T-APD,這 是直徑為240μm 且無護環的平面結構元件,磊晶結構列於表(5.4)。由於只確定 倍增層、漸變層與吸收層皆未摻雜,所以假設其皆等同圖(5.3)中數值。

結構	材料	濃度 (cm ⁻³)	厚度(μm)
倍增層	InP	1.76×10^{14}	0.25
电荷层	InP	$1.6 imes 10^{17}$	0.2
漸變層	$In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}$	$3.53 imes 10^{14}$	0.12
吸收層	$In_{0.53}Ga_{0.47}As$	3.53×10^{14}	3

Table 5.4: #T-APD 磊晶結構

根據圖 (5.45a),因為崩潰前電流很可能有著來自 InP 的崩潰電流,並混合著 SRH 復合電流,所以沒辦法使用方程式 (5.18) 擬合 I-V 數據。雖然 #T-APD 並非 為這次磊晶製作的元件,而是先前製作的元件,但是因為都是委託全新光電公司 磊晶擴散,所以其材料性質應差不多。而這次的擊穿前暗電流 TCAD 模擬所使用 的缺陷能井也同樣是 $E_T = -0.02 \text{ eV}$ 。因此,由全新光電所磊晶成長的倍增層 InP 很可能有著 $E_T = -0.02 \text{ eV}$ 的缺陷能井。

由圖(5.45b)可知,其缺陷輔助效應在擊穿前相當顯著,這是因為倍增層有 著很大的電場,而在擊穿後的吸收層 In_{0.53}Ga_{0.47}As中,缺陷輔助穿隧效應雖然比 較不顯著,但仍與一般的 SRH 復合效應(黑色虛線)維持在相同數量級,所以也 是不可忽略的。

如圖 (5.46a) 所示, #T-APD 之崩潰電壓溫度係數為 0.099 V/K, 與本次 磊晶的 1412 元件崩潰溫度係數 0.111 V/°C 很接近, 同樣非常接近理論值 0.105 V/°C [120][121]。

最後,我們從圖(5.46b)可見,其原初生命期 τ_0 也是落於0.1 - 10 ns 的範圍內。重要的是,可以看到 #T-APD 之 $\tau_{p0} \gg \tau_{n0}$,所以符合擬合方程式的近似條件,即方程式(5.8)。然而,從圖(5.44b)可以看到並沒有這種關係,所以擬合方程式(5.18)並不適合擬合1412元件。事實上,1412元件的TCAD 擬合參數與從擬合方程式(5.18)得來的參數有著明顯的不同,至於 #T-APD 的方程式擬合與TCAD 擬合所得到的生命期參數則差不多。

103







Figure 5.46: 240 µm 元件之崩潰電壓與原初生命期對溫度的關係

5.4 異常電性

5.4.1 短路現象



圖(5.47a)為短路元件在晶圓上的分佈,圖(5.47b)為部分元件的短路電 性。從電性圖可看見其電流在10 V內即快速衝到100μA,這種現象很可能是電 極製程沒有做好,電極直接碰到 PN 接面所造成的。另一方面,我們從短路元件 分佈圖(5.47a)可看見其分佈有著規律的分佈;都是一整組元件短路,而不是零 散幾個元件短路。因此,這可能是光罩沒有對齊元件,或是說金屬接觸電極與 InP 之 PN 接面太過於接近所導致的。換言之,只要有著相同的接觸電極尺寸與側 護環直徑,那麼就都有著短路現象。



Figure 5.47: 短路元件空間分佈與電性圖

5.4.2 漏流現象

圖(5.48a)為漏流元間在晶圓上的分佈,圖(5.48b)為漏流電性。電性圖 中有著六個元件的暗電流與光電流。可以看到元件暗電流有著異常平緩的逐漸 崩潰現象(soft breakdown),圖中黑圓圈即為大致的崩潰起點。而在照光後,元 件還是有著明顯的擊穿現象,所以此漏電流應該不是主動區造成的效應,而是 主動區以外的區域,即便沒有照光,也有著極大電流,因而蓋過了較小的主動 區暗電流。對此,Sudo已於1987年提出InP/InGaAs 雪崩光電二極體的表面漏電 流模型(surface degradation model)[125][126],並且Zeng也於2014年對此使用 Sentaurus TCAD 進行模擬,但是似乎沒有觀察到與我們實驗吻合的 I-V 電性,而 僅僅是電流上升 [127]。因此,本節將依照我們的元件磊晶結構與 Sudo 漏電流模 型進行 TCAD 模擬,並試圖解釋漏流電性。



Figure 5.48: 漏流元件空間分佈與電性圖

5.4.2.1 漏流模型與驗證

圖(5.49)為漏電流之帶電氮化物模型,可以看到氮化層上的正電荷在 InP 表面上感應出大量電子,使得 N 型 InP 表面感應出累積層(accumulation layer),並在 P 型 InP 表面感應出反轉層(inversion layer)。圖(5.51a)為其中四種模擬結構,



(a) 理想元件:氮化物中沒有任何正電荷

(b) 實際元件: 氮化物中有正電荷

Figure 5.49: 漏電流之帶電氮化物模型。可見其空乏區因氮化層之正電荷影響而被 擠壓,增加了邊緣與表面電場。

InP 表面上之氮化物中依序含有 1×10^{14} cm⁻³、 8×10^{16} cm⁻³、 2×10^{17} cm⁻³、 5×10^{17} cm⁻³的正電荷濃度(不參與 SRH 復合反應),它們的 I-V 模擬結果,以及於 30 V 下的電場分佈、電流密度分佈與電子濃度分佈依序如圖(5.50)、圖(5.51)

