

光电材料及光波导探测器 的设计与研制

GUANG DIAN CAI
LIAO JI GUANG
BO DAO TAN CE
QI DE SHE JI YU
YAN ZHI

刘淑平 © 著

兵器工业出版社

光电材料及光波导探测器
的设计与研制

江苏工业学院图书馆
藏书章

兵器工业出版社

内 容 简 介

本书介绍了半导体 Ge、Si 材料的晶体结构及其工艺方法,阐述了 GeSi 异质结及超晶格的特性,分析计算了 GeSi 异质结及应变超晶格的临界厚度。提出并实施了用数值迭代法计算光波导的有效折射率,进而分析和计算了 SOI、GeSi/Si 异质结、超晶格的光场分布。为波导器件与探测器的集成化奠定了一定的设计理论基础。在此基础上设计和制作新型材料 GeSi/Si 异质结、超晶格光波器件及探测器。

本书可供从事微电子、光电子专业技术人员阅读参考,又可供高等院校相关专业本科生、研究生作为教材或教学参考书使用。

图书在版编目(CIP)数据

光电材料及光波导探测器的设计与研制 / 刘淑平著.
—北京:兵器工业出版社, 2003.4
ISBN 7-80172-118-7

I. 光… II. 刘… III. ①半导体材料—晶体结构—结构
分析 ②半导体材料—生产工艺 IV. TN304.055

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2003)第 012955 号

出版发行:兵器工业出版社

责任编辑:常小虹

责任技编:魏丽华

社 址:100089 北京市海淀区车道沟 10 号

经 销:各地新华书店

印 刷:首钢总公司印刷厂

版 次:2003 年 4 月第 1 版第 1 次印刷

印 数:1-250

封面设计:傅光辉

责任校对:全 静

责任印制:莫丽珠

开 本:850×1168 1/32

印 张:4.25

字 数:102.31 千字

定 价:20.00 元

(版权所有 翻印必究 印装有误 负责调换)

序

看到刘淑平老师的新作《光电材料及光波导探测器的设计与研制》，半是吃惊半是钦佩。刘淑平和我都曾在西安交通大学电子工程系攻读学位，都在实验室从事硅基光电子器件方面的研究工作。不过我们在校时间不同，没有见过面。后来因为与刘老师现在工作的大学进行业务交流，才认识，但一直没有谈论过硅基光电子集成这个话题。我以为工作环境变化了，刘老师已经不再从事这方面的探索研究了。2002 年岁末之际，北京瑞雪纷飞，突然收到刘老师的新作，很惊讶，也很欣喜。

半导体硅、锗材料及其工艺和器件技术是微电子学最重要的部分。我们今天之所以能够坐在家庭影院前欣赏优美的音乐，之所以能在互联网上一瞬千里，之所以能利用大型的计算机对气候等复杂现象提前作出预测，无不得益于硅技术的贡献。20 世纪 80 年代以来，人们也致力于把成熟的硅材料和加工技术方面的优势应用于集成光电子领域。现在，利用硅材料制造的无源光器件，如阵列波导光栅、微机械光开关等都已经成为商品。在这一领域，我们面对的最大挑战是，如何用硅材料制造发光器件和适用于通信波段的红外探测器件。

刘淑平老师的这本新作，以在硅材料上研制红外探测器为主线，系统地介绍和论述了硅、锗材料的晶体结构、GeSi/Si 异质结及 GeSi/Si 应变超晶格材料的光学性质、PN 结特性、半导体的基本工艺、硅基光波导器件及其 GeSi 光探测器等方面的基本理论和研究心得，相信能为从事这一领域研究或对此一领域感兴趣的科研人员、工程师和研究生系统地了解相关知识和进展提供很大的方便。

