МОДЕЛИРОВАНИЕ В ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ

УДК 621.315.592

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФФУЗИИ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАЗРЕШЕНИЯ ИК КРТ ФПУ

© А. В. Вишняков, В. В. Васильев, И. В. Сабинина, Г. Ю. Сидоров, В. А. Стучинский

Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН, 630090, г. Новосибирск, просп. Академика Лаврентьева, 13 E-mail: stuchin@isp.nsc.ru

Проведено моделирование методом Монте-Карло диффузии носителей заряда в фоточувствительной плёнке инфракрасных фотоприёмных устройств (ИК ФПУ) на основе материала кадмий—ртуть—теллур для определения пространственного разрешения (частотноконтрастной характеристики) таких ФПУ. Приведены результаты расчётов для матричных и линейчатых ФПУ с разным дизайном фотоэлементов матрицы, включая конфигурации с изолирующими диодами. Дано сравнение рассчитанных данных с экспериментально измеренными величинами разрешения реальных фотоприёмников.

Ключевые слова: фотоприёмное устройство, фотодиодная матрица, материал кадмий—ртуть—теллур, пространственное разрешение, частотно-контрастная характеристика, фотоэлектрическая связь, диффузия носителей заряда, метод Монте-Карло, изолирующие диоды.

DOI: 10.15372/AUT20190516

Введение. Материал кадмий—ртуть—теллур (HgCdTe, KPT) — один из универсальных фоточувствительных материалов, пригодный для изготовления фотоприёмных устройств (ФПУ) практически во всех диапазонах ИК-спектра [1]. Пространственное разрешение инфракрасных ФПУ на основе КРТ (ИК КРТ ФПУ) является одним из основных параметров, определяющих качество таких фотоприёмников. Инфракрасное ФПУ должно быть оптимизировано для улучшения разрешения и уменьшения фотоэлектрической связи (ФС) между пикселями. Такую оптимизацию целесообразно проводить с применением численного моделирования.

Для минимизации межпиксельной ФС (возникающей из-за латеральной диффузии фотоносителей по плёнке абсорбера) могут использоваться мезаструктуры [1, 2], при этом межпиксельные канавки предотвращают/подавляют латеральную диффузию носителей заряда (H3), фотогенерированных в квазинейтральной области освещённых фоточувствительных элементов (ФЧЭ) приёмника, в соседние ФЧЭ. Тем не менее КРТ ФПУ часто изготавливаются и как планарные структуры с двумерными массивами фотодиодов, создаваемых с помощью ионной имплантации на плёнках КРТ *n*- или *p*-типа проводимости. Планарные матричные и линейчатые ФПУ (соответственно МФПУ и ЛФПУ) не требуют травления и дополнительной пассивации поверхности канавок, однако они демонстрируют бо́льшую величину межпиксельной ФС, нежели мезаструктуры при том же размере ФЧЭ [1, 2]. Такая ситуация объясняется тем, что длина диффузии НЗ в материале *p*-КРТ, традиционно используемом для изготовления ИК КРТ ФПУ, сопоставима с межпиксельным расстоянием фотоприёмных матриц [3]. Другим способом уменьшения ФС является применение изолирующих p-n-переходов, помещаемых в зазоры между рабочими фотодиодами матрицы, по которым фотогенерированные НЗ проникают в соседние ФЧЭ. В этом случае n-области изолирующих диодов служат стоком для паразитных НЗ, формирующих ΦC .