與圖 (5.52) 所示。其中 I-V 模擬結果還多了 9 × 10¹⁶ cm⁻³ 與 1.5 × 10¹⁷ 種正電荷濃度。

由 I-V 電性圖 (5.50) 可觀察到如實驗數據 圖 (5.48b) 所示的平緩崩潰 (soft breakdown) 現象,我們可由雪崩效應速率 (cm⁻³s⁻¹)分 佈之放大圖觀察這些崩潰的位置。如圖 (5.53) 所示,氦化層中含有的正電荷越多,電極附近 的雪崩效應越顯著。此外,我們從電子濃度圖 (5.52b) 中代表空乏區邊界的白線區域可看出 來,正電荷在 P 型 InP 中造成的反轉層過於顯 著,所以使空乏區難以延伸到鋅擴散區以外, 使得元件總是在電極附近崩潰。不過,實驗數 據圖 (5.48b) 中的漏電流並不一定如 I-V 模擬 圖 (5.50) 那樣地快速上升至 100 μA,這可能是因為:





1. 實際元件的正電荷並非均勻分布在氮化物中。

 根據 Sudo 的實驗,正電荷可能不是累積在氮化物上,而是靠近表面的 InP 中 [125][126]。因此,真實元件內的提前平緩崩潰現象可能是發生在邊緣 區,而非集中發生在電極上。

綜上所述,圖(5.48b)中漏電流可能來自氮化物或 InP 表面附近之正電荷。 倘若之後想確認此漏電流來源,那麼可以參照 Sudo 的作法 [125][126],逐漸蝕 刻氮化物與 InP,同時測量其暗電流,以及藉由光誘導電流(Light Induced Beam Current, LIBC)實驗方法,搭配符合 InP 能隙之波長的光,測量定偏壓下之光電 流空間分佈。



(a) 掺雜濃度分佈圖

(b) 電場分佈圖

Figure 5.51: 漏流現象之 TCAD 模擬。白色細線為空乏區邊界,區域顏色越紅則該 物理量越大,顏色越藍則越小。



(a) 電流密度分佈圖

(b) 電子濃度分佈圖

Figure 5.52: 漏流現象之 TCAD 模擬。白色細線為空乏區邊界,區域顏色越紅則該物理量越大,顏色越藍則越小。



(a) 撞擊游離率分佈全貌

(b) 電極周圍之撞擊游離率分佈放大圖

Figure 5.53: 撞擊游離率分佈圖。顏色越紅,速率越高; 顏色越藍,速率越低。

圖(5.54)為提前擊穿現象與其元件在晶圓上的分佈。由圖(5.54a)可見其 分佈並不均勻,所以應該不是與元件尺寸有直接的關係。而從圖(5.54b)以及圖 (5.18)可見,提前擊穿電壓大小也沒有規律,因此這應該與磊晶,擴散製程之不 均勻性有關。其中一個可能即為電荷層不均勻,使得有的地方濃度較低,或是厚 度較薄,使得元件提前擊穿。



Figure 5.54: 提前擊穿元件空間分佈與電性圖

5.4.3.1 提前擊穿模型與驗證

圖(5.55)為提前擊穿模擬I-V圖,其擴散 結構如圖(5.57)所示,圖(5.56b)為電荷層 隙縫放大圖,隙縫直徑為0.4 µm。由於模擬結 構為圓柱對稱,所以此模擬並非真的為隙縫, 反而是內外徑相差0.4 µm 且厚度0.1 µm 的薄 圓縫。此外,圖(5.57a)為元件在即將崩潰之 45 V時的電場分佈,可以看見隨著主動區直徑 越大,護環離電荷層隙縫越近,由電荷孔隙縫 露出的空乏區越大。圖(5.57b)為元件崩潰時 之電流密度分佈,可以看見有更多電流流經電





荷孔。從模擬 I-V 圖 (5.55) 可見,當電荷層有隙縫時,擊穿前之暗電流即有所起



(a) 掺雜濃度分佈圖

(b) 電荷層隙縫放大圖

Figure 5.56: 提前擊穿現象之 TCAD 摻質濃度



⁽a) 45 V 時的電場分佈圖

(b) 電流密度分佈圖

Figure 5.57: 提前擊穿現象之 TCAD 電場與電流密度

5.4.4 崩潰前之降電流

於元件位置圖(5.58a)上的元件有著如圖(5.60b)所示的崩潰前降電流現 象。簡單來說,這是懸護環的擊穿現象。圖(5.59)與圖(5.60)則為觀察懸護環 距離效應時,所觀察到的懸護環擊穿現象。I-V圖(5.60)中實線為電流,虛線為 懸護環下方之電場。由此可見每當懸護環擊穿時,暗電流就會下降,而這也就跟 著影響到光電流。由此圖可見,懸護環離側護環越遠,懸護環之擊穿電壓也就越 高。因此,懸護環擊穿現象即為崩潰前之降電流現象。



Figure 5.58: 崩潰前降電流元件空間分佈與電性圖



Figure 5.59: 崩潰前降電流之懸護環距離模擬



Figure 5.60: 崩潰前降電流之懸護環擊穿 I-V 圖



$$I_{\text{avalanche}} = q \iiint G_{\text{avalanche}}(x, y, z) dx dy dz$$
(5.20)

其中,撞擊游離效應速率(cm⁻³s⁻¹)為

$$G_{\text{avalanche}} \equiv \alpha_n n v_n + \alpha_p p v_p \tag{5.21}$$

由圖(5.61b)可見,元件在-49V時有著局域最大光電流,但是在-49.5V則有 局域最小光電流,所以我們分析這兩個偏壓下的撞擊游離速率分佈 Gavalanche、載 子濃度與速率等物理量的變化,並且與沒有懸護環的結構比較。由電場分佈變化 圖(5.62)可見,不論有無懸護環,元件偏壓上升都增強了各區域的電場。由圖 (5.63)可見,懸護環使得主動區下方的撞擊游離速率下降。而由電子濃度變化 圖(5.64)、電洞濃度變化圖(5.64)、電子速度變化圖(5.66)、電洞速度變化圖 (5.67)可見,其關鍵在於懸護環擊穿時,使主動區下方載子濃度下降。至於主動 區中的電子與電洞速度則沒有顯著變化,整體而言都是上升的。也就是說,懸護 環擊穿使主動區下方的載子濃度下降,降低了撞擊游離速率,使得元件電流與增 益下降。



