

UDC: 38
中文图书分类号: TN312+.7

学校代码: 10005
学 号: S200902058
密 级: 公开

北京工业大学硕士学位论文

题 目: 新型高增益硅雪崩光电探测器的研制

英文题目: STUDY OF THE NOVEL HIGH GAIN
AVALANCHE PHOTODETECTOR

论文作者: 郭帅

学 科: 微电子学与固体电子学

研究方向: 半导体光电子器件

申请学位: 工学硕士

指导教师: 郭霞 教授

所在单位: 电子信息与控制工程学院

答辩日期: 2012 年 5 月

授予学位单位: 北京工业大学

独 创 性 声 明



本人声明所呈交的论文是我个人在导师指导下进行的研究工作及取得的
研究成果。尽我所知，除了文中特别加以标注和致谢的地方外，论文中不包含其
他人已经发表或撰写过的研究成果，也不包含为获得北京工业大学或其他教育机
构的学位或证书而使用过的材料。与我一同工作的同志对本研究所做的任何贡献
已在论文中作了明确的说明并表示了谢意。

签 名： 郭 帅

日 期： 2012.5.10

关于论文使用授权的说明

本人完全了解北京工业大学有关保留、使用学位论文的规定，即：学校有权
保留送交论文的复印件，允许论文被查阅和借阅；学校可以公布论文的全部或部
分内容，可以采用影印、缩印或其他复制手段保存论文。

(保密的论文在解密后应遵守此规定)

签 名： 郭 帅

导师签名： 郭 寂

日 期： 2012.5.10

摘要

雪崩光电二极管 (avalanche photodiode, APD) 是一种具有内部增益、能将探测到的光电流进行放大的有源器件,这种放大作用可以增加探测器的探测灵敏度。APD 具有探测极微弱光信号的能力,当 APD 的工作电压高于其雪崩电压时,就可以获得单光子量级的灵敏度。使用 APD 探测单光子量级的信号已经有了很长时间的研究所。单光子探测器有着非常广泛的应用,其中包括量子密钥通信、三维成像技术、大气监控以及宇宙背景辐射探测等。通常使用光电倍增管 (photomultiplier, PMT) 探测微弱信号,但是由于 PMT 工作电压高、体积大,以及不利于集成等缺点限制了它的应用。通过使用不同的制备材料,APD 的探测波长范围可以覆盖紫外到红外波段。光纤通信系统中有两个引人注意的波长区域,即 $0.8\sim 0.9\ \mu\text{m}$ 波段和 $1.0\sim 1.6\ \mu\text{m}$ 波段。在 $0.8\sim 0.9\ \mu\text{m}$ 波段,硅 APD 由于具有优越的性能、高可靠性和低廉的价格而占据领导地位。本论文以研发高增益硅 APD 为目标,设计出了一种新型台面结构的 APD 器件。对于器件结构的仿真模拟、工艺制备以及增透膜设计方面进行了深入研究。通过仿真模拟设计出了低雪崩击穿电压、高增益的硅 APD 物理结构。本文首次将蚁群算法应用于全角度宽带增透膜设计中,并对于 APD 器件的制备测试进行了初步探索。本论文的主要研究工作有以下几个方面的内容:

1. 新型硅 APD 结构优化设计

通过利用 ISE TCAD 模拟仿真软件,应用流体动力学传输模型和热力学模型,考虑到雪崩倍增、复合机制等物理过程,对于 APD 器件的能带结构、电学特性进行了仿真模拟。同时研究了器件的物理结构对于其电学特性的影响。在仿真中通过加光照,研究了 APD 增益与器件尺寸间存在的关系,结果发现随着器件台阶尺寸的减小,器件增益成增加趋势。理论上设计出了击穿电压为 9.3 V,雪崩增益可达到 10^6 以上的硅 APD 器件结构。

2. 设计硅 APD 器件制备流程及制备工艺研究

根据本文中设计的硅 APD 器件结构,结合传统的硅工艺技术,设计了器件的工艺制备流程。针对工艺中最关键的电感耦合等离子体 (ICP) 刻蚀工艺,深入研究分析了 Cl_2/Ar 混合气体对于硅材料的刻蚀规律及其内在机制,研究发现离子辅助刻蚀机制在 Cl_2/Ar 混合气体刻蚀材料过程中起着关键的作用,刻蚀速率主要依赖于 RF 功率,ICP 功率的大小严重影响着器件的侧壁形貌。同时,对于化

学机械抛光 (CMP) 工艺进行了初步的研究。

3. 应用蚁群算法对增透膜进行优化设计

针对蚁群优化算法的特点,对增透膜设计问题进行数学建模,并将蚁群算法应用于宽带垂直入射情况下的增透膜设计中。针对 SiO_2 和 SiN 交替结构的多层膜系,设计出的 6 层膜平均反射率比 SiN 单层膜降低了 3.64%。通过进一步优化改进模型,建立了全角度宽带增透膜设计的蚁群优化方法,并对 400~750 nm 波长范围, $40^\circ\sim 80^\circ$ 入射角度范围条件下,设计了 3 层增透膜。计算结果发现蚁群算法设计出的 3 层增透膜平均反射率仅为 1.68%,比已报道的遗传算法和模拟退火算法设计结果都要低,证明了蚁群算法在增透膜设计问题中的有效性和优越性。

4. 硅 APD 器件的制备和测试分析

在实验上初次制备了台阶边长尺寸分别为 2 μm 、10 μm 、40 μm 、80 μm 的 APD 器件。通过测试分析发现,随着器件台阶边长尺寸的减小,器件的暗电流呈现减小趋势,与仿真结果一致。同时,器件性能并没有达到预期的效果,分析了器件工艺中存在的问题,为下一步工作打下基础。

关键词: 硅 APD; 高增益; ICP 刻蚀; 蚁群算法; 增透膜

Abstract

The avalanche photodiode (APD) is a kind of active device which has internal gain and can be able to detect the photocurrent that has been magnified. This amplification can increase the detection sensitivity of the detector. APD has the ability to detect very weak optical signals, when the operating voltage of the APD above its avalanche voltage can be single-photon sensitivity of the magnitude. The study of APD to detect the order of magnitude of the single-photon signal has been a very long time. Single-photon detector has a very wide range of applications, such as the communication of quantum key, three-dimensional imaging technology, atmospheric monitoring, and the cosmic background radiation detection. Typically the photomultiplier (PMT) has been used to detect weak signals, but its high operating voltage, bulky, and not conducive to integration and other shortcomings limit its application. By using different materials, the detection wavelength range of APD can cover the ultraviolet to the infrared band. There are two interesting wavelength regions of 0.8~0.9 μm band and 1.0~1.6 μm band in optical fiber communication systems. In the 0.8~0.9 μm band, due to its superior performance, high reliability and low price, silicon APDs have been widely used. In this paper, we propose a novel mesa APD structure which has a high internal gain. We studied the simulation of the device structure, fabricated and antireflection coating design. Through the simulation, we designed a high-gain silicon APD physical structure with a low breakdown voltage, and the ant colony algorithm is applied to the design of broadband omnidirectional antireflection coatings for the first time. Besides, the Si APDs have been fabricated and tested for a preliminary exploration. The main contents of this dissertation were organized as following:

1. Design of the novel Si APD

By using the ISE TCAD simulation software, taking into account the physical process of avalanche multiplication, complex mechanisms, the energy band and the electrical properties of the device have been simulated with fluid dynamics transport model and thermodynamic model. The effect of the physical structure of the device on its electrical properties has also been studied. Adding light in the simulation, we

studied the relationship between the APD gain and the size of the devices. We found that with the decrease of the device mesa size, the gain has an increasing trend. Theoretically we designed a Si APD device structure with breakdown voltage of about 9.3 V and its gain above 10^6 .

2. Design of Si APD fabrication process and technology study

Combined with the traditional Si technology, we designed the fabricated process of the Si APD. In the inductively coupled plasma (ICP) etching process, the effects of process parameters on the etch rate of Si were investigated, and sidewall profiles were also investigated. We found that ion-induced sputtering is an important factor in the Cl_2/Ar mixed gas etching. The etch rate increases monotonously with RF power. Sidewall surfaces can be smoothed by raising the ICP power. Besides, we also studied the chemical mechanical polishing (CMP) process.

3. Optimize the antireflection coatings by using ant colony algorithm (ACA)

Depending on the characteristics of ant colony optimization algorithm, we designed a mathematical model of the antireflection (AR) coatings, and ACA is applied to the design of broadband AR coatings at normal incidence. Based on alternating structure of the multilayer films on SiO_2 and SiN , we designed a six-layer film with the average reflectance of 3.64% lower than the SiN monolayer. Optimizing of the ACA model, we designed the broadband omnidirectional AR coatings over the 400~750 nm wavelength range and the $40^\circ\sim 80^\circ$ incident angle range with three layers. The calculated result showed that the average reflectance of the three-layer AR coating system designed by ACA, 1.68%, is lower than the reported results designed by genetic algorithm and simulated annealing algorithm, which proved the superiority of the ant colony algorithm for the design of AR coatings.

4. Fabrication and testing of Si APD

We fabricated the devices with mesa size of 2 μm , 10 μm , 40 μm , and 80 μm , respectively. By testing and analysis of the devices, we found that as the device mesa size decreases, the dark current shows a decreasing trend, consistent with the simulation results. Besides, we didn't achieve the desired results of the devices. We analyzed the problems that existed in the device process and prepared for the further work.

Key words: Si APD, high gain, ICP, ant colony algorithm, antireflection coating

目 录

摘要.....	I
ABSTRACT.....	III
第1章 绪论.....	1
1.1 引言.....	1
1.2 雪崩光电探测器结构.....	2
1.3 雪崩光电探测器的主要性能指标.....	4
1.3.1 量子效率.....	4
1.3.2 暗电流.....	5
1.3.3 带宽和倍增因子.....	6
1.3.4 倍增噪声.....	7
1.4 雪崩光电探测器的应用.....	7
1.4.1 量子通信中的应用.....	8
1.4.2 光纤通信中的应用.....	8
1.4.3 成像技术中的应用.....	9
1.5 雪崩光电探测器的研究进展.....	10
1.6 本论文主要工作.....	13
第2章 雪崩光电二极管物理.....	15
2.1 引言.....	15
2.2 碰撞离化理论.....	15
2.2.1 离化阈值能量.....	15
2.2.2 强电场内的声子散射作用.....	16
2.2.3 雪崩过剩噪声.....	17
2.3 雪崩光电二极管.....	18
2.3.1 理想雪崩二极管——单一载流子碰撞电离.....	20
2.3.2 电子和空穴同时参与的碰撞电离.....	21
2.3.3 雪崩倍增.....	23
第3章 硅雪崩光电二极管结构设计.....	25
3.1 引言.....	25
3.2 器件结构分析设计.....	25
3.2.1 传统拉通型结构.....	25
3.2.2 新型硅雪崩光电二极管器件结构.....	28

3.3 ISE TCAD 仿真模拟	29
3.3.1 ISE TCAD 模拟方法	29
3.3.2 ISE TCAD 仿真模型	30
3.3.3 硅雪崩光电二极管仿真模拟	34
3.4 小结	39
第 4 章 硅雪崩光电二极管制备工艺研究	41
4.1 引言	41
4.2 ICP 刻蚀工艺研究	41
4.2.1 ICP 刻蚀介绍	41
4.2.2 ICP 刻蚀规律及机制	41
4.3 CMP 工艺研究	47
4.3.1 CMP 机理分析	48
4.3.2 影响 CMP 的因素	48
4.3.3 CMP 实验研究	49
4.4 离子注入后退火工艺研究	50
4.5 金属-半导体接触特性的表征	51
4.6 小结	52
第 5 章 蚁群算法在增透膜设计中的应用	53
5.1 引言	53
5.2 蚁群算法介绍	53
5.2.1 蚂蚁觅食策略-双支桥实验	54
5.2.2 人工蚁群算法的基本思想	55
5.3 增透膜反射率计算理论	57
5.3.1 单层介质薄膜的反射率	57
5.3.2 多层介质薄膜的反射率	59
5.4 垂直入射宽带增透膜蚁群算法优化设计	60
5.4.1 增透膜设计的蚁群优化算法	61
5.4.2 增透膜蚁群算法优化设计结果	65
5.5 全角度宽带增透膜蚁群算法优化设计	66
5.5.1 改进的增透膜设计蚁群优化算法	66
5.5.2 全角度宽带增透膜蚁群算法优化设计结果	71
5.6 小结	74
第 6 章 硅雪崩光电二极管制备和测试分析	75
6.1 引言	75

6.2 硅雪崩光电二极管制备流程设计	75
6.3 硅雪崩光电二极管测试分析	77
6.4 小结	81
结论	83
参考文献	85
攻读硕士学位期间发表的学术论文	93
致谢	95

第1章 绪论

1.1 引言

硅基光电集成技术为高速宽带光互连和光通信的发展提供了一种可行的方案,逐渐受到人们的高度重视。微电子技术从20世纪50年代诞生以来,极大地推动了现代科学技术的进步和社会经济的飞速发展。随着人们对高速、海量信息传输需求的不断提升,基于金属的电互连系统逐渐在向高速小型化发展,并逐渐接近极限。在小型化、多层次化电互连的过程中,出现了许多难以克服的问题,例如功耗问题和带宽问题等。当线宽减小到纳米尺度时,相邻导线的量子隧穿效应成为电子器件发展的瓶颈。现代光信息技术中将光子作为信息载体,具有抗干扰能力强、传输速率快等优点而被认为是具有前景的新一代信息技术。同时,由于硅集成电路工艺非常成熟,同一硅芯片上可以同时集成光子有源器件和无源器件,实现光信息高速传输的硅基光互连。硅基光子学成为近年来人们关注的焦点。

起初,光子计数技术的发展基于光电倍增管 (photomultiplier, PMT)。PMT是一种具有高内部增益的真空管探测器。在20世纪60年代,已经可以生产高性能的PMT,而应用于单光子探测的固体雪崩探测器到了90年代时才在实验室制备成功。单光子探测是一种极微弱光探测技术。单光子探测技术在高分辨率的光谱测量、非破坏性物质分析、生物发光、放射探测、高能物理、天文测光、光时域反射、量子密钥分发系统等领域有着广泛的应用^[1-3]。对于可见光探测,PMT有高的响应度,暗电流也非常小。随着人们对近红外光的不断研究深入,尤其是近年来对量子通信技术、量子密码术的研究,对红外通信波段(850 nm、1310 nm和1550 nm)单光子探测器的研究也就显得尤为迫切。考虑到PMT在1050 nm截止,因此PMT在红外通讯领域的应用受到了限制。即使对于850 nm,考虑到PMT工作电压很高和使用维护的复杂程度,在实际应用中常选用硅雪崩光电二极管 (avalanche photodiode, APD)。由于硅APD在红外通信波段量子效率高、功耗低、体积小、工作频谱范围大、工作电压低等优点,使基于APD的单光子探测技术获得了迅猛的发展。应用于单光子探测的APD是工作于“盖革模式”下的。“盖革模式”指的是单光子探测APD的工作电压高于其击穿电压,此时平均雪崩增益理论上是趋于无穷的,这也是为了满足对微弱光的探测需求。APD内部增益通过碰撞离化的雪崩倍增过程实现,碰撞离化现象已经从理论和实验上被广泛研究^[4-6]。

硅基光电探测器由于与常规的集成电路工艺兼容,成熟的工艺和低廉的价格使其被广泛地应用。传统的硅探测器在 850 nm 以下可以得到高的响应度^[7],国外已经有公司开发出了专门针对 850 nm 单光子探测的商用硅 APD,如图 1-1 所示。对于更长的波长,硅的吸收系数小于 10^3 cm^{-1} ,为了提高响应度,必须提供足够宽的吸收区。由于硅的禁带宽度限制,硅探测器只能探测波长小于 $1.07 \mu\text{m}$ 的光信号。为了进一步提高硅探测器的探测范围,可以利用外延工艺,在硅材料表面外延锗材料来实现对近红外波长的探测。目前在 1310 nm 和 1550 nm 波长,一般选用 InGaAs-APD,为实现量子密钥分发技术的实用化而做准备。在实际通信应用中,对于 400~1100 nm 波长采用 Si-APD;对于 800~1550 nm 波长采用 Ge-APD;对于 900~1700 nm 波长采用 InGaAs-APD。