为此，作为同行，也作为最早的读者，我要感谢刘淑平老师为此付出的心血。

刘育梁

2002年12月29日

引言

信息科学的发展激发和促进了光电子集成科学的发展。近年来光集成(OIC)和光电子集成(OEIC)的研究越来越活跃,越来越具有吸引力。以往对探测器的研究主要集中于三元或四元化合物材料的探测,虽然它们具有光谱响应宽及较高的探测率等优点,但其成本高且与Si微电子工艺不相容,使它们的发展和應用受到限制。而在微电子学中起举足轻重作用的硅材料的探测器具有噪声低,漏电小等特点,但响应波长与光通信窗口不匹配,长波限为 $1.1\text{ }\mu\text{m}$,响应峰在 $0.8\text{ }\mu\text{m}$ 处,无法满足光纤通信的需求, $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ 异质结构及其超晶格结构是20世纪80年代兴起的一种新型材料,这种材料由于折射率可以通过控制Ge含量来进行调节,这样 $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ 合金随着组分 x 的变化,其禁带宽度在 $1.1\sim 1.7\text{eV}$ 之间连续变化,对应的波长范围为 $1.0\sim 1.5\text{ }\mu\text{m}$ 之间,能与光通信窗口匹配;同时近年来随着分子束外延及化学气相等技术的发展,可以生长出性能优异的 $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ 异质结及应变超晶格GeSi超薄层材料,为器件应用奠定了基础。并且GeSi/Si异质结构及应变层微结构器件实际上还是Si基器件,它的制作工艺和集成工艺和Si工艺是兼容的,即Si器件和Si集成电路研制开发中发展起来的光刻、刻蚀、扩散、离子注入、绝缘技术、化学气相淀积和电极制备等成熟工艺技术完全或稍加改进即可应用在SiGe/Si器件上。所以 $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ 被认为是20世纪90年代新型光电子和微电子材料,其研究和应用发展很快。目前在微电子领域,用 $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ 作为基区的异质结双极型晶体管(HBT)的 f_T 已达到75GHz,光电子器件方面已研制出 $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ 光波导,U.Fischer,B.Schuppert和K.Petermann用低温长时间扩散Ge的方法研制出电光

开关, Robert.A.mayer 等人用 PTPCVD(快速热蒸发化学气相沉积)法生长的 $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ 材料研制出 $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ 定向耦合器。目前国内外用 $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ 材料制作探测器的研究工作, 主要有以下研究结果:

1. 1984 年美国 AT&T 贝尔实验室的 S.Luryi 等人为了将 Ge 探测器与 Si 的集成电路集成在一起, 曾用分子束外延技术在 Si 片上外延 Ge 薄膜, 在这层 Ge 膜上制备了 PIN 探测器。为了消除 Si-Ge 之间晶格失配带来的不良影响, 在外延 Ge 之前, 先在 Si 片表面外延一层 SiGe 膜作缓冲层, Ge 的含量 $x=0\sim 1$, 这一缓冲层的效果不好, 因为还存在失配位错, P 型-纯硅-N 型探测器的反向漏电很大, 击穿电压只有 3V。

2. 1985 年 A.Kastalsky 等人改用 SiGe/Si 应变超晶格材料来代替上述的缓冲层, 较好地阻止了失配位错的延伸, 反向漏电流降低了一个数量级, 但器件仍不能实用。

3. 1986 年 S.Lwryi, H.Temkin 和 T.P.Pearsall 等人报道用 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ 应变超晶格材料作光吸收层, 在 Si 片上制备出了可在 1.3~1.5 μm 波长范围工作的 PIN, 雪崩光电二极管探测器, 其光吸收层为 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ 应变超晶格结构, 应变层的总厚度严格控制在临界厚度以下, PIN 探测器的量子效率最大达 47%, APD 探测器的倍增因子高的可达 50 以上, 一般在 5~10 范围内, 反面击穿电压为 30~38V, 在 -10V 的偏压下, 反向漏电流 $I_D \approx 9.5 \times 10^{-4} \sim 7 \times 10^{-3} \text{ A/cm}^2$ 。

4. 1990 年美国 IBM 公司的 V.P.Kesan 等人报道用 SiGe/Si 应变超晶格制备出 PIN 探测器, 用 MBE 技术外延的吸收区结构为: $\text{Si}_{0.4}\text{Ge}_{0.6}(4\text{nm})/\text{Si}(21\mu\text{m})$ 28 个周期。PIN 探测器是制备在 SIMOX 结构的 Si 波导上。反向击穿电压为 35~45V。-5V 下的漏电流为 $1 \times 10^{-4} \text{ A/cm}^2$, -10V 下的漏电流为 $1 \times 10^{-3} \text{ A/cm}^2$ 。对 1.1 μm 波长的光具有最大的内部量子效率约 50%, 对 1.3 μm 波长的光的内部量子效率约 1%, PIN 探测器在 -10V 偏压下, 对 1.3 μm 波长的光产生光电流可以用 $(1 - e^{-\alpha})$ 式子表达, 测出的