Figure 5.61: 懸護環距離 (FGR spacing) 為 6 µm 元件之光電流成分圖



Figure 5.62: 崩潰前降電流之電場 E 於 -49 V、-49.5 V 之變化



Figure 5.63: 崩潰前降電流之撞擊游離率 Gavalanche 於 -49 V、49.5 V 之變化



Figure 5.64: 崩潰前降電流之電子濃度 n 於 -49 V、-49.5 V 之變化



Figure 5.65: 崩潰前降電流之電洞濃度 p 於 -49 V、-49.5 V 之變化



Figure 5.66: 崩潰前降電流之電子速度 v_n 於 -49 V、-49.5 V 之變化



Figure 5.67: 崩潰前降電流之電洞速度 v_p 於 -49 V、-49.5 V 之變化

5.5 量子效率

5.5.1 光源頻譜



為了測量元件在 1550 µm 波長下的量子效率,我們需要先測量光源在 1550 µm 波長下的功率,我們使用的光源為 BioSurplus 之 LP-220B 鹵素燈電源供 應器。根據繞射原理,光譜儀除了會分出 1550 µm 波長的光以外,也會分出其 半波長 775 nm 的光。因此,我們在光譜儀前方放置一片短波長濾鏡,其截止波 長為 1050 nm。最後再將過濾後的光,即 1550 µm 波長的光,藉由光纖入射至 Hamamatsu 的 G12183 series InGaAs PIN 光偵測器中。藉由其光偵測器規格書上提 供的功率頻譜,如圖 (5.68a),我們可進一步藉由光偵測器在未受偏壓時之光電 流,推算出其入射光源功率,由此就能計算出光源功率頻譜,如圖 (5.68b)所 示。



Figure 5.68: 鹵素光源之功率頻譜量測

5.5.2 元件增益

在測量完光源功率頻譜後,我們就能將入射光照射至元件中,並測量其光電流。然而,由於在吸收層因吸收光子而產生之電洞,在被電場送往倍增層之後就 會開始倍增,使我們測量到被放大的光電流 Iph,而非入射光在吸收層當下產生的 光電流 Iph,0,兩者關係為

$$I_{\rm ph} = M_p I_{\rm ph,0} \tag{5.22}$$

因此,真實的元件量子效率應該使用方程式(4.3),即



$$\eta = \frac{I_{\rm ph}h\nu}{q(1-R)MP_{\rm ph}}$$

其中, η 為量子效率, $P_{\rm ph}$ 為照光功率, $I_{\rm ph}$ 為實際量測到的光電流,也就是被倍 增後的光電流,R為元件照光區之反射係數。圖(5.69)為倍增示意圖,由圖可知 對於 InP 倍增層而言,其入射電流為來自 In_{0.53}Ga_{0.47}As 吸收層的光電流 $I_{\rm ph,0}$,經 過倍增後即成為了 $I_{\rm ph}$ 。由於主要是電洞流通往倍增層,所以我們以電洞增益來作 為光電流增益 [122][128],即方程式(5.24):

$$M_{p} \equiv \frac{I_{\rm ph}}{I_{\rm ph,0}} = \left\{ 1 - \int_{0}^{w} \alpha_{p}(x) \exp\left\{ \int_{x}^{w} \left[\alpha_{n}(x') - \alpha_{p}(x')dx' \right] \right\} dx \right\}^{-1}$$
(5.24)



Figure 5.69: 雪崩光電二極體之倍增示意圖

因此,我們挑選了比較符合模擬擊穿電壓與崩潰電壓,並且能適當使用 TCAD 擬合的元件(詳見第5.3節),以上述公式以及電子增益公式計算增益,如 圖(5.70)所示。接著我們再挑選其中任意一點光電流,以及使用該波長下的照 光功率 *P*_{ph}(λ)代入量子效率方程式(5.23),即可得到量子效率。

5.5.3 結果討論

如圖(5.71)所示,我們將800 μ m元件(代碼:3612)做了上述分析。其中, 左上圖為相同光功率,但不同照射光波長的I-V數據。接著以擊穿後之平坦區起 點為參考點 $I_{ph}(\lambda)$,針對這些參考點下的電壓,由圖(5.70)中的增益計算結果求 出增益 M_p ,接著再搭配圖(5.68b)中的鹵素光源功率頻譜 $P_{ph}(\lambda)$,並假設反射



Figure 5.70: 雪崩光電二極體之增益計算

係數 R 為零(因為照光區有抗反射鍍膜),如此即可得量子效率頻譜。以 1550 nm 之量子效率為例:

$$\eta = \frac{I_{\rm ph}h\nu}{q(1-R)MP_{\rm ph}} = 63.7\%$$
(5.25)

此外也可由底下公式簡單求出反應效率 (Responsivity):

Responsivity
$$\equiv \frac{I_{\text{ph},0}}{P_{\text{ph}}} = \frac{I_{\text{ph}}/M_p}{P_{\text{ph}}} \approx \frac{0.83 \ \mu\text{A} \ /1.99}{0.524 \ \mu\text{W}} \approx 0.794 \ \text{A/W}$$
(5.26)

也就是說,此元件在單位增益(正規化)下的反應效率為0.794 A/W。

通常人們會以擊穿後的光電流平坦區起點作為增益為1的點 [129],然而, 這種取法並不保證該點增益必然為1。換言之,這樣的決定方法很可能會使 量子效率超過100%,因為我們在不藉由除以 M_p 以正規化的情況下,直接用 I_{ph} 作為 I_{ph,0},如此得到的會是涵蓋雪崩倍增效應的量子效率 (apparent quantum efficiency),而非真實的量子效率 [130]。因此,這就是我們一開始量到的量子效 率大於100% 的原因。