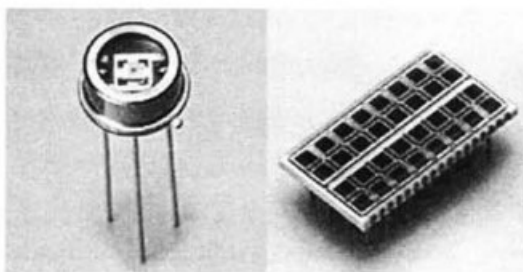


图 1-1 商用硅 APD 照片

Fig.1-1 Photos of commercial Si APD

1.2 雪崩光电探测器结构

半导体光电探测器采用不同的设计材料,可以覆盖可见光波段、红外波段、远红外波段。主要有光电二极管、PIN 光电二极管、APD 和 MSM(金属-半导体-金属)光电探测器等四种不同的结构。在这几种探测器结构中,只有 APD 有内部增益。半导体材料能够制成探测器的依据是:它能够吸收光能并且转化为电,从而被外加电路探测并记录。半导体材料对光的吸收主要有五种机理^[8]:本征吸收、激子吸收、晶格振动吸收、杂质吸收和自由载流子吸收。直接带隙半导体和间接带隙半导体均可制作光电探测器。光子能量大于禁带宽度时,将发生本征吸收,而能量大于能带同杂质能级之差时,可发生杂质吸收、自由载流子吸收。本征吸收和杂质吸收是半导体吸收光的主要机制。

APD 与传统的 PIN 光电探测器不同的是:在 PIN 的吸收区 π 层和 n^+ 层之间,插入了很薄的 p 型层,变成了 $n^+p\pi p^+$ 结构,如图 1-2 所示。当入射光进入器件内产生光生载流子后,光生电子或者空穴在高电场区中会被电场加速,从而获得足够高的能量,与价带中束缚电子碰撞,使它们电离,产生新的载流子。这些新的

载流子同样受到高电场加速，并进一步参与新的碰撞电离。载流子的这种倍增现象称为雪崩倍增效应。正是这种雪崩倍增效应将光生载流子的数量放大了，起到了增益的作用。

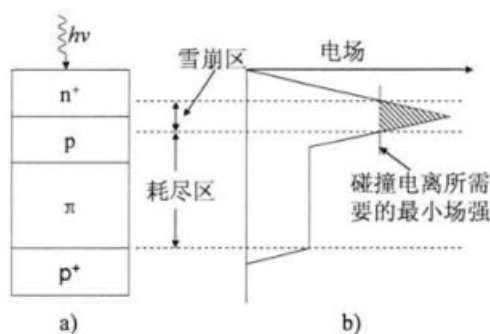


图 1-2 a) APD 结构和 b) 电场分布示意图^[9]

Fig.1-2 The schematic a) structure of APD and b) electric field distribution

对于工作在盖革模式下的单光子探测器，当雪崩发生之后，要对后续的光信号再进行探测，首先必须对雪崩进行抑制，使雪崩停止。单光子探测器一般工作在三种模式下：无源抑制、有源抑制和门模式。其中无源抑制模式^[10]通常在外电路中添加大电阻，当雪崩发生后，电流迅速增大，因而电阻上分压增大，从而导致器件上的分压降低，当偏置电压低于雪崩电压时，雪崩熄灭。无源抑制实现虽然简单，但是时间分辨率低，通常适用于 1 MHz 以下的通信。有源抑制模式^[11]是使用外加反馈电路来对雪崩进行熄灭控制，熄灭电路可以减少由于 APD 放电时间过长造成的死时间过长。熄灭电路利用反馈环把 APD 雪崩产生的信号迅速地反馈到 APD 两端的驱动电源上，使其迅速拉低 APD 的偏置电压，从而立即去除雪崩放电遗尾。门模式是利用门信号来控制雪崩的发生，过程中门信号与雪崩信号同步。门模式工作稳定，效率高，但是设计上繁冗复杂。每种模式都有自己的优缺点，在实际应用中，需要选择何种抑制模式，根据具体情况而定。近年来，出现了自熄灭的单光子探测器^[12]，该类器件通过其内在的结构设计，使得雪崩在发生一定时间后，由于载流子在器件内部陷阱处的积累，降低了雪崩区的偏置电压，从而使雪崩熄灭。由于这类利用负反馈机制的自熄灭器件不需要外加抑制电路，从而可以大大扩展单光子探测器的应用前景。但是由于自熄灭器件内部结构设计的复杂性以及自熄灭所需要的时间长于有源抑制模式，对于自熄灭器件还需要更加深入的研究。

1.3 雪崩光电探测器的主要性能指标

1.3.1 量子效率

光电探测器的内量子效率定义为一个被吸收的光子能够产生的平均自由电子-空穴对数。当入射到 APD 光敏面上的光子能量大于或者等于半导体材料的禁带宽度时,就能通过本征激发使一个电子从价带跃迁到导带,从而产生光生载流子。对于高质量的单晶硅,中间态密度很小,从而很难引发有效的多光子激发,并且在正常的光子流密度条件下,与多光子激发相关的虚拟态可以忽略^[13],因此在高质量的单晶硅中只考虑单光子激发。图 1-3 为 Si 的光吸收系数随光子能量的变化关系。由于 Si 是间接带隙半导体,因而在长波长区 (大于 0.5 μm , 即能

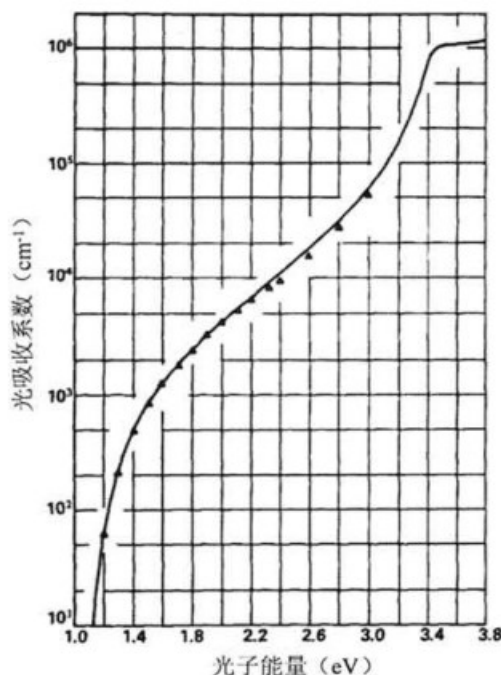


图 1-3 Si 的光吸收系数随光子能量的关系^[14]

Fig.1-3 The relationship of optical absorption coefficient of Si with photon energy (量小于 2.48 eV) 本征载流子激发是伴随着声子参与而发生的。由于包含声子的光吸收过程的几率很小,在长波长区光吸收系数下降。长波截止限为:

$$\lambda_c = \frac{hc}{E_g} = \frac{1.24}{E_g} (\mu\text{m}) \quad (1-1)$$

式中 h ——普朗克常数;

c ——光速;

E_g ——材料的禁带宽度

对于 Si 而言, 由材料的禁带宽度所决定的截止波长 λ_c 的值近似为 $1.1 \mu\text{m}$ 。为了获得高灵敏的光电二极管, 所用的半导体材料的吸收系数必须处于适当的范围, 即 $5 \times 10^2 \sim 1 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ 。Si 在 $0.5 \sim 0.9 \mu\text{m}$ 波长范围内满足这一条件。

APD 在光照条件下, pn 结的耗尽区内外都可以发生载流子的激发。耗尽区内激发的电子和空穴, 在耗尽区电场的作用下, 被分开并向相反的方向漂移。在耗尽区外, 但仍在离耗尽区边界一个扩散长度的距离内, 激发的载流子将扩散到耗尽区, 然后在耗尽区电场的作用下作漂移运动。载流子在越过耗尽区的运动过程中, 在 APD 的外电路中引起光电流。载流子的产生率 G 为:

$$G(x) = \left(\frac{P}{h\nu}\right) a \exp(-ax) \quad (1-2)$$

式中 $\frac{P}{h\nu}$ ——入射光子的数目;

a ——光吸收系数;

x ——到 APD 光敏面的距离

入射光在半导体材料中以常数 a 随距离呈指数型衰减。并非所有被激发的载流子都对光电流有贡献, 在 APD 的表面和非耗尽区内都发生载流子的复合, 从而降低了入射光子转化为光电流的比率。该转化率定义为 APD 的外量子效率 η :

$$\eta = \frac{I_{ph} / q}{P / (h\nu)} \quad (1-3)$$

式中 I_{ph} ——外电路中的光电流

影响外量子探测效率主要有以下四个因素:

- (1) 光纤同 APD 有源区的耦合;
- (2) 光子被半导体材料吸收的概率;
- (3) 光生载流子在倍增区触发一次雪崩的几率;
- (4) 一定温度下的偏置电压。

为获得高的量子效率, 必须将耗尽区展宽, 并尽量靠近器件入射表面。此外, 为获得高的量子效率, 尽可能减小入射光子在半导体表面的反射是非常重要的, 通过在半导体表面涂敷合适的增透膜, 可以大大增加光在器件表面的透射率 (该部分内容将在本文第 5 章中详细讨论)。

1.3.2 暗电流

APD 的暗电流主要由以下几部分组成^[15]: 耗尽区内的产生复合电流 I_{DB} ; 表面(耗尽)层内的产生复合电流 I_{DS} ; 非耗尽区(中性区)的扩散电流 I_{DD} ; 表面漏

电流和隧道电流。当反向偏压足够高时，产生复合电流和扩散电流为：

$$I_{DB} = \frac{1}{2} q (n_i / \tau_0) A_j L_D \quad (1-4)$$

$$I_{DS} = \frac{1}{2} q S_0 n_i A_s \quad (1-5)$$

$$I_{DD} = q (\tau_n^{-1}) (n_i^2 / N_A) A_j L_n \quad (1-6)$$

式中 n_i ——本征载流子浓度；

A_j ——器件截面积；

A_s ——表面耗尽层面积；

S_0 ——表面复合速度；

τ_0 ——耗尽层内的电子寿命；

τ_n —— p^+ 层中的电子寿命；

L_n ——电子扩散长度；

L_D ——耗尽区长度

这些参数中 n_i 对温度最灵敏，其与温度关系为：

$$n_i \propto \exp(-E_G / 2k_B T) \quad (1-7)$$

于是，暗电流成分的温度关系为：

$$I_{DB}, I_{DS} \propto \exp(-E_G / 2k_B T) \quad (1-8)$$

$$I_{DD} \propto \exp(-E_G / k_B T) \quad (1-9)$$

在高温区，APD 的暗电流由 I_{DD} 决定；在低温区，暗电流由 I_{DB} 和 I_{DS} 决定。

在许多情况下，二极管的暗电流受到表面电流 I_s 很大的影响。 I_s 的大小取决于器件的表面状态。一般来说， I_s 近似与反向偏压 V 成正比，相当于 V 作用在一定阻值的漏电阻上。

当在半导体 pn 结两端加反向电压时，势垒区能带发生倾斜。反向偏压越大，势垒越高，势垒区的内建电场也越强，内建电场使 p 区的价带电子得到附加势能，这一附加势能与内建电场强度成正比。当反向电压达到一定数值，p 区价带中的电子将通过隧道效应穿过禁带而到达 n 区导带中，从而形成隧道电流。

1.3.3 带宽和倍增因子

带宽是指光电探测器可探测频率的范围，反映了光电探测器对光脉冲的响应速度^[16]。响应速度是 APD 的一个重要性能参数。决定 APD 的响应速度涉及四个时间常数：(1)耗尽区渡越时间；(2)RC 时间常数；(3)非耗尽层内的扩散时间；(4)

雪崩建立时间。前三个时间常数与半导体的耗尽区长度有很大关系。对于 Si APD 而言, 要求器件的耗尽区宽度达到 $30 \sim 50 \mu\text{m}$, 因此, 决定器件响应速度的主要是耗尽区的渡越时间。由上述四个时间常数结合与时间相关的连续方程, 可以计算得出 APD 的响应速度^[17]。

APD 可以探测某波段范围内的弱光信号, 这依赖于其有高的内部增益、高响应率和低内部噪声。APD 的倍增因子定义为电极收集的电子-空穴对数目与初次光生载流子数目的比值, 在工作波长处可以表示光电探测器的灵敏度。

1.3.4 倍增噪声

当外加电场足够高时, 载流子发生雪崩倍增。一个载流子在单位距离内所产生的电子-空穴对的平均数目称为载流子的碰撞离化系数。硅中电子和空穴的离化系数差别很大。载流子的雪崩倍增过程借助于正反馈机制, 这种反馈的大小极大地依赖于电子和空穴的离化系数比, 两种载流子的离化系数越接近相等, 这种反馈效应越显著。但是, 并非每一个注入到雪崩区的载流子都经历相同的反馈。事实上, 载流子的反馈机构存在着相当广的几率分布, 因而载流子的倍增因子也有广泛的几率分布。倍增噪声的大小用过噪声因子 F 来表征。 F 的表达式为^[18]:

$$F = \Phi / 2qI_0 \langle M \rangle^2 \quad (1-10)$$

式中 Φ ——倍增噪声的噪声谱密度;

q ——电子电荷;

I_0 ——总的注入电流;

$\langle M \rangle$ ——注入载流子的平均倍增因子

1.4 雪崩光电探测器的应用

两个世纪以前, 人们就学会了使用光来传递信息。当激光器、光电探测器以及低损耗的光纤被发明后, 光通信才得以真正实现。光电探测器的灵敏度和速度对于通信系统至关重要, 直接影响到光基站的数量及整个系统的成本、性能和可靠性^[19]。关于成像技术相关的探测同样需要高速、高灵敏度的探测器件。而 APD 是这些应用中最关键的一类高灵敏度探测器。在相同尺寸下, APD 的探测灵敏度比 PIN 型二极管高出许多, 这归功于 APD 内通过碰撞电离产生的内部增益。与 PIN 二极管相比, 尽管 APD 存在许多的缺点, 比如结构复杂, 对于材料的质量要求高, 对于环境温度敏感, 高的偏置电压, 散粒噪声, 以及在高增益时带宽降低等, 高性能的 APD 仍然在很多领域中得到了广泛的应用和偏爱。

在单光子探测中, APD 工作在盖革模式下。由于单光子雪崩二极管性能稳定、尺寸小、偏置电压低, 以及近红外区域较高的探测效率, 逐渐取代PMT。随着单光子雪崩二极管的研究发展, 其应用领域越来越广泛。例如对密码学的研究, 发光显微的研究, 物理、化学、生物等领域荧光发光光谱探测的研究等。用来探测单光子的Si APD已经发展了很多年^[10,20]。为了探测单光子, APD通常工作的偏置电压高于其雪崩击穿电压10~20%, 从而使得每一个由光子激发或者热激发产生的载流子引发盖革模式的电流。当偏置电压小于雪崩电压时, 盖革电流将被抑制。而这种偏置电压的降低可以通过外加抑制电路或者器件内部特殊设计的熄灭载流子来实现。

1.4.1 量子通信中的应用

量子通信研究通常采用激光作为信号源, 单光子探测器作为信号接收器, 单光子探测技术在量子通信实验中起着极为重要的作用^[21]。单光子探测器的作用就是探测携带量子信息的单光子, 并转化为电信号输出, 从而检测光子的纠缠特性以及实现量子密钥分发等量子通信任务。单个光子由光纤引入与APD耦合, 由APD探测到。由于APD反向偏置, 光电效应所产生的少量的电子-空穴对通过雪崩倍增效应被迅速放大, 产生较强的电流信号, 从而可以实现对单个光子的测量。在多光子纠缠的实验中, 每一个单光子探测器对一个光路的探测可以准确探测相应光的强度, 并通过对各个光路的时间符合测量得知这些光路之间的相关程度。例如, 当一束脉冲激光射到晶体上, 入射光子会以一定的概率经过参量下转换劈裂为两个频率一样、量子特性纠缠的光子对, 光子对具有良好的时间符合。于是, 当光子对分别进入两个探测器之后将输出信号送入符合门, 就可测量出光子对的数目。在量子通信及量子光学实验中, 要求单光子探测器具有较高的探测效率、低暗计数和稳定的性能。为了满足此要求, 通常选用硅材料制备APD。选择Si APD还有一个原因是因为在光子纠缠实验中, 作为信号源的飞秒激光器的波长为788 nm, 而Si APD的波长-效率曲线在800 nm附近达到峰值。单光子探测器的探测效率直接影响到对纠缠光子对的探测, 因此制备暗计数低、时间分辨好、探测效率高的单光子探测器至关重要。

1.4.2 光纤通信中的应用

对于 10 Gb/s 光纤通信中使用的 APD, 高的饱和速率 ($>10^7$ cm/s) 允许使用较厚的吸收区 ($>1 \mu\text{m}$), 正因如此, 简化了 APD 的光耦合设计, 只需在 APD 表面设计合适的增透膜就可以满足探测需求。对于光通信中的 1.55 μm 波长, APD