$\alpha = 40 \text{ cm}^{-1}$ 。当 $L=1\text{mm}$ 时，光电流约 $10\mu\text{A}$ ，PIN 探测器的带宽为 $1\sim 2\text{GHz}$ 。

5. 1994 年德国的 A.Splett 等人报道了在 Si 衬底上用 MBE 方法外延生长 $\text{Ge}_{0.02}\text{Si}_{0.98}$ 层(光波导)及 $\text{Si}_{0.55}\text{Ge}_{0.45}/\text{Si}$ 周期的应变超晶格层探测器，实现了光波导与探测器的集成，其暗电流为 200nA ，对 $1.3\mu\text{m}$ 波长的光量子效率 $>10\%$ 。

目 录

第 1 章 Ge、Si 的晶体结构	1
1.1 Ge、Si 的晶体结构	1
1.2 晶向和晶面	7
1.3 锗硅晶体的各向异性	17
第 2 章 GeSi 异质结及超晶格的基本特性	24
2.1 GeSi 应变层的临界厚度及超晶格的稳定性	24
2.2 GeSi 合金的折射率的计算	30
2.3 GeSi 合金的等离子色散效应	31
第 3 章 PN 结	34
3.1 PN 结	34
3.2 过渡区的电势分布和结电容	36
3.3 PN 结的电流—电压特性	41
3.4 PN 结的击穿现象	50
第 4 章 半导体工艺	59
4.1 扩散	59
4.2 氧化技术原理	70
4.3 物理气相淀积 (PVD) 和化学气相淀积 (CVD)	81
第 5 章 光波导器件	84
5.1 三层平面波导的基本理论	84

5.2	有效折射率的数值解法	90
5.3	SOI 光波导的有效折射率的计算及其 波导层厚度的设计	92
5.4	GeSi/Si 异质结平面光波导的光场分析与设计	98
第 6 章	光电探测器	106
6.1	Ge _{0.6} Si _{0.4} /Si 应变超晶格光电探测器的光场 分析与设计	106
6.2	P-Ge _{0.05} Si _{0.95} /P-Si 及 Ge _{0.6} Si _{0.4} /Si SLS 探测器 的制作	113
6.3	P-Ge _{0.05} Si _{0.95} /P-Si 异质结及 GeSi/Si SLS 探测器的测试与分析	118
参考文献		122

第 1 章 Ge、Si 的晶体结构

Ge、Si 半导体材料由于其工艺比较成熟，已广泛地应用于制作光电器件和集成电路中。为了制备出更好的光电器件，获得优质的各种不同性能的半导体材料便显得十分重要。为此，首先必须了解与半导体工艺直接有关的晶体结构知识，并着重讨论 Ge、Si 的晶体结构。

1.1 Ge、Si 的晶体结构

1. 晶胞和晶格常数

Ge、Si 晶体中原子排列的情况如图 1-1 所示。图中的立方体是反映 Ge、Si 晶体中原子排列基本特点的一个单元，常称为晶胞。晶胞的各个边长叫做晶格常数，是不同晶体的一个特征性参量。对 Ge、Si 晶体，其晶胞是图 1-1 所示的立方体，因此只有一个晶格常数（记为 a ）。晶体中原子排列的情况和晶格常数等，可通过射线结构分析等技术确定出来。已给出硅的晶格常数 $a=0.3571\text{nm}$ ，锗的晶体常数 $a=0.35658\text{nm}$ 。