Figure 5.71: 量子效率頻譜



Chapter 6

結論

本文藉由 Ando 數據 [11], 確定了能帶穿隧效應模型參數。藉由等效質量近似 (Effective-mass approximation)理論推導,確定了 Hurkx 模型所需要的等效質量即 為加速度等效質量。由此分析了元件暗電流,發現到擊穿前暗電流主要由 InP 之 缺陷輔助穿隧效應所主導, 而擊穿後之暗電流則不僅有著來自 In_{0.53}Ga_{0.47}As 的 SRH 復合電流,也有來自 InP 倍增層的雪崩電流。對於護環設計,我們發現:

1. 在相同擴散溫度與時間下,光罩擴散開口越大,擴散深度越淺。

2. 側護環越深, 增益越大, 越能夠抑制邊緣崩潰。

3. 懸護環離側護環越近, 增益越小, 越不利於抑制邊緣崩潰。

因此,倘若要設計能夠抑制邊緣崩潰的護環,那麼建議設計擴散深度比中央區倍 增層還要淺,但是又沒有太淺的側護環。以模擬而言(第5.2.5節),建議中央區與 側護環底下之倍增層厚度依序為 0.4 μm、0.7 μm。此外,並不建議使用懸護環, 因為不僅會減少元件增益,也會造成崩潰前之降電流現象。最後我們也發現:

1. 带正電之氮化層可能會造成嚴重的表面漏電流,提前發生平緩崩潰。

2. 不均勻電荷層可能造成提前擊穿,以及緩慢擊穿現象。

3. 倘若懸護環距離足夠小,那麼會在崩潰前觀察到電流突然降低的現象。

119





Bibliography

- Jeff Hecht. Lidar for self-driving cars. *Optics and Photonics News*, 29(1):26–33, 2018.
- [2] Philip Dabney, David Harding, James Abshire, Tim Huss, Gabriel Jodor, Roman Machan, Joe Marzouk, Kurt Rush, Antonios Seas, Christopher Shuman, et al. The slope imaging multi-polarization photon-counting lidar: Development and performance results. In 2010 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium, pages 653–656. IEEE, 2010.
- [3] John J Degnan. Photon-counting multikilohertz microlaser altimeters for airborne and spaceborne topographic measurements. *Journal of Geodynamics*, 34(3-4):503– 549, 2002.
- [4] John J Degnan. Satellite laser ranging: current status and future prospects. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, (4):398–413, 1985.
- [5] Xiaoli Sun, David R Skillman, Evan D Hoffman, Dandan Mao, Jan F McGarry, Gregory A Neumann, Leva McIntire, Ronald S Zellar, Frederic M Davidson, Wai H Fong, et al. Simultaneous laser ranging and communication from an earth-based satellite laser ranging station to the lunar reconnaissance orbiter in lunar orbit. In *Free-Space Laser Communication and Atmospheric Propagation XXV*, volume 8610, page 861003. International Society for Optics and Photonics, 2013.
- [6] HJ Zwally, Bob Schutz, Waleed Abdalati, James Abshire, Charles Bentley, Anita Brenner, Jack Bufton, Joe Dezio, David Hancock, David Harding, et al. Icesat's

laser measurements of polar ice, atmosphere, ocean, and land. *Journal of Geody namics*, 34(3-4):405–445, 2002.

- [7] Claus Weitkamp. *Lidar: range-resolved optical remote sensing of the atmosphere*, volume 102. Springer Science & Business, 2006.
- [8] Nicolas Gisin, Grégoire Ribordy, Wolfgang Tittel, and Hugo Zbinden. Quantum cryptography. *Reviews of modern physics*, 74(1):145, 2002.
- [9] Ilaria Bargigia, Alberto Tosi, Andrea Farina, Andrea Bassi, Paola Taroni, Andrea Bahgat Shehata, Adriano Della Frera, Alberto Dalla Mora, Franco Zappa, Rinaldo Cubeddu, et al. Time-domain diffuse optical spectroscopy up to 1700 nm using an InGaAs/InP single-photon avalanche diode. In *Optical Biopsy IX*, volume 7895, page 78950C. International Society for Optics and Photonics, 2011.
- [10] GAM Hurkx, FG O'Hara, and MPG Knuvers. Modelling forward-biased tunneling. In ESSDERC'89: 19th European Solid State Device Research Conference, pages 793–796. IEEE, 1989.
- [11] Hiroaki Ando, Hiroshi Kanbe, Masanori Ito, and Takao Kaneda. Tunneling Current in InGaAs and Optimum Design for InGaAs/InP Avalanche Photodiode. *Japanese Journal of Applied Physics*, 19(6):L277–L280, June 1980.
- [12] Carlo Jacoboni and Paolo Lugli. *The Monte Carlo method for semiconductor device simulation*, chapter 2. Springer, 1 edition, 1989.
- [13] N. David Mermin Neil W. Ashcroft. Solid State Physics, chapter 12. Cengage Learning, 1 edition, January 1976.
- [14] Yasunori Saito, Hidefumi Kurata, Hiroshi Kurushima, Fumitoshi Kobayashi, Takuya D Kawahara, Akio Nomura, Tomoyuki Maruyama, and Mitsuyoshi Tanaka. Experimental discussion on eye-safe 1.54 μ m photon counting lidar using avalanche photodiode. *Optical review*, 11(6):378–384, 2004.