的单位增益外量子效率可以很容易达到 50% 以上, 并且通过优化器件结构和改进制备材料, 可以进一步提高器件的性能。对于 40 Gb/s 光纤通信中 APD, 载流子的饱和速度限制了吸收区的厚度, 通常小于 $0.25\ \mu\text{m}$ 。为了在这样薄的吸收区内获得高的光电转化效率, 则必须将光子的吸收和载流子的输运分离, 从而器件的速度将主要受限于光子的吸收。通过使用共振腔, 大大提高了吸收区对光子的有效吸收长度^[22-24], 从而提高了光电转换效率。但是这种方法增加了器件结构设计、材料生长和器件制备的复杂度, 尤其是共振腔使得吸收带宽变得很窄。除此以外, 可以使用波导结构增强 APD 的响应度。在该结构中, 入射光在垂直于载流子传输方向上与吸收层耦合。在这类结构中, 响应度与器件的长度相关, 而不是厚度, 增加了器件的光吸收长度, 提高了光电转化效率^[25,26]。

1.4.3 成像技术中的应用

由于 APD 的灵敏度高于 PIN 二极管, 因此在远距离高比特率光学通信中的光学接收系统常采用 APD。APD 还被制成二维阵列应用于光学成像领域。例如, 高分辨率的正电子发射断层成像技术 (PET)^[27], 切伦科夫射线的探测^[28]。在医学断层成像技术中, 主要使用 PMT 探测器, 但随着 APD 的发展, APD 阵列也被逐渐应用于医学成像技术。APD 应用于医学成像技术的优势是: APD 具有高的量子效率, 同时体积小, 容易耦合成阵列, 从而实现高的空间分辨率。太空望远镜中也使用 APD 探测信号。并且近红外波段的高速三维成像技术^[29]需要 APD 的面阵列, 从而实现宽波段覆盖 ($0.8\sim 2\ \mu\text{m}$)。如图 1-4 所示。对于该波段, 红外

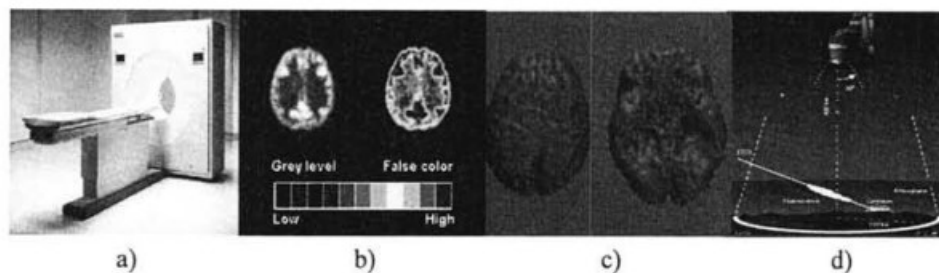


图 1-4 APD 在成像技术中的应用 a) 医学断层成像设备 b) 脑部二维断层图像 c) 脑部三维成像 d) 空间探测成像

Fig. 1-4 Applications of APD in the imaging technology a) medical tomography equipment b) two-dimensional tomography of the brain images c) three-dimensional tomography of the brain images d) space exploration imaging

探测器阵列可以在室温条件下提供高探测响应度、一致性好的高增益和室温下低的暗电流, 从而满足高质量成像技术的要求。除此以外, 为了满足 3D 成像技术对于空间分辨率的要求, 必须制备带宽超过 1 Gsps 的探测器阵列。但是, APD

的应用也存在着明显的挑战。由于目前 APD 的暗电流相比 PMT 较大,从而导致了低的信噪比,稳定性和价格因素也是使其很难广泛使用的原因。

1.5 雪崩光电探测器的研究进展

固体探测器件的发展最先起步于 20 世纪 60 年代对 pn 结中雪崩现象的研究^[30,31]。通过在 pn 结上加高于击穿电压的反向偏压,当有光子被吸收时,可以在外电路中观测到微伏量级的脉冲电压。对于由光子吸收、暗电流以及后脉冲等引起的脉冲现象在物理层面上被深入研究,并且建立了器件工作在高于击穿电压条件下的精确模型^[31]。但是,这类器件在光探测领域中的应用仍然受到器件结特性以及雪崩熄灭电路性能的限制。20 世纪 70 年代发明了 Si APD, McIntyre 和 Webb 对该器件雪崩现象和其统计特性进行了基础性的研究工作^[18,32]。他们还研究了当雪崩二极管工作电压大于击穿电压时单光子脉冲的产生,但是器件在实际应用上还不成熟。为了能够使雪崩二极管可以进行实际的应用,随后对器件的结构上进行了不断地改进,以提高器件的性能和应用范围。

1979 年提出了多 pn 结异质结构雪崩光电探测器,如图 1-5 所示,结构中具有两级雪崩倍增。该器件的两个 pn 结都是反向偏置的,并由 B-C 异质结隔开, $E_g^B > E_g^C$ 。图示结构中有两个同质结和一个异质结,异质结的能量阶跃全在价带上,

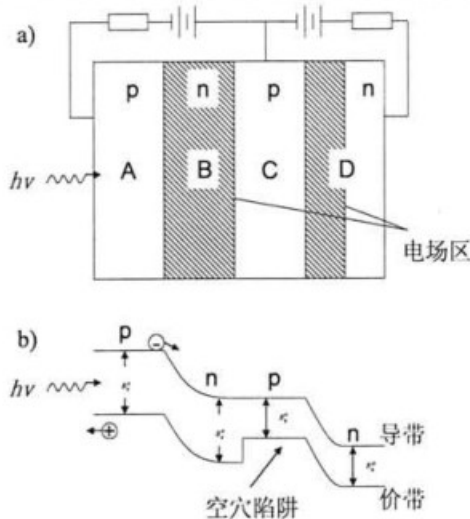


图 1-5 a) p-n-p-n 雪崩光电探测器结构示意图 b) 该器件在适当偏置下的能带图, C 区提供空穴陷阱^[33]

Fig.1-5 The schematic a) structure of the p-n-p-n APD b) energy band under bias voltage, area C as the hole trap

从而产生了一个空穴陷阱。入射到 A 区的一个光子产生一个电子-空穴对,扩散通过 A 区的电子进入 B 区,在这里进行第一次加速,又产生新的电子-空穴对。

B 区为轻掺杂的 n 区，而且很薄，以致在反向偏置下载流子完全耗尽，空穴向左运动流出器件。扩散通过 C 区的电子进入 D 区，在这里产生第二次雪崩倍增，雪崩倍增产生新的电子-空穴对，其中的空穴均陷落在 C 区内。结果是，两级倍增产生的电子均对电流有贡献，但是 D 区倍增产生的空穴被限制，不再参与流通和倍增，从而显著减小了空穴反馈，从而大大降低了过剩噪声。

对于 InGaAs APD，暗电流主要有禁带中陷阱的产生复合电流、隧穿电流和通过 pn 结的表面漏电流。当外加的反向偏置电压高于某个值，但是还没有达到击穿电压时，发现隧穿电流为暗电流的主要组成。通过降低吸收区的掺杂浓度，使得耗尽区向吸收区展宽，可以降低隧穿电流。除此以外，提出了一种新型的分离吸收倍增区的器件结构来降低隧穿电流，结构如图 1-6 所示。小的电场加在 InGaAs 上，作为吸收区。吸收区中的光生载流子在电场的作用下，被扫到高电场的 InP 区，在该区内发生雪崩倍增。由于 InP 的禁带宽度大于 InGaAs 吸收区的禁带宽度，从而降低了隧道电流。

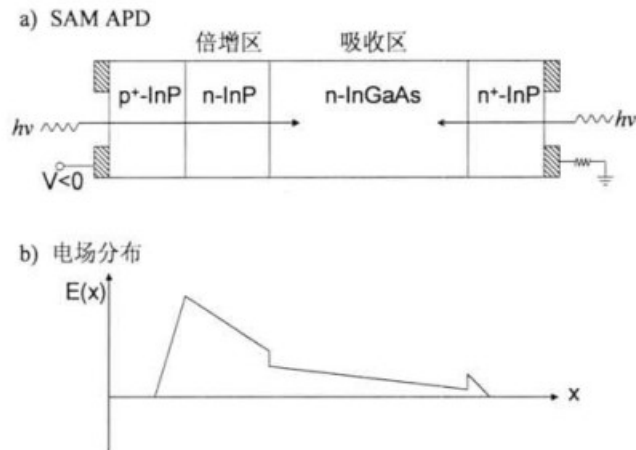


图 1-6 a) 分离倍增区和吸收区的 APD 结构示意图 b) 大反向偏置电压下的电场分布^[34]

Fig.1-6 a) A schematic structure for a separate absorption and multiplication avalanche photodiode (SAM APD) b) The electric field profile under a large reverse bias

为了降低雪崩过剩噪声，则必须设计电子和空穴离化系数差异大的器件结构。通过研究设计多量子阱结构的 APD^[35,36]可以实现这一目标。此结构中，多量子阱雪崩区内 ΔE_c 和 ΔE_v 不一致，从而在雪崩过程中，当载流子跃过势垒时，对于电子和空穴碰撞离化增强效果不同，从而增大电子和空穴离化系数之间的差异。在多量子阱结构的基础上，为了更进一步降低雪崩噪声，提出了内部亚能带量子阱结构的雪崩二极管^[37,38]。这种结构的思想是通过量子阱进行 n 型掺杂引入电子。光生载流子通过碰撞电离在量子阱中产生大量的载流子，由于库伦作用力的存在，使得电子从量子阱中逃逸，从而形成雪崩倍增电流。由于只有电子对光生

倍增电流有贡献，因此雪崩噪声被显著降低。

近年来，Otte 等^[39]人将硅 APD 制成阵列形式，并使其工作在盖革模式下，从而得到了一种新型的光子探测器，被称为硅光子倍增管。结构如图 1-7 所示。通过优化设计，器件的击穿电压为 50 V，工作偏置电压为 52~60 V，增益可以达到 $10^4 \sim 5 \times 10^6$ 。

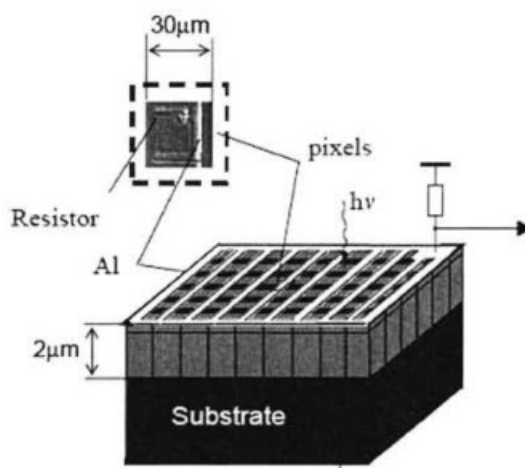


图 1-7 等距离硅光子倍增管示意图 (光从顶部入射，小插图为器件的组成单元，单元器件通过多晶硅电阻与外电路耦合)^[39]

Fig.1-7 Isometric view of a Si photomultiplier (Light is incident from the top, the small inset shows the composed cell, the cell is connected via polysilicon resistor to the outside circuit)

根据材料特性的不同，SiC APD 用来探测紫外波段的光信号。随着 SiC APD 的不断发展，在某些领域的应用中，也逐渐取代体积大、高增益的 PMT。但是常规的 APD 的探测尺寸通常小于 $250 \mu\text{m}$ ，因此必须逐渐研究大尺寸的 APD。由于 SiC 材料生长的限制，对于大尺寸探测面积的 APD，过早击穿会限制尺寸的继续增大。目前能够实现的最优工艺制备的 SiC APD 的探测直径最大可达到 $500 \mu\text{m}$ 。为了抑制 APD 的过早击穿，Liu 等^[40]人提出了一种双台阶侧壁 SiC APD 结构。结构和电场分布如图 1-8 所示。该结构中存在两个不同尺寸的台阶，下部的大台阶面积大，充当吸收区，可以充分增加吸收面积。上面的小台阶控制雪崩区的面积，通过减小尺寸，将雪崩区限制在了器件的中间部分，避免了由于台阶侧壁刻蚀工艺等因素对于暗电流的影响和侧壁处易出现过早击穿的缺陷。该结构在高偏置电压条件下，可以得到 10^5 以上的增益，同时保持低的暗电流。

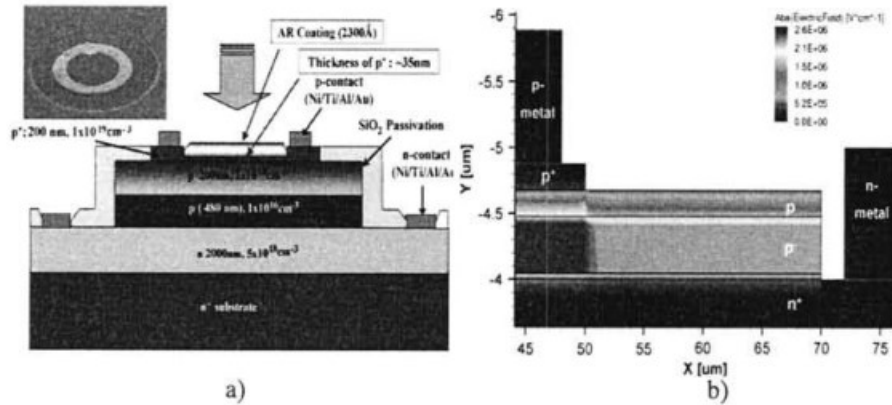


图 1-8 a) 双台阶侧壁 SiC APD 结构截面示意图, 包含台阶 SEM 图 b) 近击穿电压下电场分布仿真结果^[40]

Fig.1-8 a) The schematic cross section of a double mesa sidewall SiC APD, an SEM picture of the mesa is also shown b) Simulated internal electric field profile near the breakdown voltage

1.6 本论文主要工作

近年来, 涌现出大量关于化合物半导体材料 APD 的研究报道, 通过不断地优化器件结构, 提高了器件的性能。Si APD 目前已经有大量商业化产品问世。但是, 在性能上还没有达到令人满意的地步, 并且对于更高性能的 Si APD 新结构研究较少。目前广泛使用的 Si APD 雪崩击穿电压基本超过 50 V, 增益大多为 $10^2 \sim 10^4$ 量级。低增益和高的击穿电压都限制了 Si APD 在单光子探测领域的应用。随着硅基光子学的不断发展, 高性能 Si APD 的研发显得十分必要。

本文中提出了一种新型的 Si APD 结构, 通过优化设计, 目的是为了研发低击穿电压、高增益的 Si APD 器件。研究制备器件的关键工艺, 并且针对增透膜设计问题, 利用蚁群算法进行了建模设计优化。本论文的主要研究工作有以下几个方面的内容:

- (1) 提出了一种新型的 Si APD 结构, 并对其特性和结构进行仿真优化设计和研究。通过利用 ISE TCAD 模拟仿真软件, 应用流体动力学传输模型和热力学模型, 考虑到雪崩倍增、复合机制等物理过程, 对于器件的能带结构、电学特性进行了仿真模拟。同时研究了器件的物理结构对于其电学特性的影响。
- (2) 设计了 Si APD 制备流程, 并对制备工艺进行研究。根据本文中设计的 Si APD 器件结构, 结合传统的硅工艺技术, 设计了器件的工艺制备流程。针对工艺中最关键的电感耦合等离子体 (ICP) 刻蚀工艺, 深入研究分析了 Cl_2/Ar 混合气体对于硅材料的刻蚀规律及其内在机制。同时, 对于化学机械抛光 (CMP) 工艺、离

子注入后退火工艺以及欧姆接触电阻表征进行了初步研究。

(3) 应用蚁群算法对增透膜进行优化设计。针对蚁群优化算法的特点,对增透膜设计问题进行数学建模,并将蚁群算法应用于宽带垂直入射情况下的增透膜设计中。通过进一步优化改进增透膜系的数学模型,建立了基于蚁群算法的全角度宽带增透膜设计优化方法,并设计了3层全角度宽带增透膜。

(4) 实验上制备 Si APD,并对器件进行测试分析。制备了台阶尺寸分别为 $2\text{ }\mu\text{m}$ 、 $10\text{ }\mu\text{m}$ 、 $40\text{ }\mu\text{m}$ 、 $80\text{ }\mu\text{m}$ 的 APD 器件,并测试分析了首次制备的器件性能,分析了工艺中存在的问题。

本文的主要创新点为:

1. 提出了一种新型的 Si APD 台面结构,通过仿真优化设计,获得了低击穿电压、高增益的器件结构。

2. 首次将蚁群优化算法应用于增透膜设计问题中。提出了应用蚁群算法对全角度宽带增透膜进行优化设计的数值方法,并利用该方法优化设计了3层全角度宽带增透膜。

3. 初次制备了击穿电压仅为 7 V 左右的 Si APD 器件。

本论文的基金支持有:国家自然科学基金(61076048)、教育部和北京市留学人员科技活动择优资助。

第2章 雪崩光电二极管物理

2.1 引言

近些年,随着光通信技术的发展,APD引起人们的关注,并继续深入研究。光纤在 $1.3\text{ }\mu\text{m}$ 及 $1.55\text{ }\mu\text{m}$ 的低色散和低损耗窗口特性,使其成为目前广泛应用的通信波长。为了开发适用的低噪音APD,人们致力于研究III-V族半导体(例如InP、GaSb、InGaAs、InGaAsP等)。对于 $1.07\text{ }\mu\text{m}$ 以下的波长,Si APD成为了光纤通信系统的理想探测器。

为了制作高性能低噪音的APD,必须令电子和空穴的离化系数差异很大才行。通过对半导体能带结构的深入了解,弄清了半导体离化系数与能带结构的内在联系。在碰撞离化过程中,载流子获得带隙量级的能量。APD不仅可以用来解决实际应用问题,同时还可以用来研究能带结构和热载流子物理问题。近年来,人们通过利用诸如超晶格材料、渐变带隙材料、以及调制掺杂等新材料,可以将普通pn结探测器的能带图加以任意修改,以设计其离化系数比。为了制备低击穿电压、高增益的APD,必须首先对APD的基本物理机制进行详细的分析。

2.2 碰撞离化理论

2.2.1 离化阈值能量

半导体中的碰撞离化效应是指在强电场作用下,自由载流子(电子和空穴)将被加速到足够高的能量,使得价带中的电子跃迁到导带的过程。能够观察到碰撞离化所需的电场强度取决于半导体材料的带隙宽度,室温下其范围由窄带隙半导体的 10^4 Vcm^{-1} 量级到宽带隙半导体的 10^5 Vcm^{-1} 量级以上^[15]。

碰撞离化所需的最低能量叫做离化阈值能量 E_{th} 。离化阈值能量 E_{th} 取决于半导体的能带结构。离化阈值能量严重影响电子及空穴的离化系数(分别以 α 和 β 表示)。离化系数是指当电子或者空穴沿着电场方向加速运动时,因碰撞离化而产生新的电子-空穴对所需经过的平均距离的倒数。一连串的碰撞离化过程,就造成了雪崩倍增现象。 α 和 β 的大小、电场区长度以及载流子注入条件共同决定了雪崩增益的大小。碰撞离化是一个三体碰撞过程,碰撞后的载流子仍然以有限的动能和动量继续运动,这意味着发生碰撞离化的载流子所具有的能量通常应大于带隙。值得指出的是,在强电场内,由于隧道碰撞离化机制,当能量低于带间

碰撞离化阈值时，也能产生电子-空穴对。隧道碰撞离化效应是由 Keldysh 提出，这种效应是碰撞离化与齐纳隧道效应相结合的结果，它与 Franz-Keldysh 效应相关联。Franz-Keldysh 效应如图 2-1 a) 所示：一个具有子带隙能量的入射光子，将一个价带电子激发到带隙内的一个虚态，然后由此虚态隧穿进入导带，称之为光子辅助隧穿效应。这就会降低吸收阈值，使它低于带隙能量，并展宽吸收带。而在隧道碰撞离化过程中，如图 2-1 b) 所示，价带电子跃迁所需的能量不是来自光子，而是能量低于离化阈值的导带电子。在有效质量较小的窄带隙材料中，电子-空穴对的亚阈值产额十分重要。隧道碰撞离化的电子一般具有稍低于阈值的能量。后一效应中，价带电子与高能电子碰撞而获得能量，并隧穿入导带，这个过程有效地降低了离化阈值能量。

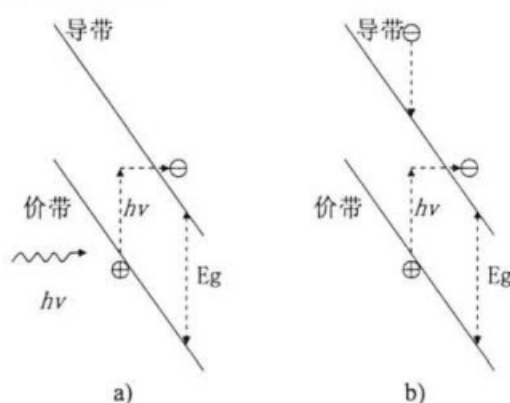


图 2-1 实际空间的能带图^[15] a) Franz-Keldysh 效应，即光子辅助隧穿效应 b) 隧道碰撞离化
Fig.2-1 Energy band in the real space a) Franz-Keldysh effect, ie, photon-assisted tunneling effect
b) Tunnel collision ionization

2.2.2 强电场内的声子散射作用

碰撞离化率不仅受离化能量的影响，而且受声子散射率的影响^[15]。载流子与声子的碰撞决定载流子的能量损失和动量损失，因此影响碰撞离化产生电子-空穴对所需的平均路程。声子散射使平均路程显著增大，与电场方向相反的散射对平均路程的影响更为显著，因为载流子在散射后要损失很大一部分能量，并使电场加速作用减缓，从而显著增大载流子为获得离化能量所需的平均路程。对于带隙大于 0.5 eV 的半导体影响碰撞离化的散射主要是畸变势相互作用，例如纵向光学波和声学波的谷间声子散射。离化杂质也可以引发表散射。雪崩倍增过程发生在反向偏置 pn 结的空间电荷区内，但是由于离化杂质的库仑性质，离化杂质散射率随着能量的增大而减小，对于这种输运过程的热载流子而言，该散射率可以忽略不计。中性杂质的散射与能量无关，在碰撞离化过程中也可忽略不计。但是，

在热载流子产生的中性杂质碰撞离化过程中,这种散射变得重要,这与杂质能级深度、温度及杂质浓度有关。对于超纯半导体,中性杂质碰撞离化可以忽略。

硅是一种强电场中谷间散射起主要作用的材料。文献[41]中采用非局域赝势法计算了硅的能带结构。由于X谷与L谷的能量差很大(约1 eV),只有当电场很强(100 kVcm⁻¹)时,X-L谷间散射才是主要的。第二导带底只比主导带底低约0.1 eV,在相当弱的电场时,电子也可以散射进入第二导带。对于低于L最小值的电子能量,主要散射机制是在三个X谷之间的等效谷间散射。APD的过剩噪声由材料的离化系数比决定。对于硅材料^[42],当电场强度小于3×10⁵ Vcm⁻¹时,电子碰撞离化系数远远大于空穴碰撞离化系数,因此Si APD的过剩噪声很低。

2.2.3 雪崩过剩噪声

为了设计低噪声APD,必须知道离化系数比及其与电场的关系^[18]。在APD中,单位带宽内的噪声可以表示为^[43]:

$$\langle i^2 \rangle = 2qI_{ph} \langle M \rangle^2 F \quad (2-1)$$

式中 q ——电子电荷;

I_{ph} ——无倍增光电流;

$\langle M \rangle$ ——平均雪崩增益;

F ——过剩噪声因子

$$F = \langle M^2 \rangle / \langle M \rangle^2 = 1 + \sigma^2 / \langle M \rangle^2 \quad (2-2)$$

其中

$$\sigma^2 = \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \quad (2-3)$$

在光电流倍增实验中,测量的总是 $\langle M \rangle$,简写为 M 。

过剩噪声因子 F 与离化系数之比 β/α 有密切关系。离化系数之比 β/α 非常大或者非常小时,倍增过程是由离化系数最大的载流子引起的,这样就可以得到很低的雪崩噪声。直观的解释为,如果 $\alpha = \beta$,则可以说一个电子产生一个电子-空穴对后,这个新产生的运动方向相反的空穴必然产生另一个电子-空穴对,这种强反馈效应会使噪声起伏放大。相反的情况是,如果既没有电子碰撞离化,也没有空穴碰撞离化,则不会存在这种反馈效应。后者是过剩噪声最低的情况,而 $\alpha = \beta$ 是过剩噪声最高的情况。因此得出,为了获得低噪声APD, α 与 β 的差别越大越好。过剩噪声因子 F 与雪崩增益、注入或者产生光电流的部位以及离化系数比有关。假设离化系数比 $k = \beta/\alpha$ 恒定,即与电场无关,则由电子碰撞离化所决定的过剩噪声因子为^[43]:

$$F_n = M_n \left\{ 1 - \left[(1-k) \left((M_n - 1) / M_n \right)^2 \right] \right\} \quad (2-4)$$

由空穴碰撞离化决定的过剩噪声因子为：

$$F_p = M_p \left\{ 1 - \left[1 - (1/k) \right] \left[(M_p - 1) / M_p \right]^2 \right\} \quad (2-5)$$

式中 M_n ——电子倍增因子；

M_p ——空穴倍增因子

对于不同的 $k = \beta/\alpha$ ，计算得到的过剩噪声因子如图 2-2 所示。

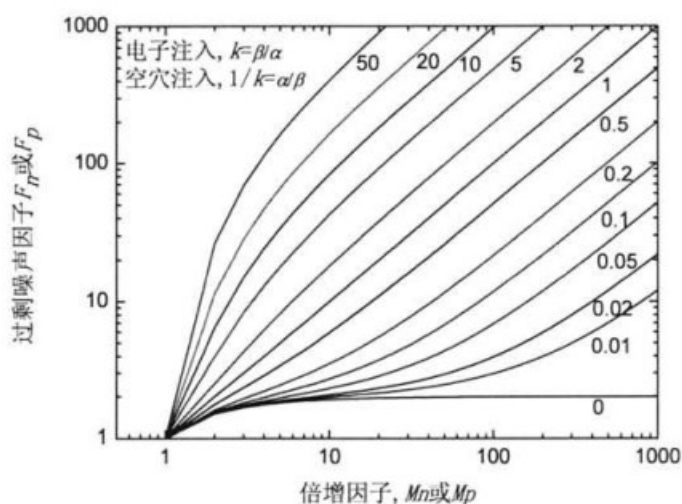


图 2-2 过剩噪声因子与倍增因子和离化系数比的关系

Fig.2-2 Excess noise factor depending on the multiplication factor and ionization coefficient ratio

当 $\alpha = \beta$ 时， $F = M$ ，因而噪声功率随增益的立方增大。在 $\beta = 0$ ，或 $\alpha = 0$ 时，当 $M \geq 10$ 时， $F \approx 2$ 。因此，当增益高时，甚至在只有一种载流子碰撞离化的理想情形下，过剩噪声也不能随意降低。这意味着与光电倍增管相比，普通 APD 的噪声较高是固有的。光电倍增管中，雪崩过程几乎无噪声，即 $F \approx 1$ 。曾经人们认为这是对半导体内雪崩倍增的基本限制，但是随后一种新型的阶梯带隙 APD 的问世否定了这种观点^[44]，它是光电倍增管的固态模拟器件，具有无噪声增益 ($F \approx 1$)。

2.3 雪崩光电二极管

光电探测器在光通信系统中起着至关重要的作用，其最主要的物理机制是通过吸收光子改变器件内部的光电导或者光电压^[45]。光电探测器的探测性能由光吸

收过程、载流子输运过程，以及探测器和外电路耦合这几个部分共同决定。为了增强光电流响应，可以在器件内部增添雪崩倍增过程，从而增加可被外电路探测的光生电流。光生载流子在强电场中运动时，载流子从电场获得能量。在 k 空间中，高能电子占据导带中远离导带底 (E_c) 的能态，如图 2-3 所示，当超过 E_c 的多余能量超过某一特定值时 (阈值能量 E_{th})，高能电子可以和晶格发生碰撞，并将价带中的一个电子激发到导带，在价带中产生一个空穴，从而得到一个电子-空穴对。产生的电子和空穴再次受到电场加速，重复上述过程，从而导致雪崩倍增，实现了器件的雪崩增益。在半导体中，电子和空穴都可以通过碰撞电离产生更多的电子-空穴对，如图 2-4 a) 所示。电子和空穴的注入浓度分别由 $J_n(0)$ 和 $J_p(W)$ 表示。图 2-4 b) 为 APD 的结构示意图。当电子和空穴沿着相反方向注入到倍增区时，雪崩倍增的反馈过程将会出现。

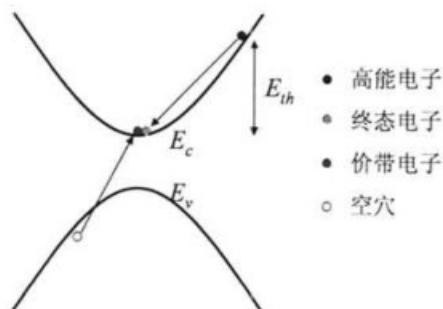
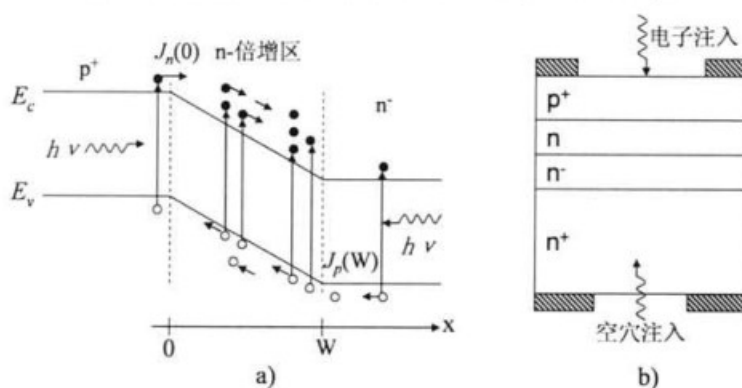
图 2-3 k 空间中的碰撞电离过程示意图Fig.2-3 The schematic of collision ionization process in k -space图 2-4 a) APD 能带图 b) APD 结构示意图^[45]

Fig.2-4 a) Energy band of APD and b) the schematic structure for APD

在此定义 α_n 为电子的电离系数 (cm^{-1})，表示一个注入的电子移动一个单位的距离，通过碰撞产生的电子-空穴对数； β_p 为空穴的电离系数 (cm^{-1})，表示一个注入的空穴移动一个单位的距离，通过碰撞产生的电子-空穴对数。对于大多数半导体材料， $\alpha_n \neq \beta_p$ 。电离系数与电场强度成指数关系：

$$\alpha_n(E) = \alpha_0 e^{-C_n/E} \quad (2-6)$$

$$\beta_p(E) = \beta_0 e^{-C_p/E} \quad (2-7)$$

其中 α_0 , β_0 , C_n , C_p 为与材料有关的常数。

2.3.1 理想雪崩二极管——单一载流子碰撞电离

只考虑电子碰撞电离的情况^[32]。假设在位置 x 的注入电流密度为 $J_n(x)$ ，如图 2-5 a) 所示。经过 Δx 的距离后，产生的总的电子空穴对数为 $\alpha_n \Delta x$ 乘以 $J_n(x)$ 。 $\alpha_n \Delta x$ 为一个电子经历 Δx 距离后产生的电离电子数。因此电流密度 $J_n(x+\Delta x)$ 为注入电流密度和电离电流密度之和：

$$J_n(x+\Delta x) = J_n(x) + \alpha_n \Delta x J_n(x) \quad (2-8)$$

或者

$$\frac{d}{dx} J_n(x) = \alpha_n J_n(x) \quad (2-9)$$

此微分方程的解为：

$$J_n(x) = J_n(0) e^{\int_0^x \alpha_n(x') dx'} \quad (2-10)$$

由于电场强度 $E(x)$ 并不是恒定不变的，因此 $\alpha_n \equiv \alpha_n(x)$ 并不始终成立。

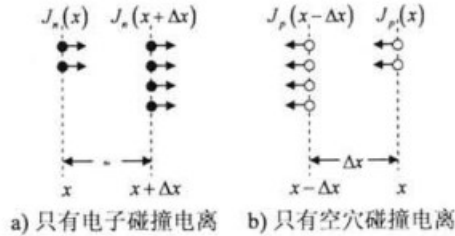


图 2-5 碰撞电离过程示意图，只有 a) 电子和 b) 空穴碰撞电离

Fig2-5 Schematic diagrams for only a) electron and b) hole impact ionization

电子的倍增因子 M_n 定义为：

$$M_n = \frac{J_n(W)}{J_n(0)} = e^{\int_0^W \alpha_n(x') dx'} \quad (2-11)$$

如果 α_n 恒定不变，可以得到：

$$J_n(x) = J_n(0) e^{\alpha_n x} \quad (2-12)$$

并且有

$$M_n = e^{\alpha_n W} \quad (2-13)$$

同样，对于沿着-x方向的空穴的碰撞电离，如图2-5 b)所示，可以得到：

$$-\frac{d}{dx}J_p(x) = \beta_p J_p(x) \quad (2-14)$$

该式的解为：

$$J_p(x) = J_p(W) e^{\int_x^W \beta_p(x') dx'} \quad (2-15)$$

空穴的倍增因子定义为：

$$M_p = \frac{J_p(0)}{J_p(W)} = e^{\int_0^W \beta_p(x') dx'} \quad (2-16)$$

特别的，当 β_p 与位置无关时得到：

$$J_p(x) = J_p(W) e^{\beta_p(W-x)} \quad (2-17)$$

并且有

$$M_p = e^{\beta_p W} \quad (2-18)$$

由于 W 是有限的宽度，因此倍增因子也是有限值。

2.3.2 电子和空穴同时参与的碰撞电离

当存在光生载流子时，电子和空穴均参与碰撞电离的耦合方程为：

$$\frac{d}{dx}J_n(x) = \alpha_n(x)J_n(x) + \beta_p(x)J_p(x) + qG(x) \quad (2-19)$$

$$-\frac{d}{dx}J_p(x) = \alpha_n(x)J_n(x) + \beta_p(x)J_p(x) + qG(x) \quad (2-20)$$