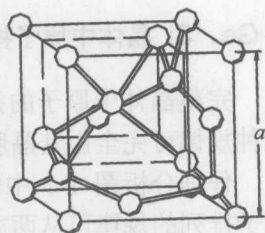


图 1-1 Ge、Si 的晶体结构

仔细观察一下图 1-1 所示的晶胞，就可以知道，该立方体晶胞中共包含有 18 个原子（顶角 8 个，面心 6 个，内部 4 个），但是真正属于该晶胞的原子只有 8 个（顶角 $8 \times \frac{1}{8}$ 个，面心 $6 \times \frac{1}{2}$

个, 内部 4 个), 据此就容易计算晶体的原子密度。因为晶胞的体积为 a^3 , 则晶体中每个原子所占有的体积为 $a^3/8$, 所以晶体原子密度 $= 8/a^3$ 。代入 a 的值就得到: Si 晶体的原子密度 $= 5 \times 10^{22}/\text{cm}^3$, Ge 晶体的原子密度 $= 4.4 \times 10^{22}/\text{cm}^3$ 。

晶胞中的 18 个原子, 分别处于两种不同的位置, 一种是在晶胞的顶角和面心上, 另一种是在晶胞内的体对角线上, 它们的坐标分别为:

第一种位置:

$$(0, 0, 0); \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right); \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right); \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right); \dots$$

第二种位置:

$$\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right); \left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}\right); \left(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right); \left(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}\right); \dots$$

2. Ge、Si 晶体中原子排列的规律

完整晶体中原子的排列是很规则的, 各有一定的排列规律, 这种规律可完全由其晶胞结构反映出来。

仔细分析图 1-1 中的晶胞, 就会发现, 对 Ge、Si 晶体, 其原子排列的规律可从两方面来看:

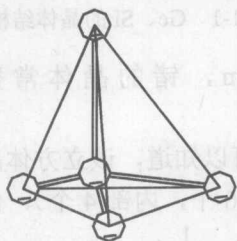


图 1-2 锗、硅中的四面体结构

1) 每个原子的周围有 4 个最邻近的原子 (与中心原子的距离都相等), 而且这 4 个最邻近的原子按正四面体分布 (每个原子分别处于正四面体的一个顶角上), 如图 1-2 所示。Ge、Si 中的原子之所以有这种特殊的排列规律, 是由其共价键的性质所决定的。这种正四面体称为共价四面体。按这

种规律分布的键，通常称为四面体键。根据这种看法，则整个晶体可认为是由图 1-2 所示的许多共价四面体堆砌而成的。

2) 整个 Ge、Si 晶格可看成由两套面心立方晶格套构起来的。面心立方晶格的一个晶胞是带有面心原子的立方体，如图 1-3 所示。从图 1-1 中各个原子所处的位置可观察出，在晶胞顶角和面心上的原子将构成一套面心立方格子，同样，在晶胞内部各体对角线的原子也将构成一套面心立方格子，这两套面心立方格子的相对位移为 $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ ，因此，Ge、Si 的晶格，可看成是由两套面心立方格沿晶胞体对角线方向，且错开 $1/4$ 体对角线长度套构而成的，如图 1-4 所示。这就是说，Ge、Si 晶格是由两套简单的面心立方晶格构成，是一种较为复杂的晶格，正因为 Ge、Si 晶格可由基本的面心立方晶格套构而成，所以常常把 Ge、Si 的结构归属于面心立方晶格。

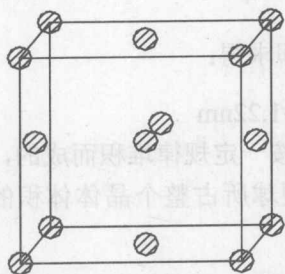


图 1-3 面心立方晶格

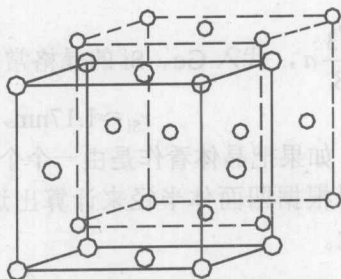


图 1-4 锗、硅的晶格结构

由图 1-4 可见，处于正四面体中心的原子和四面体顶角的原子，分别属于两套不同的面心立方晶格，它们是有区别的。四面体中心原子和顶角原子的价键取向是不一样的，就是说，尽管原子种类相同，但其在晶体中所处的环境不同。应当注意，所谓四面体中心或顶角，这是相对的，实际上，任何一个原子既可以是某个四面体的中心原子，也可以是另一个四面体的顶角原子。