- [15] Joshua D Vande Hey. A novel lidar ceilometer: design, implementation and characterisation. Springer, 2014.
- [16] Joe C Campbell. Recent advances in avalanche photodiodes. *Journal of Lightwave Technology*, 34(2):278–285, 2016.
- [17] Federico Capasso. Physics of avalanche photodiodes. In Semiconductors and semimetals, volume 22, pages 1–172. Elsevier, 1985.
- [18] CL Anderson and CR Crowell. Threshold energies for electron-hole pair production by impact ionization in semiconductors. *Physical Review B*, 5(6):2267, 1972.
- [19] Katsuhiko Nishida, Kenko Taguchi, and Yoshishige Matsumoto. InGaAsP heterostructure avalanche photodiodes with high avalanche gain. *Applied Physics Letters*, 35(3):251–253, 1979.
- [20] SR Forrest, M DiDomenico Jr, RG Smith, and HJ Stocker. Evidence for tunneling in reverse-biased III-V photodetector diodes. *Applied Physics Letters*, 36(7):580– 582, 1980.
- [21] Nobuhiko Susa, Hiroshi Nakagome, Osamu Mikami, Hiroaki Ando, and Hiroshi Kanbe. New InGaAs/InP avalanche photodiode structure for the 1-1.6 μm wavelength region. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 16(8):864–870, 1980.
- [22] LW Cook, N Tabatabaie, MM Tashima, TW Windhorn, GE Bulman, and GE Stillman. Low leakage LPE-grown InGaAs/InP avalanche photodiodes. In *Inst. Phys. Conf.*, volume 56, pages 361–370, 1981.
- [23] OK Kim, SR Forrest, WA Bonner, and RG Smith. A high gain In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP avalanche photodiode with no tunneling leakage current. *Applied Physics Letters*, 39(5):402–404, 1981.
- [24] SR Forrest, OK Kim, and RG Smith. Optical response time of In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP avalanche photodiodes. *Applied Physics Letters*, 41(1):95–98, 1982.

- [25] Y Matsushima, K Sakai, and Y Noda. New type InGaAs/InP heterostructure avalanche photodiode with buffer layer. *IEEE Electron Device Letters*, 2(7):179– 181, 1981.
- [26] Y Matsushima, S Akiba, K Sakai, Y Kushiro, Y Noda, and K Utaka. High-speedresponse InGaAs/InP heterostructure avalanche photodiode with InGaAsP buffer layers. *Electronics Letters*, 18(22):945–946, 1982.
- [27] Kazuhito Yasuda, Tatsunori Shirai, Yutaka Kishi, Susumu Yamazaki, and Takao Kaneda. Heterojunction effect on spectral and frequency responses in InP/InGaAsP/InGaAs apd. *Japanese Journal of Applied Physics*, 22(S1):291, 1983.
- [28] JC Campbell, AG Dentai, WS Holden, and BL Kasper. High-performance avalanche photodiode with separate absorption 'grading' and multiplication regions. *Electronics Letters*, 19(20):818–820, 1983.
- [29] Stephen R Forrest. Avalanche photodiode with floating guard ring, August 15 1989.US Patent 4,857,982.
- [30] Hiroaki Ando, Yoshiharu Yamauchi, Hirbshi Nakagome, Nobuhiko Susa, and Horoshi Kanbe. InGaAs/InP separated absorption and multiplication regions avalanche photodiode using liquid-and vapor-phase epitaxies. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 17(2):250–254, 1981.
- [31] AG Chynoweth and KG McKay. Photon emission from avalanche breakdown in silicon. *Physical Review*, 102(2):369, 1956.
- [32] AG Chynoweth and GL Pearson. Effect of dislocations on breakdown in silicon p-n junctions. *Journal of Applied Physics*, 29(7):1103–1110, 1958.
- [33] RL Batdorf, AG Chynoweth, GC Dacey, and PW Foy. Uniform silicon p-n junctions. i. broad area breakdown. *Journal of Applied Physics*, 31(7):1153–1160, 1960.
- [34] G Gibbons and J Kocsis. Breakdown voltages of germanium plane-cylindrical junctions. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 12(4):193–198, 1965.

- [35] HAROLD L Armstrong. A theory of voltage breakdown of cylindrical pn junctions, with applications. *IRE Transactions on Electron Devices*, 4(1):15–16, 1957
- [36] SM Sze and G Gibbons. Effect of junction curvature on breakdown voltage in semiconductors. *Solid-State Electronics*, 9(9):831–845, 1966.
- [37] O Leistiko Jr and AS Grove. Breakdown voltage of planar silicon junctions. *Solid-State Electronics*, 9(9):847–852, 1966.
- [38] JP Donnelly, CA Armiento, V Diadiuk, and SH Groves. Planar guarded avalanche diodes in InP fabricated by ion implantation. *Applied Physics Letters*, 35(1):74–76, 1979.
- [39] Tatsunori Shirai, Susumu Yamazaki, Haruo Kawata, Kazuo Nakajima, and Takao Kaneda. A planar InP/InGaAsP heterostructure avalanche photodiode. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 29(9):1404–1407, 1982.
- [40] Y Liu, STEPHEN R Forrest, VS Ban, KM Woodruff, J Colosi, GC Erikson, MJ Lange, and GREGORY H Olsen. Simple, very low dark current, planar longwavelength avalanche photodiode. *Applied physics letters*, 53(14):1311–1313, 1988.
- [41] Y Liu, Stephen R Forrest, J Hladky, MJ Lange, Gregory H Olsen, and DE Ackley. A planar InP/InGaAs avalanche photodiode with floating guard ring and double diffused junction. *Journal of Lightwave Technology*, 10(2):182–193, 1992.
- [42] Fabio Acerbi, Michele Anti, Alberto Tosi, and Franco Zappa. Design Criteria for InGaAs/InP Single-Photon Avalanche Diode. *IEEE Photonics Journal*, 5(2):1–10, April 2013.
- [43] WTRW Shockley and WT Read Jr. Statistics of the recombinations of holes and electrons. *Physical review*, 87(5):835, 1952.
- [44] AG Chynoweth, WL Feldmann, and RA Logan. Excess tunnel current in silicon Esaki junctions. *Physical Review*, 121(3):684, 1961.