式中 $G(x)$ ——单位体积内光生载流子的产生率

显然，光子吸收和碰撞电离均对电子-空穴对的产生有贡献。

联立方程(2-19)和(2-20)可得：

$$\frac{d}{dx}[J_n(x) + J_p(x)] = 0 \quad (2-21)$$

从而总电流密度为：

$$J = J_n(x) + J_p(x) = \text{常数} \quad (2-22)$$

此结果表明在一维问题中，总电流密度与位置无关，即通过任何位置 x 处的电流与稳态处电流值相等。以 $J_n(x)$ 为变量，由偏微分方程(2-19)得：

$$\frac{d}{dx}J_n(x) - [\alpha_n(x) - \beta_p(x)]J_n(x) = \beta_p(x)J + qG(x) \quad (2-23)$$

其中 J 与 x 无关，而由边界条件决定。

设定在 $x=0$ 处的初始条件，求解偏微分方程(2-23)得：

$$J_n(x) = \frac{J \int_0^x dx' \beta_p(x') e^{-\varphi(x')} + q \int_0^x G(x') e^{-\varphi(x')} dx' + J_n(0)}{e^{-\varphi(x)}} \quad (2-24)$$

其中

$$\varphi(x) = \int_0^x [\alpha_n(x') - \beta_p(x')] dx' \quad (2-25)$$

然后利用在 $x = W$ 处的边界条件, 假设 $J_n(0)$ 和 $J_p(W)$ 已给出, 从而得到:

$$J_n(W) = \frac{J \int_0^W dx' \beta_p(x') e^{-\varphi(x')} + q \int_0^W G(x') e^{-\varphi(x')} dx' + J_n(0)}{e^{-\varphi(W)}} \quad (2-26)$$

再利用

$$J_n(W) = J - J_p(W) \quad (2-27)$$

$$\varphi(W) - \varphi(x') = \int_{x'}^W [\alpha_n(x'') - \beta_p(x'')] dx'' \quad (2-28)$$

可以得到:

$$J = \frac{J_p(W) + J_n(0) e^{\varphi(W)} + q \int_0^W G(x') e^{\int_{x'}^W [\alpha_n(x'') - \beta_p(x'')] dx''} dx'}{1 - \int_0^W \beta_p(x') e^{\int_{x'}^W [\alpha_n(x'') - \beta_p(x'')] dx''} dx'} \quad (2-29)$$

因此有:

$$J_n(x) = J e^{\varphi(x)} \int_0^x dx' \beta_p(x') e^{-\varphi(x')} + q e^{\varphi(x)} \int_0^x G(x') e^{-\varphi(x')} dx' + J_n(0) e^{\varphi(x)} \quad (2-30)$$

空穴的电流密度为:

$$J_p(x) = J - J_n(x) \quad (2-31)$$

如果以 $J_p(x)$ 为变量, 同理可得:

$$J_p(x) = \frac{\int_x^W dx' [\alpha_n(x') J + q G(x')] e^{\int_x^W [\alpha_n(x'') - \beta_p(x'')] dx''} + J_p(W)}{e^{\int_x^W [\alpha_n(x'') - \beta_p(x'')] dx''}} \quad (2-32)$$

利用 $x = 0$ 处的边界条件, 并且又因为

$$J_p(0) = J - J_n(0) \quad (2-33)$$

可得 J 的另外一个表达式:

$$J = \frac{J_p(W) + J_n(0) e^{\varphi(W)} + q \int_0^W G(x') e^{\int_{x'}^W [\alpha_n(x'') - \beta_p(x'')] dx''} dx'}{1 - \int_0^W \beta_p(x') e^{\int_{x'}^W [\alpha_n(x'') - \beta_p(x'')] dx''} dx'} \quad (2-34)$$

2.3.3 雪崩倍增

本节中分别考虑只有电子注入($x=0$ 处)、只有空穴注入($x=W$ 处)或者只有光子注入(x 处)三种情况下的倍增因子。

(1) 只在 $x=0$ 处有电子注入 ($J_p(W)=0$ 并且 $G(x)=0$)

由式(2-29)可得电子的倍增因子为:

$$M_n = \frac{J}{J_n(0)} = \frac{e^{\varphi(W)}}{1 - \int_0^W \beta_p(x') e^{\int_x^W [\alpha_n(x') - \beta_p(x')] dx'} dx'} \quad (2-35)$$

或者

$$M_n = \frac{J}{J_n(0)} = \frac{1}{1 - \int_0^W \alpha_n(x') e^{-\int_0^x [\alpha_n(x') - \beta_p(x')] dx'} dx'} \quad (2-36)$$

(2) 只在 $x=W$ 处有空穴注入 ($J_n(0)=0$ 并且 $G(x)=0$)

由式(2-34)可得空穴的倍增因子为:

$$M_p = \frac{J}{J_p(W)} = \frac{e^{-\varphi(W)}}{1 - \int_0^W \alpha_n(x') e^{-\int_0^x [\alpha_n(x') - \beta_p(x')] dx'} dx'} \quad (2-37)$$

或者

$$M_p = \frac{J}{J_p(W)} = \frac{1}{1 - \int_0^W \beta_p(x') e^{\int_x^W [\alpha_n(x') - \beta_p(x')] dx'} dx'} \quad (2-38)$$

(3) 只在 x 处有光子注入 $G(x') = G_0 \delta(x' - x)$ ($J_n(0)=0$ 并且 $J_p(W)=0$)

可得到总的电流密度为:

$$J = \frac{qG_0 e^{\int_x^W [\alpha_n(x') - \beta_p(x')] dx'}}{1 - \int_0^W \beta_p(x') e^{\int_x^W [\alpha_n(x') - \beta_p(x')] dx'} dx'} \quad (2-39)$$

与光子注入位置 x 相关的倍增因子为:

$$M(x) = \frac{J}{qG_0} = \frac{e^{\int_x^W [\alpha_n(x') - \beta_p(x')] dx'}}{1 - \int_0^W \beta_p(x') e^{\int_x^W [\alpha_n(x') - \beta_p(x')] dx'} dx'} \quad (2-40)$$

特别的, 当光子注入位置在 $x=0$ 和 $x=W$ 时可得:

$$M(x=0) = M_n \quad (2-41)$$

$$M(x=W) = M_p \quad (2-42)$$

通过改变外加偏压 V ，可以控制 p 区中的电子注入或者 n 区中的空穴注入，倍增因子 $M_n(V)$ 和 $M_p(V)$ 由外加偏压 V 决定^[46]。在外加偏压较低时，倍增因子随着偏压而缓慢增加。当外加偏压超过某一值时，倍增因子随偏压成指数增长。雪崩击穿电压定义为倍增趋于无穷大时的电压。令(2-36)、(2-38)和(2-40)式的分母等于零，便可以求出雪崩击穿电压。击穿电压与注入条件无关，但是由(2-40)式可知倍增与载流子注入的部位是有关的。

M_n 和 M_p 可以通过测量得到。如果 α_n 和 β_p 均与位置无关，则可以得到：

$$\alpha_n = \left(\frac{M_n - 1}{M_n - M_p} \right) \frac{1}{W} \ln \frac{M_n}{M_p} \quad (2-43)$$

$$\beta_p = \left(\frac{M_p - 1}{M_n - M_p} \right) \frac{1}{W} \ln \frac{M_n}{M_p} \quad (2-44)$$

从而可得光生响应电流为：

$$i = q\eta \frac{P}{h\nu} M \quad (2-45)$$

式中 η ——器件的量子效率；

$\frac{P}{h\nu}$ ——注入的光子数；

M ——倍增因子

第3章 硅雪崩光电二极管结构设计

3.1 引言

与直接带隙半导体材料相比,硅这样的间接带隙半导体是制备 APD 的优选材料。这是因为间接带隙半导体的带间隧道电流远比直接带隙半导体材料低。从而使制得的 APD 具有低的暗电流。目前高灵敏光电探测器主要有 PMT 和 APD。APD 具有体积小、可靠性高、功耗小、易集成等优点。由于硅中电子和空穴的碰撞离化系数差别很大,同时在 $0.8\sim 0.9\ \mu\text{m}$ 波段的石英光纤低传输损耗区具有合适的光吸收系数,因此是制备工作于该波段 APD 的理想材料。同时,制备硅器件也很容易应用传统的集成电路工艺技术。我们提出了一种新型的高增益台面结构 APD,该结构具有低暗电流、高探测率、均匀的雪崩电压等特点。在本章中,我们将讨论该新型 Si APD 的结构设计和性能。

3.2 器件结构分析设计

3.2.1 传统拉通型结构

在光纤通信系统中,要求探测器件在较低的偏压下工作,通常要求小于 200 V 左右。从交流-直流转换器的体积及可靠性的要求来说,工作电压越低越具优势。根据 Si 在 $0.8\sim 0.9\ \mu\text{m}$ 波段的光吸收系数,为获得高的量子效率,器件需要具有 $30\sim 50\ \mu\text{m}$ 长的耗尽区。在单边突变 pn 结中,为得到长的耗尽区及高的雪崩增益,根据偏置电压与电场的关系,即:

$$V = \int_0^L E dx \quad (3-1)$$

式中 L ——耗尽区宽度

理论上需要超过 500 V 的高偏置电压。

图 3-1 中实线表示单边突变 pn 结耗尽区的电场分布。载流子倍增发生在电场强度最高的区域,而该雪崩区与整个耗尽区相比非常薄。在耗尽区的其余部分,载流子仅以饱和速度漂移运动,并不发生雪崩倍增。对于 Si 而言,当电场强度大于 $1\times 10^4\ \text{Vcm}^{-1}$ 时,载流子的漂移速度就达到它的饱和速度^[8]。因此,为了降低器件的工作电压,可以将载流子漂移区内的电场减小到比较低但仍足以保持载流子以饱和速度漂移的值。为满足这一要求,光纤通信用的 Si APD 具有 $n^+-p-\pi-p^+$

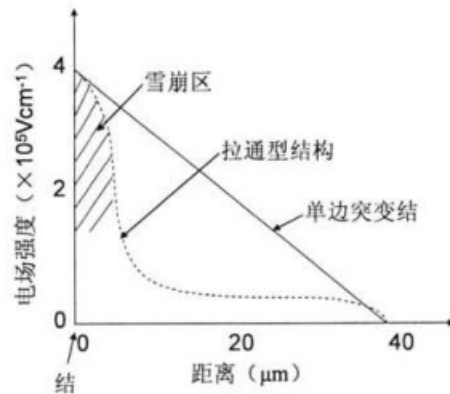


图 3-1 单边突变结二极管(实线)及拉通型二极管(虚线)的电场分布示意图^[15]

Fig.3-1 Electric field diagram of one-side abrupt junction diode (solid line) and reach-through diode (dashed line)

构成的拉通型结构^[47,48]。拉通型器件的结构如图 3-2 所示。该结构电场分布如图 3-1 虚线所示：电场由 n^+ 层扩展到 p^+ 层，但仅仅在雪崩区具有产生载流子碰撞离化所需的高电场。拉通型 APD 的工作电压可降到 200 V 左右。其中雪崩区所需的电压约 50 V，其余的电压则降落在耗尽区。该结构工艺上容易实现，并且可以方便的采用保护环技术抑制漏电，有较高的电学稳定性。光由 n^+ 表面入射，入射光主要在 π 层吸收。由于注入到雪崩区的主要是具有较高离化系数的光生电子，所以该结构的倍增噪声也较低。

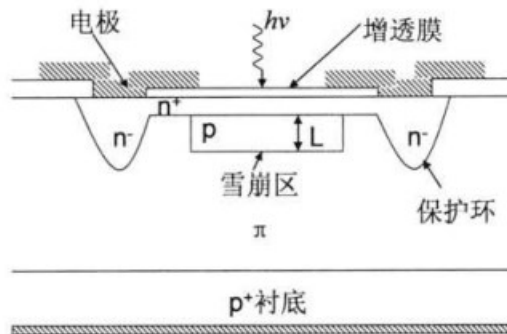


图 3-2 拉通型 Si APD 结构示意图^[48]

Fig.3-2 Schematic cross-section of Si APD with reach-through structure

在 Si 拉通型 APD 的设计中，p 型层是关键，因为它决定着器件的过剩噪声因子 F 及击穿电压 V_B 等参数。p 型层的掺杂水平相对较低，掺杂剂量为 $10^{12} \sim 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 量级。p 区的宽度一般为 $50 \sim 500 \mu\text{m}$ 。对于该层的掺杂浓度及深度需要精确控制，否则 F 和 V_B 值将不落在所预想的范围内。而离子注入工艺允许精确地控制掺杂剂量和掺杂深度，因此在本文工作的仿真和实验中我们均采用离子注入工艺。

真实的电场分布情况下, F 和 V_B 随电场的变化关系非常复杂。作简化假设: 雪崩区内电场强度为常数, 大小由外加偏压决定。击穿电压 V_B 下的最大电场 E_m 与雪崩区长度 L 之间的关系可以由下式给出的雪崩击穿条件计算得到:

$$\int_0^L \alpha \exp \left[\int_0^x (\beta - \alpha) dx' \right] dx = \int_0^L \beta \exp \left[\int_0^x (\alpha - \beta) dx' \right] dx = 1 \quad (3-2)$$

在简化电场分布条件下, 上式可简化为:

$$\ln \frac{k}{k-1} = \alpha L \quad (3-3)$$

式中 k ——离化系数比

利用式(3-3)可以计算得到 E_m 随 L 的变化关系, 如图 3-3 所示。计算采用的离化系数数据, 即电子和空穴的离化系数 α 和 β 分别为^[43]:

$$\alpha = 3.8 \times 10^6 \exp(-1.75 \times 10^6 / E) \text{cm}^{-1} \quad (3-4)$$

$$\beta = 2.25 \times 10^7 \exp(-3.26 \times 10^6 / E) \text{cm}^{-1} \quad (3-5)$$

E_m 值随 L 的增加而减小。根据式(3-3)同样可以得到 L 与峰值电场 E_m 下的载流子离化系数比 k 之间的关系, 如图 3-4 所示。 k 值随 L 的增加而下降, 表明器件的倍增噪声将随雪崩区宽度的增加而减小。

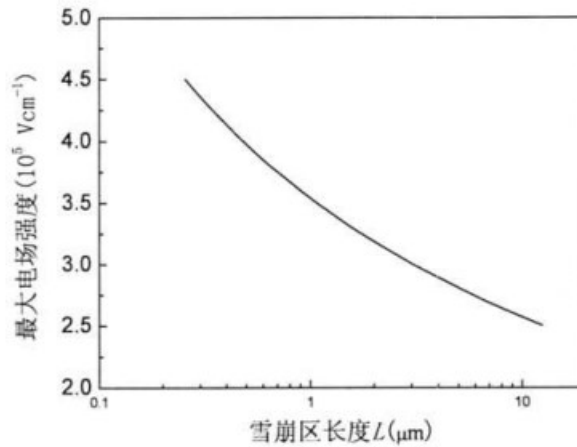


图 3-3 击穿电压下最大电场 E_m 随雪崩区长度 L 的变化关系

Fig.3-3 Maximum electric field E_m under the breakdown voltage depending on the avalanche zone length L

根据简化电场分布, 可以计算得到击穿电压 V_B 为:

$$V_B = E_m L + \left[q N_A (L_D - L)^2 / 2\epsilon \right] + E_D (L_D - L) \quad (3-6)$$

式中 N_A —— π 层的载流子浓度;