结构分析指出, 这种 Ge、Si 的晶体结构与金刚石的晶体结构完全相同, 只是原子种类和晶格常数不同, 因此, 通常把这种形式的晶体结构统称为“金刚石结构”。

3. 四面体半径和杂质的失配

上面讲到, Ge、Si 中每一个原子周围有 4 个按正四面体分布的邻近原子。因此, Ge、Si 晶体中的最小原子间距, 也就是正四面体的中心原子到顶角原子之间的距离, 把这个最小原子间距再除以 2, 就定义为四面体半径, 显然, 四面体半径也就是把晶体原子都看成是一个个硬球的球半径, 这是金刚石结构特有的一个结构参数。

由图 1-4 可以看到, 最小原子间距就是晶胞体对角线长的 $1/4$ 。因此易于用晶格常数 a 表示出四面体半径 r 。因为晶胞体对角线长为 $\sqrt{3}a$, 则最小原子间距为 $\frac{\sqrt{3}}{4}a$, 所以四面体半径 $r = \frac{\sqrt{3}}{8}a$, 代入 Ge、Si 的晶格常数, 即求得:

$$r_{\text{Si}} \approx 1.17\text{nm}, r_{\text{Ge}} = 1.22\text{nm}$$

如果把晶体看作是由一个个硬球按一定规律堆积而成的, 就可以根据四面体半径来计算出这些硬球所占整个晶体体积的百分比。

因为每个球的体积等于 $\frac{4}{3}\pi r^3$, 而每个球所占有的晶体体积

$$\text{为 } \frac{a^3}{8}, \text{ 所以空间利用率等于 } \frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{\frac{a^3}{8}} = \frac{32}{3a^3}\pi r^3 = \frac{32}{3}\pi \left[\frac{\sqrt{3}}{8} \right]^3$$

$\approx 34\%$ 。可见, 如 Ge、Si 等金刚石结构的晶体, 体内大部分空间是“空”的。正因为如此, 某些半径较小的杂质原子 (如 Cu、Fe、Ni 等原子) 就可以较容易地在 Ge、Si 晶体中运动和镶嵌在这些“空隙”中。这样的杂质通常为间隙式杂质。

但是，如果杂质原子的半径较大，或价键性决定其不易进入晶体间隙中（如 B、P、Sb 等Ⅲ、Ⅴ族杂质），显然，这些杂质原子就只有通过与其基体 Ge、Si 原子互换位置才能进入晶体中。这样的杂质通常为代位式杂质。

对于代位式杂质，为了说明杂质原子进入 Ge、Si 晶体后，究竟“松”、“紧”程度如何，也可引入四面体半径这个概念，即假定这些杂质也都凝结成金刚石结构的晶体，从而可由其晶格常数而求得四面体半径。表 1-1 给出了常用杂质元素的四面体半径值。当杂质原子的四面体半径与半导体基体原子的四面体半径不一致——所谓“失配”时，则将使晶格畸变，在晶体内引起一定的应力；这种“失配”的程度可用失配因子来表示：

$$\text{失配因子} = \frac{\text{基体原子半径} - \text{杂质原子半径}}{\text{基体原子半径}}$$

表 1-1 常用杂质元素的四面体半径

杂质元素	N	C	B	P	Si	Al	As	Ge
四面体半径/nm	0.070	0.077	0.088	0.110	0.117	0.126	0.118	0.122

杂质元素	Ga	Sb	Sn	In	Bi	Pb	Tl
四面体半径/nm	0.126	0.136	0.140	0.144	0.146	0.146	0.147

为方便比较起见，在表 1-2 中列出了常用杂质在硅晶体中的失配因子。

表 1-2 杂质在硅中的失配因子

杂质	P	As	Sb	B	Al	Ga	In	Sn	C	Ge
在硅中晶的失配因子	0.016	0.008	0.16	0.248	0.077	0.077	0.231	0.20	0.342	0.0427