Для расчёта диффузии фотогенерированных НЗ в фоточувствительной плёнке (ФП) ИК ФПУ часто используют метод Монте-Карло, являющийся альтернативой обычному моделированию, осуществляемому посредством решения дифференциальных уравнений переноса НЗ для заданной геометрии ФПУ и принятых величин параметров процессов и материалов (см. например, [4, 5]). Моделирование этим методом позволяет прогнозировать изменение пространственного разрешения ФПУ и внутренней квантовой эффективности (ВКЭ) их ФЧЭ при варьировании геометрии и дизайна и, в частности, при масштабировании ФЧЭ матриц, а также при изменении диффузионных параметров НЗ. С точки зрения моделирования методом Монте-Карло случай мезаструктур с канавками и случай планарных структур с изолирующими диодными конструкциями не отличаются друг от друга, если канавки, как и изолирующие диоды, являются идеальным стоком для фотоэлектронов (т. е. если на поверхности канавок реализуется большая скорость поверхностной рекомбинации НЗ).

В предлагаемой работе методом Монте-Карло моделировалась диффузия НЗ в ФП ИК КРТ ФПУ для расчёта определяемого диффузией НЗ пространственного разрешения (диффузионной частотно-контрастной характеристики (ЧКХ) [6]) таких устройств. Приведены результаты расчётов пространственного разрешения для МФПУ формата 320×256 [7] и для ЛФПУ формата 288×4 [8]. Рассмотрены ФПУ с разным дизайном фотоэлементов матрицы, включая конфигурации с изолирующими диодами и сетками, а также дано сравнение рассчитанных данных с экспериментально измеренными величинами разрешения реальных фотоприёмников. Отметим, что все приведённые далее экспериментальные данные получены для ФПУ на основе вакансионно-легированного материала КРТ p-типа проводимости с концентрацией дырок в плёнке абсорбера $\approx 10^{16}$ см⁻³.

Целью данной работы является численное моделирование пространственного разрешения линейчатых и матричных КРТ-фотоприёмников, верификация расчёта сравнением с экспериментом и прогнозирование изменения пространственного разрешения и квантовой эффективности при масштабном изменении геометрических размеров фоточувствительных элементов.

Моделируемый процесс. На первом этапе моделирования пространственного разрешения вычислялись профили пространственного распределения фотоответа выбранного фотодиода МФПУ с разной конструкцией ФЧЭ при сканировании этим диодом узкого пятна засветки в виде полоски шириной 5 мкм.

В моделируемом процессе падающие на поверхность ФПУ фотоны поглощаются в слое абсорбера с вероятностью, пропорциональной коэффициенту поглощения света и пройденному расстоянию, так что генерация фотоносителей осуществляется с экспоненциальным затуханием на длине оптического поглощения. Отражение света от границ не учитывалось. Длина поглощения падающего ИК-излучения выбиралась равной длине поглощения в точке максимума фоточувствительности ФПУ. Диффузия фотоносителей в рабочей области моделировалась как блуждание частиц по узлам кубической сетки с шагом 0,25 мкм. Пятно засветки засевалось случайно однородно двумя миллионами частиц. В ходе блуждания мигрирующие частицы могли претерпевать отражения от варизонных границ ФП, стекание в *n*-области фотодиодов, а также рекомбинацию в объёме абсорбера, которая предполагалась пространственно-однородной, происходящей на каждом шаге диффузионного процесса с вероятностью, определяемой длиной диффузии частиц l_d . В качестве величины l_d в расчётах принималось значение 20 мкм [3]. При моделировании диффузии неравновесных H3 из линейного пятна засветки расчётная область выбиралась с учётом симметрии задачи; эта область включала одномерный ряд одиннадцати ФЧЭ матрицы в направлении, перпендикулярном пятну засветки. Длина ряда была достаточно большой для того, чтобы граничные условия на далёких краях расчётной области не влияли на распределение H3 вблизи пятна. На боковых границах, перпендикулярных пятну, предполагалось условие отражения частиц.

При вычислении ВКЭ в качестве расчётной области выбирался один пиксель матрицы, при этом на латеральных границах пикселя для мигрирующих частиц принималось условие отражения.