E_D ——耗尽区在 p^+ 层边缘处的电场强度；

L_D ——耗尽区长度

由于响应时间的要求， E_D 必须足够高以使载流子能以饱和速度漂移，

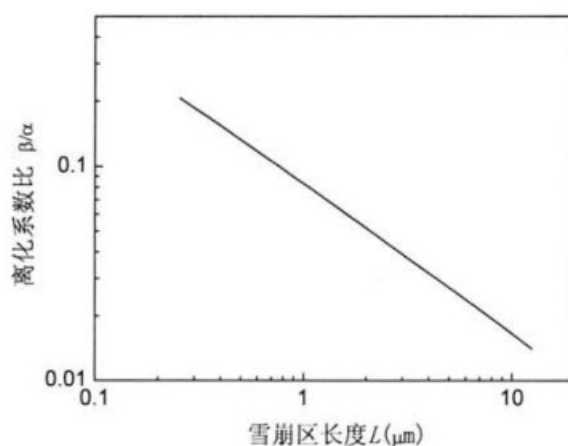


图 3-4 击穿电压下空穴与电子离子化系数比随雪崩区长度的变化关系

Fig.3-4 Ratio of hole and electron ionization coefficient under the breakdown voltage depending on the avalanche zone length L

3.2.2 新型硅雪崩光电二极管器件结构

在传统的拉通型 APD 结构基础上，为了获得低击穿电压的器件结构，根据式(3-6)可知，可以通过减小雪崩区长度来实现。但是，与此同时，雪崩区长度的减小同时降低了雪崩增益。在保持击穿电压不变，进一步提高增益，需要提高外加电压在雪崩区上的分压，同时抑制暗电流。为此我们可以提高 p 区的掺杂浓度，增加雪崩区的分压，并且减小雪崩区的尺寸，抑制高偏压下的产生复合电流。在此基础上，我们提出了如图 3-5 所示的新型的 Si APD 器件结构。

此结构有利于我们分别设计吸收区和倍增区的尺寸。为了保证器件与光纤之间的耦合及量子效率，可以将吸收区的宽度设计为几百微米的尺寸。由于硅材料本身的质量和制造工艺的均匀性限制，如果雪崩区尺寸过大，很难获得击穿电压一致好的器件，容易导致由于工艺或者材料缺陷导致的局域过早击穿。因此可以通过减小器件雪崩区的尺寸，来保证工艺的一致性。另外，在暗电流中，很大一部分是由于雪崩区内的热载流子激发造成的，通过减小雪崩区尺寸，可以有效抑制暗电流。但是，这种结构也存在着缺点：由于器件结构本身的原因，吸收区产生的部分光生载流子需要经过将近二分之一吸收区宽度的距离后才能到达雪崩

区,从而限制了器件的响应时间。此外,结构中还引入了n型漂浮层,由于其与p型层之间的内建电场方向和器件工作在反向偏置条件下的外加电场方向相反,因此会降低器件台阶侧壁附近的电场,从而使得载流子尽可能靠近台阶中间部分输运,进而减小了台阶侧壁的表面复合。

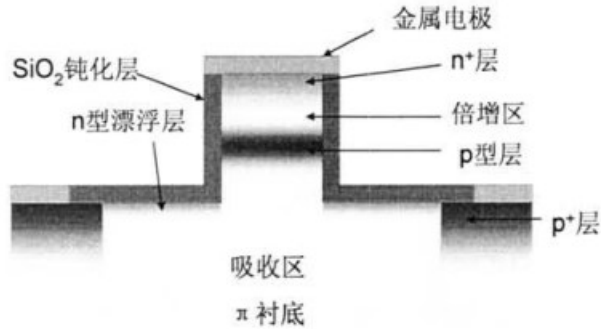


图 3-5 新型 Si APD 结构示意图

Fig.3-5 Schematic cross-section of a novel Si APD

3.3 ISE TCAD 仿真模拟

为了了解器件内部电场分布及设计优化器件结构,本章使用 ISE TCAD 模拟软件,对 3.2.2 节中提出的新型 Si APD 结构进行仿真模拟。工艺及器件模拟仿真工具 ISE TCAD 是瑞 ISE(Integrated Systems Engineering)公司开发的 DFM(Design for Manufacturing, 可制造设计)软件。它是一种建立在物理基础上的数值仿真工具,通过运用计算机求解基本的半导体偏微分方程组,得到描述器件特性的参数。

3.3.1 ISE TCAD 模拟方法

ISE TCAD 主要包括工艺模拟和器件模拟两大功能模块。工艺模拟可以完成半导体制造过程中工艺步骤的仿真,例如离子注入、氧化、扩散、刻蚀、退火等工艺均可在仿真中实现。器件模拟可以对半导体器件的电特性进行仿真试验,通过将器件结构离散为有限元网格,利用数值算法求解各个结点上的泊松方程、连续性方程等,近似估计器件内部的载流子浓度、电流、电场及能带结构等。边界条件可以通过添加电极来改变,并在电极上提取器件的电学参数。

ISE TCAD 提供了求解偏微分方程的两种数值算法: Newton's Method (耦合算法)及 Gummel's Method (非耦合算法)。两种方法都是要求解大量的线性方程组,收敛速度取决于所求解方程的个数,网格划分直接影响到计算时间。Gummel 法求解的成功与否与方程的耦合程度相关,而 Newton 法求解过程虽然

所需时间较长，但是是非常稳定的求解方法，因此本文中采用 Newton 算法。在对 Si APD 特性的仿真中，利用 ISE TCAD 的工艺模拟功能，采用了流体动力学传输模型(Hydrodynamic Transport Model)。对于大尺寸器件，通常采用漂移扩散传输模型对器件进行物理描述。随着器件尺寸的减小，漂移扩散传输模型已不再适用描述器件内部的物理过程，尤其是速度过冲效应和碰撞电离产生率。可以通过对波尔兹曼动力学方程进行蒙特卡洛模拟计算得到器件的分析，但是这种方法的计算量过大，不能满足工业制造中的需求。在这种情况下，发展了流体动力学传输模型^[49]。

3.3.2 ISE TCAD 仿真模型

(1) 流体动力学传输模型^[50]

在流体动力学传输模型中，假设电子和空穴的温度 T_n 和 T_p 与晶格温度 T_L 不同。流体动力学传输模型除了包含泊松方程和载流子连续性方程外，还包含了载流子的温度和热流方程(分别描述电子、空穴和晶格的温度)。在该模型中，电流密度定义为：

$$J_n = q\mu_n \left(n\nabla E_C + k_B T_n \nabla n + f_n^{td} k_B n \nabla T_n - 1.5 n k_B T_n \nabla \ln m_e \right) \quad (3-7)$$

$$J_p = q\mu_p \left(p\nabla E_V - k_B T_p \nabla p - f_p^{td} k_B p \nabla T_p - 1.5 p k_B T_p \nabla \ln m_h \right) \quad (3-8)$$

式中 E_C ——导带能量；

E_V ——价带能量

式(3-7)和(3-8)中第一项描述了静电势、电子亲和势和禁带宽度的空间变化对电流密度的贡献。剩下的三项描述了载流子浓度梯度、载流子温度梯度和有效质量 m_e 和 m_h 的空间变化对电流密度的贡献。

能量平衡方程由Stratton建立，能量平衡方程为：

$$\frac{\partial W_n}{\partial t} + \nabla \cdot S_n = J_n \cdot \nabla E_C + \left. \frac{dW_n}{dt} \right|_{coll} \quad (3-9)$$

$$\frac{\partial W_p}{\partial t} + \nabla \cdot S_p = J_p \cdot \nabla E_V + \left. \frac{dW_p}{dt} \right|_{coll} \quad (3-10)$$

$$\frac{\partial W_L}{\partial t} + \nabla \cdot S_L = \left. \frac{dW_L}{dt} \right|_{coll} \quad (3-11)$$

其中的能量流为：

$$S_n = -\frac{5r_n}{2} \left(\frac{k_B T_n}{q} J_n + f_n^{hf} \kappa_n \nabla T_n \right) \quad (3-12)$$

$$S_p = -\frac{5r_p}{2} \left(\frac{-k_B T_p}{q} J_p + f_p^{hf} \kappa_p \nabla T_p \right) \quad (3-13)$$

$$S_L = -\kappa_L \nabla T_L \quad (3-14)$$

$$\kappa_n = \frac{k_B^2}{q} n \mu_n T_n \quad (3-15)$$

$$\kappa_p = \frac{k_B^2}{q} p \mu_p T_p \quad (3-16)$$

其中涉及 r 和 f 的6个参数由仿真工具给出, 并且可以改变。这些参数的大小影响到速度分布等物理结果。仿真工具中的默认值为:

$$r_n = r_p = 0.6 \quad (3-17)$$

$$f_n^{td} = f_p^{td} = 0 \quad (3-18)$$

$$f_n^{hf} = f_p^{hf} = 0 \quad (3-19)$$

能量平衡方程中的碰撞项为:

$$\left. \frac{dW_n}{dt} \right|_{coll} = -H_n - \frac{W_n - W_{n0}}{\tau_{en}} \quad (3-20)$$

$$\left. \frac{dW_p}{dt} \right|_{coll} = -H_p - \frac{W_p - W_{p0}}{\tau_{ep}} \quad (3-21)$$

$$\left. \frac{dW_L}{dt} \right|_{coll} = H_L + \frac{W_n - W_{n0}}{\tau_{en}} + \frac{W_p - W_{p0}}{\tau_{ep}} \quad (3-22)$$

其中, H_n 、 H_p 、 H_L 用来表述产生复合过程中能量的获得或者损失, 对于主要的产生复合过程, 其近似表达式为:

$$H_n = 1.5k_B T_n ((R^{SRH} + R^{rad}) + R_n^{trap}) + E_g (R_n^A - G_n^{ii}) \quad (3-23)$$

$$H_p = 1.5k_B T_p ((R^{SRH} + R^{rad}) + R_p^{trap}) + E_g (R_p^A - G_p^{ii}) \quad (3-24)$$

$$H_L = [R^{SRH} + 0.5(R_n^{trap} + R_p^{trap})](E_g + 1.5k_B T_n + 1.5k_B T_p) \quad (3-25)$$

式中 R^{SRH} ——SRH复合率;

R^{rad} ——辐射复合率;

R_n^A ——电子的俄歇复合率；

R_p^A ——空穴的俄歇复合率；

G_n^{ii} ——电子碰撞电离率；

G_p^{ii} ——空穴碰撞电离率；

R_n^{trap} ——电子通过陷阱能级复合的复合率；

R_p^{trap} ——空穴通过陷阱能级复合的复合率

与体内的SRH复合相似，计算中表面复合也被考虑。通常情况下， H_n 、 H_p 和 H_L 的影响比较小。

能量密度 W_n 、 W_p 和 W_L 的表达式为：

$$W_n = n w_n = n(1.5 k_B T_n) \quad (3-26)$$

$$W_p = p w_p = p(1.5 k_B T_p) \quad (3-27)$$

$$W_L = c_L T_L \quad (3-28)$$

平衡状态下的能量密度为：

$$W_{n0} = n w_0 = n(1.5 k_B T_L) \quad (3-29)$$

$$W_{p0} = p w_0 = p(1.5 k_B T_L) \quad (3-30)$$

流体动力学传输模型中，如果只用到一种载流子，则另外一种载流子的温度设置和晶格温度一致。

(2) 准费米势^[50]

电子和空穴的浓度可以通过电子和空穴的准费米势计算得出，反之亦然。在波尔兹曼分布条件下，载流子浓度可以表示为：

$$n = N_C \exp\left(\frac{E_{Fn} - E_C}{kT}\right) \quad (3-31)$$

$$p = N_V \exp\left(\frac{E_V - E_{Fp}}{kT}\right) \quad (3-32)$$

式中 N_C ——导带有效状态密度；

N_V ——价带有效状态密度；

E_{Fn} ——电子的准费米能级，等于 $-q\phi_n$ ；

E_{Fp} ——空穴的准费米能级，等于 $-q\phi_p$ ；

ϕ_n ——电子的准费米势；

ϕ_p ——空穴的准费米势；

E_C ——导带边界的能量；

E_V ——价带边界的能量

其中 E_C 和 E_V 定义为:

$$E_C = -\chi + \Delta E_{g,C} - q(\Psi - \Psi_{ref}) \quad (3-33)$$

$$E_V = -\chi - E_g + \Delta E_{g,V} - q(\Psi - \Psi_{ref}) \quad (3-34)$$

式中 χ ——电子亲和势;

E_g ——禁带宽度;

$\Delta E_{g,C/V}$ ——描述禁带宽度变窄效应;

Ψ ——静电势;

Ψ_{ref} ——参考电势

在费米狄拉克统计分布条件下, 电子和空穴浓度改写为:

$$n = N_C F_{1/2} \left(\frac{E_{F_n} - E_C}{kT} \right) \quad (3-35)$$

$$p = N_V F_{1/2} \left(\frac{E_V - E_{F_p}}{kT} \right) \quad (3-36)$$

其中 $F_{1/2}$ 表示费米积分的 1/2 次方。

在费米狄拉克分布条件下, 电流密度方程和能流密度方程的形式会发生改变, 对于电子来说, 方程改变为:

$$J_n = \mu_n (qn \nabla E_C + k_B T_n \nabla n - nk_B T_n \nabla (\ln \gamma_n) + \lambda_n f_n^{id} k_B n \nabla T_n - 1.5 nk_B T_n \nabla \ln m_c) \quad (3-37)$$

$$S_n = -\frac{5}{2} r_n \lambda_n \left(\frac{k_B T_n}{q} J_n + f_n^{hf} \kappa_n \nabla T_n \right) \quad (3-38)$$

其中

$$\lambda_n = \frac{F_{1/2}(\eta_n)}{F_{-1/2}(\eta_n)} \quad (3-39)$$

对于空穴来说, 电流密度和能量密度的表达形式可以做类似改变。

流体动力学传输模型的重要作用就是仿真器件击穿, 它可以避免漂移扩散传输模型中的过早击穿。在模拟过程中, 电极接触为欧姆接触, 复合模型为SRH (Shockley Read Hall recombination)、Auger和Band2band (Band to Band tunneling) 模型, 考虑了带宽和有效态密度随温度的变化, SiO₂绝缘层和半导体界面处的界面电荷、氧化层固定电荷, 重掺杂对本征载流子浓度的影响和载流子散射模型等, 同时加入碰撞电离模型, 以观察高电场下器件的雪崩倍增效应。

3.3.3 硅雪崩光电二极管仿真模拟

本节使用ISE TCAD软件对3.2.2节中提出的新型Si APD结构进行仿真模拟,研究器件的电学和光学特性。我们使用ISE TCAD中的工艺仿真工具,仿真中的工艺条件由实际硅工艺条件决定。具体参数设定如图3-6所示:由于我们只是用了软件的二维仿真工具,对于器件的厚度恒定设置为 $1\text{ }\mu\text{m}$ 。台阶高度恒定为 $1\text{ }\mu\text{m}$ 。为了获得精确的掺杂结构,掺杂均采用离子注入工艺,n型掺杂注入砷,p型掺杂注入硼。衬底材料为p型(100) Si,电阻率为 $150\text{ }\Omega\cdot\text{cm}$ 。台阶表面 n^+ 层离子注入能量为 30 keV ,剂量为 $1\times 10^{15}\text{ cm}^{-2}$ 。台阶中间p层离子注入能量为 150 keV ,剂量为 $1\times 10^{13}\text{ cm}^{-2}$ 。台阶底部表面n层离子注入能量为 30 keV ,剂量为 $1\times 10^{14}\text{ cm}^{-2}$ 。台阶底部表面 p^+ 层由两次离子注入实现,能量分别为 30 keV 和 150 keV ,剂量均为 $1\times 10^{15}\text{ cm}^{-2}$ 。离子注入后退火条件为 1050°C , 20 s 。器件工作温度恒定为室温(300 K)。改变台阶宽度(A)和吸收区宽度(B),对器件的电流-电压特性进行仿真计算。