- [45] Xiaoli Ji, Baiqing Liu, Yue Xu, Hengjing Tang, Xue Li, HaiMei Gong, Bo Shen, Xuelin Yang, Ping Han, and Feng Yan. Deep-level traps induced dark currents in extended wavelength $In_xGa_{1-x}As/InP$ photodetector. *Journal of Applied Physics*, 114(22):224502, 2013.
- [46] J Wen, WJ Wang, XR Chen, N Li, XS Chen, and W Lu. Origin of large dark current increase in InGaAs/InP avalanche photodiode. *Journal of Applied Physics*, 123(16):161530, 2018.
- [47] A Liu and Y Rosenwaks. Excess carriers lifetime in inp single crystals: Radiative versus nonradiative recombination. *Journal of applied physics*, 86(1):430–437, 1999.
- [48] GAM Hurkx, HC De Graaff, WJ Kloosterman, and MPG Knuvers. A new analytical diode model including tunneling and avalanche breakdown. *IEEE Transactions on electron devices*, 39(9):2090–2098, 1992.
- [49] GJ Van Gurp, PR Boudewijn, MNC Kempeners, and DLA Tjaden. Zinc diffusion in n-type indium phosphide. *Journal of applied physics*, 61(5):1846–1855, 1987.
- [50] LL Chang and HC Casey Jr. Diffusion and solubility of zinc in indium phosphide. *Solid-State Electronics*, 7(6):481–485, 1964.
- [51] Tihomir Knežević and Tomislav Suligoj. Analysis of electrical and optical characteristics of inp/ingaas avalanche photodiodes in linear regime by a new simulation environment. In 2016 39th International Convention on Information and Communication Technology, Electronics and Microelectronics (MIPRO), pages 28–33. IEEE, 2016.
- [52] TCAD Sentaurus. Sprocess user guide, ver. L-2016.03, Synopsys, 2016.
- [53] S R Forrest, R F Leheny, R E Nahory, and M A Pollack. In_{0.53}Ga_{0.47}As photodiodes with dark current limited by generation-recombination and tunneling. *Applied Physics Letters*, 37(3):322–325, August 1980.
- [54] Yoshifumu Takanashi, Minoru Kawashima, and Yoshiji Horikoshi. Required Donor Concentration of Epitaxial Layers for Efficient InGaAsP Avalanche Photodiodes. Japanese Journal of Applied Physics, 19(4):693–701, April 1980.
- [55] J P Donnelly, E K Duerr, K A Mcintosh, E A Dauler, D C Oakley, S H Groves, C J Vineis, L J Mahoney, K M Molvar, P I Hopman, K E Jensen, G M Smith, S Verghese, and D C Shaver. Design Considerations for 1.06-μm InGaAsP–InP Geiger-Mode Avalanche Photodiodes. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 42(8):797– 809, August 2006.
- [56] Simon Verghese, Joseph P Donnelly, Erik K Duerr, K Alex McIntosh, David C Chapman, Christopher J Vineis, Gary M Smith, Joseph E Funk, Katharine Estelle Jensen, Pablo I Hopman, David C Shaver, Brian F Aull, Joseph C Aversa, Jonathan P Frechette, James B Glettler, Zong Long Liau, Joseph M Mahan, Leonard J Mahoney, Karen M Molvar, Frederick J O Donnell, Douglas C Oakley, Edward J Ouellette, Matthew J Renzi, and Brian M Tyrrell. Arrays of InP-based Avalanche Photodiodes for Photon Counting. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 13(4):870–886, September 2007.
- [57] J J Liou. Modeling the tunneling current in reverse-based p/n junctions. Solid State Electronics, 33(7):971–972, 1990.
- [58] G A M Hurkx. On the modeling of tunneling currents in reversed-biased p-n junctions. *Solid State Electronics*, 32(8):665–668, 1989.
- [59] TCAD Sentaurus. Sdevice user guide, ver. *L-2016.03, Synopsys*, 2016.
- [60] John L. Moll. Physics of Semiconductors, pages 248–249. McGraw-Hill, third edition, 1970.
- [61] EO Kane. Zener tunneling in semiconductors. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 12(2):181–188, 1960.
- [62] John L. Moll. Physics of Semiconductors. McGraw-Hill, 1970.

- [63] Joseph W Parks, Arlynn W Smith, Kevin F Brennan, and Larry E Tarof. Theoretical study of device sensitivity and gain saturation of separate absorption, grading, charge, and multiplication InP/InGaAs avalanche photodiodes. *IEEE transactions* on electron devices, 43(12):2113–2121, 1996.
- [64] Sajal Paul, JB Roy, and PK Basu. Empirical expressions for the alloy composition and temperature dependence of the band gap and intrinsic carrier density in $Ga_xIn_{1-x}As$. *Journal of applied physics*, 69(2):827–829, 1991.
- [65] L Pavesi, F Piazza, A Rudra, JF Carlin, and M Ilegems. Temperature dependence of the InP band gap from a photoluminescence study. *Physical Review B*, 44(16):9052, 1991.
- [66] R Benzaquen, S Charbonneau, N Sawadsky, AP Roth, R Leonelli, L Hobbs, and G Knight. Alloy broadening in photoluminescence spectra of $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ lattice matched to InP. *Journal of applied physics*, 75(5):2633–2639, 1994.
- [67] Ankit Rohatgi. Webplotdigitizer, 2011.
- [68] EN Korol et al. Ionization of impurity states in semiconductors by an electric field. Sov. Phys. Solid State, 8:1327, 1977.
- [69] WW Anderson and HJ Hoffman. Field ionization of deep levels in semiconductors with applications to $Hg_{1-x}Cd_xTe$ p-n junctions. *Journal of applied physics*, 53(12):9130–9145, 1982.
- [70] G Vincent, A Chantre, and D Bois. Electric field effect on the thermal emission of traps in semiconductor junctions. *Journal of Applied Physics*, 50(8):5484–5487, 1979.
- [71] G A M Hurkx, D B M Klassen, and M P G Knuvers. A New Recombination Model for Device Simulation Including Tunneling. *IEEE transactions on electron devices*, 39(2):331–338, February 1992.