4. 掺杂问题

在 Ge、Si 晶体中，如果所掺入杂质的失配因子较大，则杂

质将使晶格发生畸变,在晶体中造成较大的应力,在高温下由于晶体内部摩擦力迅速减小,则晶体原子有可能发生重新排列以减小应力,这就必将导致各种晶体缺陷的出现。由于这种失配杂质的掺入所引起的位错,称为失配位错。显然,失配杂质掺入越多,则晶格畸变越大,就越容易产生晶体缺陷。因此,在 Ge、Si 晶体中,为保证不致于产生大量的缺陷,就有一个掺杂浓度的上限。例如,对硅中的 B 和 P,掺杂浓度上限分别为 $5 \times 10^{19}/\text{cm}^3$ 和 $5 \times 10^{20}/\text{cm}^3$;但对 Si 中的 As,因其失配因子很小,则此浓度上限可接近其最大固溶度 $2 \times 10^{21}/\text{cm}^3$,所以,在 Si 中掺 As 不易产生缺陷。

由表 1-2 可见,在 Si 晶体中 Sb 和 B 的失配因子比 P 的大得多,因此,在掺入浓度相同的情况下,掺 Sb 和 B 较掺 P 容易产生缺陷。怎样才能保证在半导体中既要掺杂浓度高又要保持晶体的完整呢?这就是所谓“完美晶体技术”需要解决的一个重要课题。目前,在硅工艺中所采用的办法,归纳起来可以有三种:

1) As 取代 P 和 Sb,原因如上述。

2) 四面体半径大于 Si 的杂质,和四面体半径小于 Si 的杂质同时掺入。因为半径大的杂质掺入到 Si 后将使 Si 的晶格常数增大,而半径小的杂质掺入后将使晶格常数变小,如图 1-5 所示。所以,这样两种杂质同时掺入后,就可以起到所谓应力补偿的作用,从而在很高的掺杂浓度下也不致于产生缺陷。现正试用杂质体系有如: P/Sn, P/Ge, B/Sn, B/Ge, Sb/C。可以想见,因为这两种杂质的失配因子不一样,则它们掺入的比例也应当合适才能起到完全补偿应力的作用。例如,以下比例是合适的: $\text{P/Sn} = 1.7 \times 10^{21}/8 \times 10^{19}$, $\text{B/Sn} = 1.7 \times 10^{20}/8 \times 10^{19}$ 。

另外,若采用非 III、V 族杂质的掺入,则需要认真考虑其电气性能,因此这里常选用 C、Ge、Sn 之类中性杂质,而其中似乎 Ge 更为合适。

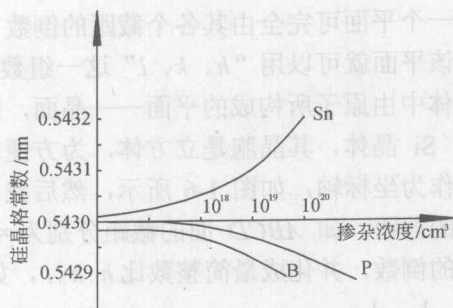


图 1-5 硅晶格常数随掺杂浓度的变化

3) P 和 As 或 B 和 As 同时掺入。实践表明, 只要配比适当, 即使掺杂浓度很高, 也可以不产生缺陷。原因就在于硅中的 As 并不是完全处于正常格点上。有实验指出, 大约 30%~40% 的 As 原子处于格点以外的其他位置。因此, As 的掺入也可以对四面体半径较小的 B 和 P 等杂质起到应力补偿的作用。

1.2 晶向和晶面

本节中我们首先讨论如何标记晶向和晶面, 然后再讨论 Ge、Si 晶体中的一些主要晶向和晶面, 及某些具有实际意义的有关问题。

1. 晶面的标记

我们知道, 如果空间中某一平面与坐标轴 x 、 y 、 z 的截距分别为 r 、 s 、 t , 则该平面方程可写成:

$$\frac{x}{r} + \frac{y}{s} + \frac{z}{t} = 1$$

若令 $h = \frac{1}{r}$, $k = \frac{1}{s}$, $l = \frac{1}{t}$ 则该平面的方程可换写成为:

$$hx + ky + lz = 1$$