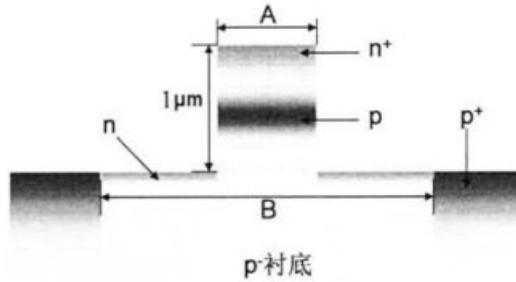


图3-6 Si APD仿真结构示意图

Fig.3-6 Schematic cross-section of Si APD in the simulation

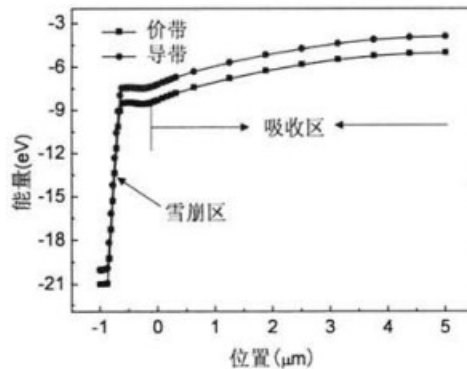


图 3-7 击穿条件下 Si APD 能带图仿真结果

Fig.3-7 The simulation result of energy band of Si APD above breakdown voltage

器件击穿时(反向偏压15 V)的能带图仿真结果如图3-7所示。当反向偏置电压(5 V)小于击穿电压时,器件暗电流的计算结果如表3-1所示。根据表3-1中的结果,绘制暗电流随器件尺寸变化关系如图3-8、3-9所示。容易看出,随着台阶宽度和吸收区宽度的增加,器件的暗电流均呈增加趋势,并且暗电流随吸收区宽度的变化大于随台阶宽度的变化。这是因为在室温条件下,根据式(1-7)-(1-9)可知,吸收区内部未耗尽的中性区的产生复合电流对于暗电流将起主要作用。

表 3-1 反向偏置下不同器件尺寸 Si APD 的暗电流仿真结果

Table 3-1 Simulation results of dark current of Si APD with different size under reverse bias

器件编号	A (μm)	B (μm)	暗电流(nA)
1	2	100	1.3516
2	4	100	1.3572
3	20	100	1.4173
4	80	100	1.5508
5	4	50	0.7245
6	4	84	1.1659

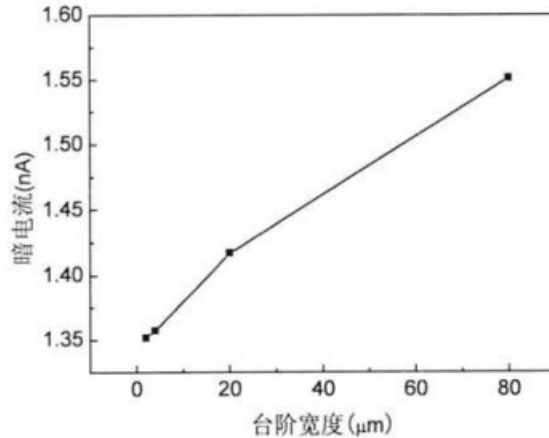


图 3-8 反向偏置下 Si APD 暗电流与台阶宽度关系

Fig.3-8 Si APD dark current depending on the mesa width under reverse bias

对于表3-1中的6种器件,沿着器件纵向中间部位截取的电场强度分布如图3-10所示。可以发现,3号和4号电场最强,1号最小,2号、5号和6号相同。这是因为,随着器件中台阶宽度尺寸的减小,台阶与金属电极之间的欧姆接触电阻增大,从而在外加偏压不变的条件下,接触电阻上的分压增大,从而器件内部分压减小,进而导致电场减弱。我们发现当台阶尺寸大于20 μm 后,欧姆接触电阻可以忽略,器件尺寸的改变已经不影响内部电场。但是当台阶尺寸小到2 μm 时,电

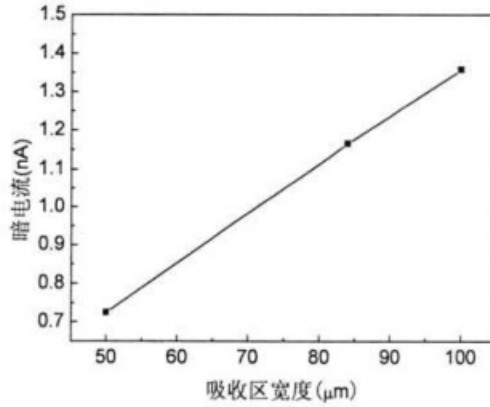


图 3-9 反向偏置下 Si APD 暗电流与吸收区宽度关系

Fig.3-9 Si APD dark current depending on the absorption area width under reverse bias

场的减小很明显,随着台阶尺寸的进一步减小,欧姆接触电阻的影响将更加显著,因此在实验中,应优化工艺,制备良好的欧姆接触。

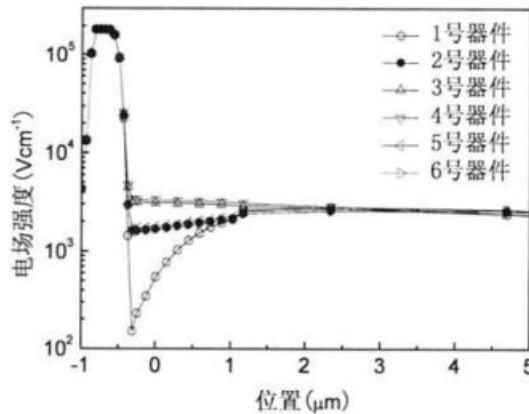


图 3-10 反向偏置下不同尺寸 Si APD 纵向电场分布仿真结果

Fig.3-10 The simulation results of electric field of Si APD with different size under reverse bias

接下来将台阶中间 p 层离子注入剂量改为 $1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$, 其他条件不变。对于台阶尺寸 20 μm , 吸收区尺寸 100 μm 的器件加光照进行模拟仿真, 光照波长 800 nm , 功率为 1 Wcm^{-2} , 仿真计算器件的增益, 结果如图 3-11 所示。光电流为 I , 暗电流为 I_{dark} , 则光生电流为 $(I - I_{\text{dark}})$ 。我们在此定义增益为:

$$M = \frac{I - I_{\text{dark}}}{(I - I_{\text{dark}})_{\text{@击穿前}}} \quad (3-40)$$

式中分母取反偏电压小于击穿电压 (5 V) 时器件的光生电流。由仿真结果可以发

现，该器件的击穿电压约为 6.3 V，在击穿以后，器件的增益可达到 2000 左右。

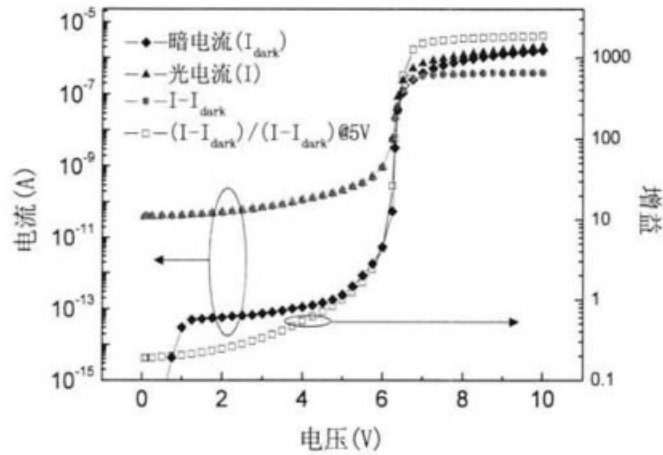


图 3-11 Si APD 电流和增益随反偏电压变化关系

Fig.3-11 Current and gain of Si APD depending on reverse voltage

其他结构不变，进一步只减小台阶尺寸，按照式(3-40)计算增益，结果如图 3-12 所示。我们发现，随着器件台阶尺寸从 10 μm 减小到 0.1 μm ，击穿电压从 8 V 增加到 9.3 V 左右，同时，增益从 10^4 增至 10^6 。击穿电压的增加主要是由于电路串联电阻的增加和 p 型电荷区载流子积累引入的附加电场导致的。增益的增加依赖于暗电流的减小和雪崩区电场的增强。由于器件台阶尺寸的减小，雪崩发生后，雪崩区的产生复合电流大大降低，同时台阶部分的等效串联电阻迅速增大，从而器件内部雪崩区分压增大，吸收区分压减小，导致雪崩区电场增强。

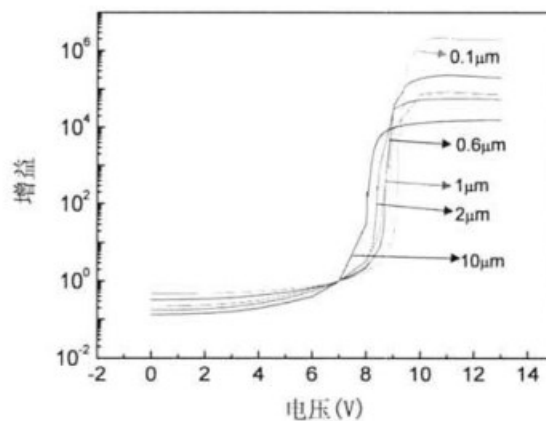


图 3-12 不同台阶宽度 Si APD 增益随反偏电压变化关系

Fig.3-12 Gain of Si APD with different mesa width depending on reverse voltage

接下来研究 n 型漂浮层对于器件增益的影响。以台阶宽度尺寸 $10\ \mu\text{m}$ 的器件为例，仿真结果如图 3-13 所示。图示中，虚线为有 n 型漂浮层结构器件的仿真结果，实线为没有 n 型漂浮层结构器件的仿真结果，红线为两种结构光电流曲线，黑线为暗电流曲线。我们发现，当器件反偏电压较小时(小于击穿电压)，两种结构的暗电流和光电流均接近相等。随着反偏电压的进一步增大，有 n 型漂浮层结构的器件的暗电流和光电流均小于相同电压下无 n 型层的结构，这表明 n 型层的引入，增加的附加内建电场，减弱了器件的内建场强，从而导致雪崩效应减弱。通过进一步计算两种结构的增益曲线，如图 3-14 所示，发现有 n 型层结构的器件在击穿后增益大于无 n 型层结构器件，这表明，n 型层的引入对于暗电流的抑制作用更强。这是由于 n 型层引入的附加场虽然减弱了器件内部电场，但是这个减弱效果主要集中在器件台阶的侧壁附近，从而使得载流子尽可能沿着台阶中间部位电场较强的趋于向雪崩区运动，进而到达 n^+ 电极，有效地减小了雪崩区台阶侧壁的过早击穿，从而提高了雪崩增益。

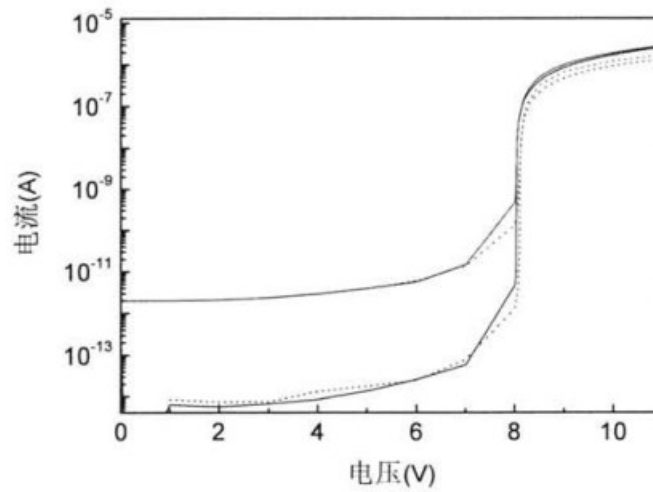


图 3-13 Si APD 光电流(红线)和暗电流(黑线)随反偏电压变化关系(其中实线表示没有 n 型漂浮层结构，虚线表示有 n 型漂浮层结构)

Fig.3-13 Light current (red line) and dark current (black line) of Si APD depending on reverse voltage (the solid line: without the n-floating, the dotted line: with the n-floating)

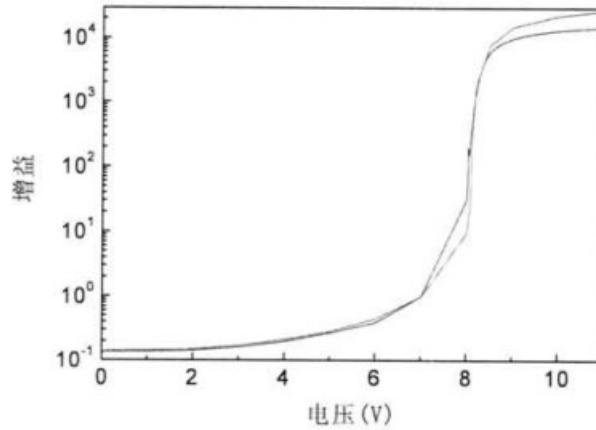


图 3-14 Si APD 增益随电压变化关系(其中黑线表示没有 n 型漂浮层结构, 红线表示有 n 型漂浮层结构)

Fig.3-14 Gain of Si APD depending on voltage (the black line: without the n-floating, the red line: with the n-floating)

3.4 小结

本章提出了一种新型的高增益、低击穿电压的 Si APD 结构, 并通过使用 ISE TCAD 软件进行工艺仿真模拟, 对于器件尺寸对器件击穿电压、暗电流、增益的影响进行了仿真研究分析。结果发现, 通过减小台阶尺寸可以有效的提高器件的增益, 当台阶尺寸为 100 nm 时, 器件雪崩击穿电压为 9.3 V 左右, 当此器件工作电压高于击穿电压时, 可获得 10^6 量级的增益。同时发现 n 型漂浮层的引入可以有效减小暗电流, 提高器件增益。

第4章 硅雪崩光电二极管制备工艺研究

4.1 引言

对于本文中设计的器件结构,传统的硅工艺就可满足制备要求。尽管传统的硅工艺技术已经十分成熟,但是我们仍需利用现有的实验条件,结合器件的结构特点,对于制备器件中需要的硅工艺进行了实验研究。本节主要对于器件制备中非常关键的感应耦合等离子体(ICP)刻蚀工艺进行了深入的研究分析,详细分析了 Cl_2/Ar 等离子体刻蚀 Si 工艺中的物理和化学机制与过程。

4.2 ICP 刻蚀工艺研究

4.2.1 ICP 刻蚀介绍

硅的刻蚀工艺,分为湿法刻蚀和干法刻蚀。湿法刻蚀对于材料的选择性好,但是对于同种材料,不同方向的刻蚀速率基本一致,为各向同性刻蚀,很难获得陡峭的侧壁形貌。为了获得陡峭度好的各向异性刻蚀,则需进行干法刻蚀。ICP 刻蚀是一种目前使用非常广泛的干法刻蚀技术。对于光学器件中硅台面的刻蚀,侧壁的形貌直接影响到器件的性能^[51]。ICP 已经被广泛应用于沟槽的刻蚀。ICP 刻蚀系统可以为刻蚀工艺提供大直径的腔室环境和高密度的等离子体,并且 ICP 中离子轰击导致的表面损伤^[52,53]明显小于反应离子刻蚀(RIE)。本实验中采用的 ICP 刻蚀设备为 Oxford PlasmaLab system100 (ICP180),刻蚀腔室环境如图 4-1 所示。该系统有两套自动匹配网络控制的射频源,其中一套频率 13.56 MHz 的射频功率 (ICP 功率) 控制等离子体的产生,另一套频率 13.56 MHz 的射频功率 (RF 功率) 控制等离子体轰击衬底上刻蚀材料表面的能量。

4.2.2 ICP 刻蚀规律及机制

在本实验中,刻蚀样品为 n 型 Si (100),电阻率 $0.001 \sim 0.009 \ \Omega \cdot \text{cm}$ 。利用 AZ6124 (AZ Electronic Materials) 光刻胶作掩膜研究刻蚀规律,胶厚 $2.5 \ \mu\text{m}$ 。光刻胶掩膜图形为宽 $8 \ \mu\text{m}$,间隔 $80 \ \mu\text{m}$ 周期排列的长方形条带,由标准的光刻工艺制作而成。随后附加的 SiO_2 掩膜实验中, SiO_2 利用 PECVD 生长,厚度为 $400 \ \text{nm}$,光刻图形和光刻胶掩膜图形相同,刻蚀完毕后没有去除剩余掩膜。带有掩

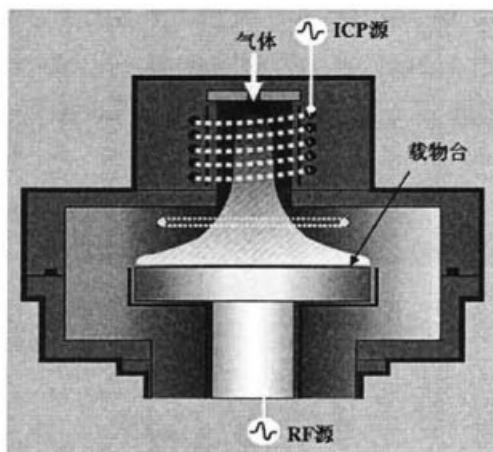


图4-1 ICP刻蚀腔室示意图

Fig.4-1 Schematic diagram of ICP etching chamber

膜图形的硅样品被放置在石英载物台上，并被传输送进 ICP 刻蚀系统腔室内进行刻蚀。刻蚀系统衬底温度恒定为20°C，每个样品均刻蚀5分钟。刻蚀硅的反应离子由Cl₂提供，通过添加Ar增加物理轰击作用，改变刻蚀结果。刻蚀完成后，用丙酮去除光刻胶掩膜。用台阶仪测量刻蚀后硅的台阶高度，并计算刻蚀速率。为了减少测量误差对结果造成的影响，对每个样品均随机选择测量4个点后取平均值。刻蚀沟槽的侧壁形貌用扫描电子显微镜 (SEM) 照片表征。