- [72] OKB Lui and P Migliorato. A new generation-recombination model for device simulation including the Poole-Frenkel effect and phonon-assisted tunnelling. *Solid-State Electronics*, 41(4):575–583, 1997.
- [73] Robert Allan Smith. *Wave mechanics of crystalline solids*, chapter 11. Chapman & Hall, 2 edition, 1963.
- [74] Robert Allan Smith. *Wave mechanics of crystalline solids*, chapter 5. Chapman & Hall, 2 edition, 1963.
- [75] F Bloch. Z. physik 52, 555 (1928); c. zener. Proc. Roy. Soc. London Ser. A, 145:523, 1934.
- [76] John Clarke Slater. Electrons in perturbed periodic lattices. *Physical Review*, 76(11):1592, 1949.
- [77] Nicola Marzari, Arash A Mostofi, Jonathan R Yates, Ivo Souza, and David Vanderbilt. Maximally localized wannier functions: Theory and applications. *Reviews of Modern Physics*, 84(4):1419, 2012.
- [78] Arthur George Milnes. Deep impurities in semiconductors. 1973.
- [79] XD Wang, WD Hu, XS Chen, W Lu, HJ Tang, T Li, and HM Gong. Dark current simulation of inp/in 0.53 ga 0.47 as/inp pin photodiode. *Optical and quantum electronics*, 40(14-15):1261–1266, 2008.
- [80] A Goldberg Yu and NM Schmidt. Handbook series on semiconductor parameters (vol 2) ed m levinshtein et al, 1999.
- [81] LV Keldysh. Deep levels in semiconductors. Sov. Phys. JETP, 18(1):253, 1964.
- [82] Fukunobu Osaka, Takashi Mikawa, and Osamu Wada. Analysis of impact ionization phenomena in InP by Monte Carlo simulation. *Japanese journal of applied physics*, 25(3R):394, 1986.

- [83] JG Fossum and DS Lee. A physical model for the dependence of carrier lifetime on doping density in nondegenerate silicon. *Solid-State Electronics*, 25(8):741–747, 1982.
- [84] JG Fossum, RP Mertens, DS Lee, and JF Nijs. Carrier recombination and lifetime in highly doped silicon. *Solid-State Electronics*, 26(6):569–576, 1983.
- [85] Y Rosenwaks, Yoram Shapira, and D Huppert. Picosecond time-resolved luminescence studies of surface and bulk recombination processes in InP. *Physical Review B*, 45(16):9108, 1992.
- [86] Jane A Yater, I Weinberg, Phillip P Jenkins, and Geoffrey A Landis. Minoritycarrier lifetime in inp as a function of light bias. In *Proceedings of 1994 IEEE 1st World Conference on Photovoltaic Energy Conversion-WCPEC (A Joint Conference of PVSC, PVSEC and PSEC)*, volume 2, pages 1709–1712. IEEE, 1994.
- [87] Phillip Jenkins, Geoffrey A Landis, Irving Weinberg, and Keith Kneisel. Minority carrier lifetime in indium phosphide. In *The Conference Record of the Twenty-Second IEEE Photovoltaic Specialists Conference-1991*, pages 177–181. IEEE, 1991.
- [88] Geoffrey A Landis, Phillip Jenkins, and Irving Weinberg. Photoluminescence lifetime measurements in InP wafers. In [Proceedings 1991] Third International Conference Indium Phosphide and Related Materials, pages 636–639. IEEE, 1991.
- [89] INSPEC (Information service). Properties of indium phosphide. Number 6. Inspec/Iee, 1991.
- [90] S Bothra, S Tyagi, SK Ghandhi, and JM Borrego. Surface recombination velocity and lifetime in InP. *Solid-state electronics*, 34(1):47–50, 1991.
- [91] Y Rosenwaks, Yoram Shapira, and D Huppert. Evidence for low intrinsic surfacerecombination velocity on p-type InP. *Physical Review B*, 44(23):13097, 1991.

- [92] RK Ahrenkiel, DJ Dunlavy, and T Hanak. Photoluminescence lifetime in heterojunctions. Solar Cells, 24(3-4):339–352, 1988.
- [93] John Wilfred Orton and Peter Blood. The electrical characterization of semiconductors: measurement of minority carrier properties. Academic Press London, 1990.
- [94] Masafumi Yamaguchi, Seiji Shinoyama, and Chikao Uemura. Electron mobility and minority-carrier lifetime of n-InP single crystals grown by liquid-encapsulated czochralski method. *Journal of Applied Physics*, 52(10):6429–6431, 1981.
- [95] Jiao Xu, Xiaoshuang Chen, Wenjuan Wang, and Wei Lu. Extracting dark current components and characteristics parameters for InGaAs/InP avalanche photodiodes. *Infrared Physics & Technology*, 76:468–473, 2016.
- [96] AG Chynoweth. Ionization rates for electrons and holes in silicon. *physical review*, 109(5):1537, 1958.
- [97] R Van Overstraeten and H De Man. Measurement of the ionization rates in diffused silicon pn junctions. *Solid-State Electronics*, 13(5):583–608, 1970.
- [98] Y Okuto and CR Crowell. Threshold energy effect on avalanche breakdown voltage in semiconductor junctions. *Solid-State Electronics*, 18(2):161–168, 1975.
- [99] Thomas Lackner. Avalanche multiplication in semiconductors: A modification of Chynoweth's law. Solid-State Electronics, 34(1):33–42, 1991.
- [100] Y Okuto and CR Crowell. Ionization coefficients in semiconductors: A nonlocalized property. *Physical review B*, 10(10):4284, 1974.
- [101] A Spinelli, A Pacelli, and AL Lacaita. Dead space approximation for impact ionization in silicon. *Applied physics letters*, 69(24):3707–3709, 1996.
- [102] RJ McIntyre. A new look at impact ionization-Part I: A theory of gain, noise, breakdown probability, and frequency response. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 46(8):1623–1631, 1999.