При вычислении ВКЭ и расчёте пространственных распределений фотоответа сканирующего диода на границе *n*-областей диодов использовалось условие поглощения частиц, а на остальной части планарных границ плёнки — условие отражения. В расчёте также учитывалось то обстоятельство, что после диффузии ртути сформированные в КРТ *p*-*n*переходы обычно оказываются заглублёнными в ФП приблизительно на 2 мкм. Подход для моделирования диффузии НЗ в плёнке абсорбера и для расчёта ВКЭ ФЧЭ устройств и профилей сканирования описан в [4].

Из полученной зависимости фототоков диодов расчётной области от положения центра пятна засветки рассчитывались профили сканирования диодом узкого пятна засветки, ЧКХ ФПУ и его пространственное разрешение (штрих/мм).

Расчёт ЧКХ состоял в следующем [9, 10]. Вначале из рассчитанных профилей сканирования конструировалась функция рассеяния кромки, затем найденная функция дифференцировалась для получения функции рассеяния линии. Последняя функция разлагалась в ряд Фурье с последующей нормировкой на значение в максимуме. Результатом являлась диффузионная ЧКХ. Для линейчатых ФПУ профили сканирования и функция рассеяния кромки вычислялись для всех четырёх диодов в ряду и в дальнейшем расчёте использовался результат, усреднённый по всем диодам. Отметим, что различие между пространственными распределениями фотоответа диодов в рядах четвёрок диодов было незначительным во многом благодаря тому, что с каждой стороны (на концах) каждого ряда из четырёх фотодиодов были предусмотрены земляные контакты к слою абсорбера, выполненные в виде диодов, идентичных рабочим фотодиодам фотоприёмника. Эти диоды также учитывались в расчёте как стоки для фотогенерированных НЗ (ввиду малого сопротивления соответствующей цепи). Полная ЧКХ, учитывающая размытие изображения как из-за диффузии НЗ, так и из-за дифракции света, была получена домножением диффузионной компоненты ЧКХ на ЧКХ объектива [11]. Расчётное разрешение ФПУ с различными конфигурациями ФЧЭ определялось из вычисленной полной ЧКХ устройства при значении ЧКХ, равном половине максимума.

При экспериментальном определении ЧКХ схема расчётов была аналогичной, только в качестве входных данных использовалась экспериментально измеренная функция рассеяния кромки.

Результаты моделирования. На рис. 1 показан рассчитанный с учётом дифракции пространственный профиль фотоответа диода при сканировании им сфокусированного узкого пятна засветки для матрицы формата 320×256 планарной геометрии с ФЧЭ размером 30×30 мкм в сопоставлении с соответствующим экспериментальным распределением. Видно, что на расстоянии от центра пятна засветки, равном размеру пикселя (30 мкм), относительный сигнал для планарной геометрии матрицы равен ~15–20 % максимума.

На рис. 2 приведены рассчитанные ЧКХ планарных ЛФПУ формата 288×4 при сканировании пятна диодом вдоль размера 43 мкм и планарных МФПУ формата 320×256 с ФЧЭ размером 30×30 мкм в сопоставлении с экспериментальными ЧКХ.

Методом Монте-Карло было также проведено моделирование изменения пространственного разрешения и ВКЭ ФЧЭ ФПУ при масштабном уменьшении размера пикселя



Рис. 1. Профиль фотоответа диода МФПУ формата 320 × 256 с размером пикселя 30 × 30 мкм. ФПУ длинноволнового диапазона с планарной геометрией матрицы. Точки — эксперимент, выполненный с объективом F/2 на длине волны 8 мкм. Геометрическая ширина пятна засветки (без учёта дифракции) выбиралась небольшой (~5 мкм), чтобы форма измеренной кривой не зависела от этой ширины. Сплошная линия — расчёт для длины диффузии фотогенерированных H3, равной 20 мкм



Рис. 2. Измеренные ЧКХ МФПУ формата 320 × 256 с шагом 30 мкм (ромбики) и ЛФПУ 288 × 4 с геометрическим размером пикселя 43 × 56 мкм (кружки). ЧКХ рассчитаны с учётом дифракции на апертуре объектива (сплошные кривые)



Рис. 3. Геометрия ФЧЭ, используемых для расчёта пространственного разрешения ФПУ. Размер клетки 5 мкм. Квадрат в центре ФЧЭ — фотодиод. Внешний квадрат — граница ФЧЭ; маленькие квадраты в углах ФЧЭ четвертинки изолирующих диодов, расположенных между четвёрками соседних рабочих фотодиодов матрицы; периферия ФЧЭ в правом нижнем углу обрамление этого ФЧЭ ячейкой сетчатой диодной изолирующей конструкции



Рис. 4. Разрешение ФПУ с разными геометрией и дизайном ФЧЭ при значении ЧКХ на уровне 0,5 максимума. Линейчатые ФПУ с пикселем размером 43 × 56 мкм, остальные ФПУ матричные. Расчёт — кружки, эксперимент — треугольники. Цифры у расчётных точек — условное обозначение конфигураций и рассчитанные значения ВКЭ (в процентах); отражено наличие изолирующих диодов (сетка (grid) или угловые четвертинки изолирующих диодов (quarter)). Расчёт для фокального числа объектива F = 2,5

и изменении его геометрии и дизайна. На рис. З показаны некоторые из ФЧЭ, для которых проводились расчёты (вид сверху). В обозначении конфигураций ФЧЭ первым указан размер фотоэлемента, в скобках — размер рабочего фотодиода. Толщина ФП всех ФПУ предполагалась равной 4 мкм (величина, обратная коэффициенту поглощения детектируемого излучения в абсорбере). Заглубление *n*-областей в ФП составляет 2 мкм.

На рис. 4 показаны результаты расчёта ВКЭ и пространственного разрешения (штрих/мм), определённого из ЧКХ на уровне 0,5 максимума, для ФПУ с разным размером ФЧЭ, а также экспериментальные точки для планарных ЛФПУ с пикселем размером 43×56 мкм и планарных МФПУ с пикселем размером 30×30 мкм. Расчётные данные близки к экспериментальным. Значения ВКЭ ФЧЭ ФПУ указаны числами у расчётных точек. Видно, что ВКЭ для МФПУ без изолирующих диодов растёт с уменьшением размера пикселя и во всех случаях превышает 80 % (при расчёте без учёта отражения света от поверхностей). Такой рост ВКЭ обусловлен уменьшением среднего расстояния диффузии фотогенерированных НЗ до *n*-области фотодиода при уменьшении латеральных размеров ФЧЭ. При этих размерах пикселя основным каналом рекомбинации фотоносителей является их стекание в рабочие p-n-переходы устройства. Отличие ВКЭ от 100 % в этом случае определяется неполным поглощением фотонов в ФП. Для ЛФПУ с размером Φ ЧЭ 43×56 мкм ВКЭ имеет заметно меньшее значение и равна 55 % из-за большей вероятности рекомбинации фотогенерированных НЗ за время их более продолжительной латеральной миграции в слое абсорбера. При использовании изолирующих диодов, помещённых между четырьмя рабочими диодами матрицы, ВКЭ падает примерно вдвое из-за стекания фотоносителей в *n*-области изолирующих диодов, пространственное разрешение при этом улучшается. При использовании изолирующей диодной сетки ВКЭ уменьшается ещё больше. Точкой с меткой «объектив F2,5 $\lambda = 10$ мкм» обозначено разрешение, соответствующее дифракционной ЧКХ. Прослеживается улучшение разрешения ФПУ с уменьшением размера пикселя.