- [103] LW Cook, GE Bulman, and GE Stillman. Electron and hole impact ionization coefficients in InP determined by photomultiplication measurements. *Applied Physics Letters*, 40(7):589–591, 1982.
- [104] TP Pearsall. Impact ionization rates for electrons and holes in Ga_{0.47}In_{0.53}As. Applied Physics Letters, 36(3):218–220, 1980.
- [105] Fukunobu Osaka, Takashi Mikawa, and Takao Kaneda. Electron and hole ionization coefficients in (100) oriented Ga_{0.33}In_{0.67}As_{0.70}P_{0.30}. *Applied Physics Letters*, 45(3):292–293, 1984.
- [106] Fukunobu Osaka, Takashi Mikawa, and Takao Kaneda. Electron and hole ionization coefficients in (100) oriented Ga_{0.18}In_{0.82}As_{0.39}P_{0.61}. *Applied Physics Letters*, 45(6):654–656, 1984.
- [107] Yoshifumi Takanashi and Yoshiji Horikoshi. Ionization coefficient of InGaAsP/InP apd. Japanese Journal of Applied Physics, 18(11):2173, 1979.
- [108] Kenko Taguchi, Toshitaka Torikai, Yoshimasa Sugimoto, Kikuo Makita, and Hisahiro Ishihara. Temperature dependence of impact ionization coefficients in inp. *Journal of applied physics*, 59(2):476–481, 1986.
- [109] Gene A Baraff. Distribution functions and ionization rates for hot electrons in semiconductors. *Physical review*, 128(6):2507, 1962.
- [110] Y Okuto and CR Crowell. Energy-conservation considerations in the characterization of impact ionization in semiconductors. *Physical Review B*, 6(8):3076, 1972.
- [111] TP Pearsall. Threshold energies for impact ionization by electrons and holes in InP. Applied Physics Letters, 35(2):168–170, 1979.
- [112] WJ Turner and WE Reese. Radiative recombination in semiconductors (dunod, paris, 1965). Google Scholar WJ Turner, WE Reese, and GD Pettit, Phys. Rev, 136:1467, 1964.

- [113] CR Crowell and SM Sze. Temperature dependence of avalanche multiplication in semiconductors. *Applied Physics Letters*, 9(6):242–244, 1966.
- [114] Ansgar Jüngel. Transport equations for semiconductors, volume 773. Springer, 2009.
- [115] Carlo Jacoboni. Theory of electron transport in semiconductors: a pathway from elementary physics to nonequilibrium Green functions, volume 165. Springer Science & Business Media, 2010.
- [116] R Stratton. Diffusion of hot and cold electrons in semiconductor barriers. *Physical Review*, 126(6):2002, 1962.
- [117] RB Emmons and G Lucovsky. The frequency response of avalanching photodiodes. *IEEE Transactions on Electron Devices*, (3):297–305, 1966.
- [118] FR Bacher, JS Blakemore, JT Ebner, and JR Arthur. Optical-absorption coefficient of $In_{1-x}Ga_xAs/InP$. *Physical Review B*, 37(5):2551, 1988.
- [119] Sadao Adachi. Optical dispersion relations for GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, InSb,
 Al_xGa_{1-x}As, and In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}. *Journal of Applied Physics*, 66(12):6030–6040, 1989.
- [120] CL Forrest Ma, M Jamal Deen, Larry E Tarof, and Jeffrey CH Yu. Temperature dependence of breakdown voltages in separate absorption, grading, charge, and multiplication inp/ingaas avalanche photodiodes. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 42(5):810–818, 1995.
- [121] Hin-Fai Chau and Dimitris Pavlidis. A physics-based fitting and extrapolation method for measured impact ionization coefficients in iii-v semiconductors. *Journal of applied physics*, 72(2):531–538, 1992.
- [122] GE Stillman and CM Wolfe. Avalanche photodiodes. In Semiconductors and semimetals, volume 12, pages 291–393. Elsevier, 1977.

- [123] TCAD Synopsys. Sentaurus tutorial, copyright© 2016 synopsys. Inc. All rights reserved.
- [124] Chih-Tang Sah, Robert N Noyce, and William Shockley. Carrier generation and recombination in pn junctions and pn junction characteristics. *Proceedings of the IRE*, 45(9):1228–1243, 1957.
- [125] H Sudo, M Suzuki, and N Miyahara. Observation of the surface degradation mode of InP/InGaAs APD's during bias-temperature test. *IEEE electron device letters*, 8(9):386–388, 1987.
- [126] Hiromi Sudo and Masamitsu Suzuki. Surface degradation mechanism of InP/InGaAs APDs. Journal of Lightwave Technology, 6(10):1496–1501, 1988.
- [127] QY Zeng, WJ Wang, J Wen, L Huang, XH Liu, N Li, and W Lu. Effect of surface charge on the dark current of InGaAs/InP avalanche photodiodes. *Journal of Applied Physics*, 115(16):164512, 2014.
- [128] Je Campbell, W Holden, G Qua, and A Dentai. Frequency response of InP/InGaAsP/InGaAs avalanche photodiodes with separate absorption" grading" and multiplication regions. *IEEE journal of quantum electronics*, 21(11):1743– 1746, 1985.
- [129] Nobuhiko Susa, Hiroshi Nakagome, Hiroaki Ando, and H Kanbe. Characteristics in InGaAs/InP avalanche photodiodes with separated absorption and multiplication regions. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 17(2):243–250, 1981.
- [130] Nobuhiko Susa and Yoshiharu Yamauchi. Vapor phase epitaxial growth of InP on liquid phase epitaxial In_{0.53}Ga_{0.47}As. *Journal of Crystal Growth*, 51(3):518–524, 1981.