Заключение. Внутренняя квантовая эффективность для всех ФПУ, кроме изученного ЛФПУ и МФПУ с изолирующими p-n-переходами, превышает 80 %; большое значение ВКЭ в этих случаях обусловлено тем обстоятельством, что основным стоком для фотогенерированных НЗ здесь являются рабочие фотодиоды фоточувствительных элементов приёмников. Для ЛФПУ ВКЭ имеет меньшее значение из-за большего размера пикселя, а для МФПУ с изолирующими диодами — из-за дополнительного стока носителей, которые могли бы участвовать в формировании полезных фотосигналов, на изолирующие диоды. Увеличение разрешения, достигаемое посредством введения в структуру ФЧЭ изолирующих диодов в положении между четырьмя рабочими фотодиодами матрицы, сопровождается двукратным уменьшением регистрируемого фотосигнала. Таким образом, при использовании изолирующих диодов разрешение ФПУ улучшается, но это происходит за счёт уменьшения чувствительности фотоприёмника.

Вычислено пространственное разрешение МФПУ с разной геометрией и дизайном ФЧЭ. Это разрешение улучшается с уменьшением размера ФЧЭ фотоприёмной матрицы, а также, при фиксированном размере фотоэлементов, с увеличением латерального размера рабочих диодов устройства.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. **Рогальский А.** Инфракрасные детекторы: Пер. с англ. А. В. Войцеховского. Новосибирск: Наука, 2003. 636 с.
- 2. Вишняков А. В., Васильев В. В., Сабинина И. В. и др. Влияние меза-травления фоточувствительного слоя на пространственное разрешение матричных ФП формата 320 × 256 на

основе МЛЭ КРТ для спектрального диапазона 8–10 мкм // Тр. XXV Междунар. науч.-техн. конф. и школы по фотоэлектронике и приборам ночного видения. М.: Издательство «ОФСЕТ МОСКВА», 2018. Т. 2. С. 419–421.

- Vishnyakov A. V., Stuchinsky V. A., Brunev D. V. et al. Analysis of charge-carrier diffusion in the photosensing films of HgCdTe infrared focal plane array photodetectors // Journ. Appl. Phys. 2015. 118. 124508.
- 4. Стучинский В. А., Вишняков А. В. Простой подход к моделированию методом Монте-Карло диффузии фотогенерированных носителей заряда в многоэлементных фотоприёмниках диодного типа и некоторые приложения этого подхода // Тр. XXV Междунар. науч.-техн. конф. и школы по фотоэлектронике и приборам ночного видения. М.: Издательство «ОФСЕТ МОСКВА», 2018. Т. 2. С. 430–433.
- Polovinkin V. G., Stuchinsky V. A., Vishnyakov A. V., Lee I. I. Monte Carlo simulation of photoelectric characteristics of mercury-cadmium-tellurium-based infrared focal-plane-array detectors // IEEE Trans. Electron Dev. 2018. 65, N 11. P. 4924–4930.
- 6. Boreman G. D. Modulation Transfer Function in Optical and Electro-Optical Systems. Bellingham, Washington USA: SPIE Press, 2001. 110 p.
- Vasilyev V. V., Varavin V. S., Dvoretsky S. A. et al. 320 × 256 HgCdTe IR FPA with a built-in shortwave cut-off filter // Opto-Electron. Rev. 2010. 18, N 3. P. 236–240.
- Vasilyev V. V., Predein A. V., Varavin V. S. et al. Linear HgCdTe IR FPA 288 × 4 with bidirectional scanning // Opto-Electron. Rev. 2010. 18, N 3. P. 332–337.
- 9. Kohm K. Modulation transfer function measurement method and results for the Orbview-3 high resolution imaging satellite // International Archives of the Photogrammetry, Remote Sensing and Spatial Information Sciences. 2004. 35. P. 7–12.
- Gunapala S. D., Rafol S. B., Ting D. Z. et al. Modulation transfer function of infrared focal plane arrays // Proc. SPIE. 2015. 9608. 960811.
- 11. Lohrmann D., Littleton R., Reese C. et al. Uncooled long-wave infrared small pixel focal plane array and system challenges // Opt. Eng. 2013. 52. 061305.

Поступила в редакцию 24.06.2019 После доработки 24.07.2019 Принята к публикации 07.08.2019