用氯原子对硅进行纯化学刻蚀时，刻蚀速率的表达式符合广义的 Arrhenius 形式^[54]：

$$E_{\text{Si}} = A n_D^\gamma n_{\text{Cl}} T^{1/2} e^{-B/T} \quad (4-1)$$

式中 n_D ——n型硅片的掺杂浓度；

n_{Cl} ——氯原子浓度

参数 A 、 B 和 γ 的值取决于硅片的晶向。对于本实验中的样品，利用 Flamm^[55] 实验结果中给出的相关参数，计算得氯原子纯化学刻蚀速率小于6 nm·min⁻¹，这个数值比本实验结果中离子辅助刻蚀速率小了近两个数量级。

在Cl₂/Ar混合气体的半导体刻蚀工艺中，氯原子作为化学反应基团，Ar⁺、Cl₂⁺和Cl⁺作为物理轰击离子。根据Hoekstra等人^[56]和Cheng等人^[57]的研究工作，Cl₂/Ar等离子体刻蚀硅主要经历如下几个反应过程((4-2)-(4-5))。

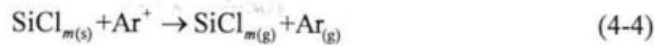
材料表面的氯化反应：



其中 $X = \text{Cl}$ 、 Cl^+ 或 Cl_2^+ ； $x = 0$ 、1、2或3； $Y = \text{Cl}$ 、 Cl^+ 或不存在； $y = 1$ 、2、3或4。

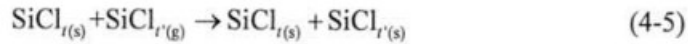
离子溅射：





其中 $Z = \text{Cl}^+$ 或 Cl_2^+ ; $Z' = \text{Cl}$ 、 Cl_2 或不存在; $m = 0$ 、 1 、 2 或 3 。在此溅射过程中, Cl^+ 和 Cl_2^+ 可以同时硅表面制造吸附位和氯化表面。

气态氯化物的重新沉积:



其中 $t = 0$ 、 1 、 2 或 3 ; $t' = 1$ 、 2 或 3 。

反应(4-3)和(4-4)表明 Ar^+ 、 Cl_2^+ 和 Cl^+ 可以提供进行物理辅助刻蚀的轰击离子源, 从而实现快速各向异性刻蚀。在同等条件下, Ar 电离成离子的效率远高于 Cl_2 的电离^[58], 而对于离子辅助刻蚀, 离子物理轰击的存在必不可少, 因此必须在 Cl_2 中加入适当的 Ar 以保证相对较高的刻蚀速率。随着压强的增大, 离子的碰撞复合概率增加, ICP 源的效率会降低, 因此在我们的整个实验过程中, 系统被恒定在低压环境下 (6 mTorr)。

图4-2为硅的刻蚀速率及选择比随着 Ar 气体流量所占比例的变化规律。 Cl_2 流量恒定为 20 sccm, ICP 功率为 400 W, RF 功率为 100 W。 Ar 所占比例范围为 30~80%, 硅刻蚀速率总趋势是随着 Ar 比例的增加而减小。在 Cl_2 等离子体刻蚀硅的过程中, 等离子体中会含有高浓度的刻蚀产物^[59]。等离子体中的刻蚀产物再沉积到衬底上(反应(4-5))会降低刻蚀速率。当 Ar 比例较低时, 高能 Ar 离子的物理辅助刻蚀对于材料表面刻蚀起着关键作用。随着 Ar 比例的增加, 混合气体中 Cl_2 所占比例减小, 从而在等离子体中产生更多的 Ar 离子和更少的 Cl 、 Cl^+ 和 Cl_2^+ 。 Ar 离子的增加增强了物理辅助刻蚀几率, 但与此同时化学刻蚀几率也相对降低, 有充分的 Ar 离子轰击材料表面去除反应产物, 但因为 Cl_2/Ar 比例降低导致氯原子等化学

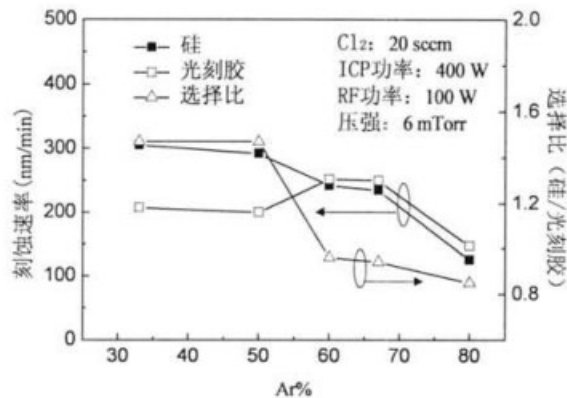


图 4-2 刻蚀速率和选择比随 Cl_2/Ar 混合气体中 Ar 所占比例变化规律

Fig.4-2 Etch rate and selectivity against percent of Ar in Cl_2/Ar gas mixture

反应基团的减少,从而硅刻蚀速率受到了限制,但是对于光刻胶的刻蚀速率也因此而增强,从而导致了选择比的降低。尽管Ar的增加,直接物理溅射去除Si的几率增加,但该作用相对较弱,并不能补偿化学刻蚀速率的减少。此外,由于在氯原子存在条件下, Cl_2^+ 和 Cl^+ 对硅的刻蚀产率比 Ar^+ 至少高两个数量级^[60],这也是随着Ar比例增加刻蚀速率降低的一个原因。当Ar比例大于70%时,刻蚀速率迅速降低。另一个可能的原因是随着Ar比例的增加,直流偏压会降低,从而导致离子物理轰击作用减弱^[61],因此在Ar所占比例很高时,物理去除材料表面反应产物变得更加困难,此时尽管选择比依旧成下降趋势,但是对于光刻胶的刻蚀速率由于物理刻蚀的减弱而降低。

如图4-3所示,硅的刻蚀速率随着ICP功率的增加先增加再减小,但整体上趋于不变,而选择比则表现为上升趋势。此时,由于RF功率恒定,因此离子轰击能量没有发生变化。刻蚀速率的增加是由于随着ICP功率的增加,化学反应粒子浓度增加,这些活性粒子可以到达材料表面并促进化学刻蚀。当ICP功率达到最优值后,继续只仅仅增加ICP功率不能再提高等离子体密度。本实验中,ICP功率在200 W附近达到最优。然后,随着ICP功率的增加,刻蚀速率缓慢下降。这是由于随着ICP功率的增加,离子的平均自由程降低,结果导致 Cl^+ 和 Cl_2^+ 的浓度增加,氯原子浓度降低,从而离子辅助刻蚀随着氯原子与氯离子流量比的减小而减弱^[60]。同时,因为离子间互相碰撞的增强,使得离子入射到材料表面的动能降低,因此直接限制了对于光刻胶的刻蚀速率,选择比上升。刻蚀反应受到能够到达刻蚀表面氯原子浓度的限制。随着ICP功率的变化,硅刻蚀速率基本保持在235 $\text{nm}\cdot\text{min}^{-1}$ 左右,没有发生显著变化,这归功于物理刻蚀和化学刻蚀的相对平衡。

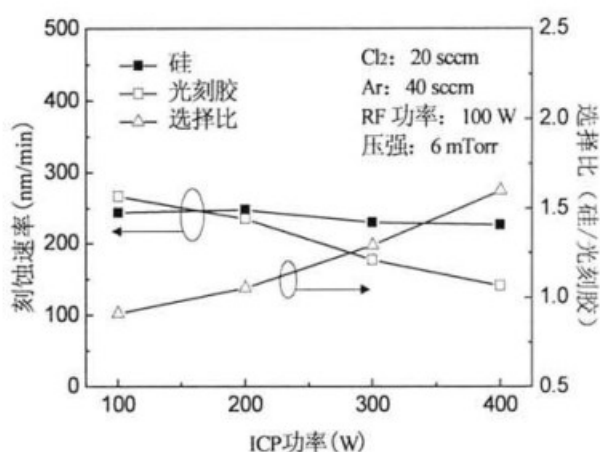


图 4-3 刻蚀速率和选择比随 ICP 功率变化规律

Fig.4-3 Etch rate and selectivity against ICP power

尽管氯原子浓度降低减少了材料表面的氯化过程(反应(4-2)), 但与此同时增加的 Cl^+ 和 Cl_2^+ , 增强了离子溅射(反应(4-3)), 在一定程度上补偿了由于氯原子减少导致的刻蚀速率降低。

硅刻蚀速率和选择比随RF功率的变化规律如图4-4所示。ICP功率恒定为200 W。硅刻蚀速率随着RF功率的增加近似直线上升。根据经典的Gerlach-Meyer模型^[62], 离子辅助氯刻蚀速率由直接物理溅射速率、自发化学刻蚀速率和离子辅助刻蚀速率三部分组成。

离子辅助刻蚀速率^[63](ER) ($\text{atoms}\cdot\text{cm}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$):

$$\text{ER} \propto \theta_{\text{Cl}} \Phi_{\text{ion}} Y(E_{\text{ion}}) \quad (4-6)$$

式中 θ_{Cl} ——材料表面的氯化率;

Φ_{ion} ——离子流量;

$Y(E_{\text{ion}})$ ——表面Cl恒定条件下的溅射产率;

E_{ion} ——离子能量

当离子能量较低时, 溅射产率可以表示为^[64]:

$$Y(E_{\text{ion}}) \approx A(E_{\text{ion}}^{1/2} - E_{\text{th}}^{1/2}) \quad (4-7)$$

式中 E_{th} ——阈值能量;

A ——常数

在刻蚀过程中, RF功率的绝大部分被用来增强离子轰击和热电子的产生, 而不是增强电离过程^[65]。在等离子体浓度保持不变时, 离子辅助刻蚀速率随着RF功率的增加而增大((4-6)式和(4-7)式)。当离子轰击效率高时, 材料表面的氯化产物

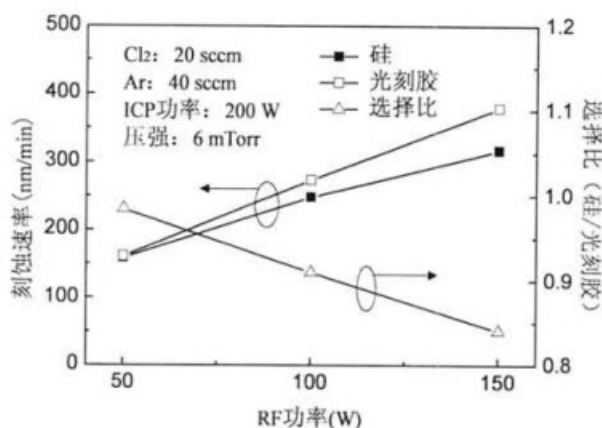


图 4-4 刻蚀速率和选择比随 RF 功率变化规律

Fig.4-4 Etch rate and selectivity against RF power

会被很快移除,使得新鲜的材料表面暴露出来。此外,Ar离子轰击能量随着RF功率的增大而增大,直接物理溅射去除Si的速率也随之增大,同时由于光刻胶主要依靠离子轰击物理去除,因此光刻胶的刻蚀速率也随RF功率线性增加,并且增加的速度大于硅刻蚀速率的增加。选择比随着RF功率的增大而减小。结果表明RF功率对于刻蚀速率的影响十分显著。

图4-5为硅片样品在不同 ICP 刻蚀条件下沟槽侧壁的 SEM 图。图4-5 a)和图4-5 b)的RF功率不同,其他条件相同。图4-5 b)和图4-5 c)的ICP功率不同,其他条件相同。可以看出它们在侧壁坡度、微槽效应以及侧壁形貌上存在差异,其中a)图正面的条纹是由解理过程导致的。侧壁坡度分别为 $\sim 64^\circ$ (a)、 $\sim 68^\circ$ (b)和 $\sim 90^\circ$ (c)。b)的微槽比a)深,而c)的微槽最深。由于沟槽角落附近的刻蚀速率比沟槽中间快而在其角落附近形成的槽状形貌被称为微槽。当发射到光刻胶和沟槽侧壁的高能粒子的入射角大于 80° 时,它们会发生镜面反射^[66],到达沟槽底部角落附近,从而加速该区域刻蚀速率形成微槽。在等离子体刻蚀中材料表面的

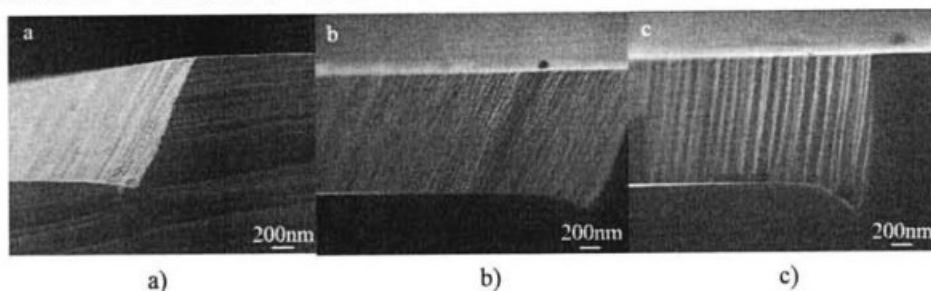


图 4-5 光刻胶掩膜下 Cl_2/Ar 等离子体刻蚀 Si 侧壁形貌 SEM 图 a) ICP 功率: 300 W, RF 功率: 50 W; b) ICP 功率: 300 W, RF 功率: 100 W; c) ICP 功率: 100 W, RF 功率: 100 W (Cl_2 : 20 sccm, Ar: 40 sccm, 压强: 6 mTorr)

Fig.4-5 SEM micrograph of cross section of Si etched by Cl_2/Ar plasma with photoresist mask at a) ICP power = 300 W, RF power = 50 W; b) ICP power = 300 W, RF power = 100 W; c) ICP power = 100 W, RF power = 100 W (Cl_2 flow rate = 20 sccm, Ar flow rate = 40 sccm, pressure = 6 mTorr)

离子入射角分布直接影响微槽和沟槽侧壁形貌。低挥发性氯化刻蚀产物的形成和离子辅助刻蚀会形成连续的坡状侧壁。离子角度分布(IAD)近似高斯形式,并且IAD函数的宽度由等离子体的功率和压强决定^[67]。离子能量越大,其IAD更加尖锐。因此,RF功率越高,会导致更加尖锐的IAD。入射角越大的离子经侧壁反射后,保留了自身更多的能量到达沟槽底部,从而形成更深的微槽(a)和(b)所示)。此外,b)的刻蚀速率快导致的侧壁面积比a)大,从而更加有助于离子反射后刻蚀^[66],也是导致b)微槽比a)更深的原因之一。c)侧壁表面是非常粗糙的。当ICP功率较低时(100 W),化学反应活性基团的浓度较低,材料表面氯化过程没有达到饱

和, 氯化产物会被瞬间移除, 结果导致Si会被高能粒子直接物理溅射刻蚀, 从而引起严重的侧壁表面损伤, 而各项同性的氯化过程不能够及时修复损伤。刻蚀过程中化学反应基团的欠缺会增强各向异性刻蚀, 使得侧壁更加陡峭。根据Joubert等人^[68]的工作, 当离子物理轰击相对于化学反应起主导作用时, 光刻胶损伤将会出现, 而这种损伤会被转移到硅片上, 形成条纹状形貌的侧壁。而对于沟槽底部和侧壁的刻蚀损伤, 研究发现经过热氧化后在 N_2 氛围中退火很长一段时间, 可以有效地消除^[69]。

图4-6为 SiO_2 掩膜下硅片样品在不同压强条件下刻蚀的形貌。图4-6a 为图4-6b的放大图。可以明显的看到, 图4-6a 中沟槽底部产生大量的杂草, 而图4-6c的底部则比较平整。同时, 图4-6c 的微槽比图4-6a 更深。在二氧化硅掩膜下, 其中的氧组分会和等离子产生化学反应, 当压强较高时, 反应生成物不能及时清除, 从而沉积到硅片表面, 而这些沉积物很难被刻蚀去除, 从而形成杂草^[70]。同样, 因为图a中这些杂草在侧壁底部附近的堆积, 限制了微槽的形成。为了得到平滑的刻蚀表面, 刻蚀环境中应尽可能减少氧的含量, 同时降低刻蚀环境的压强。

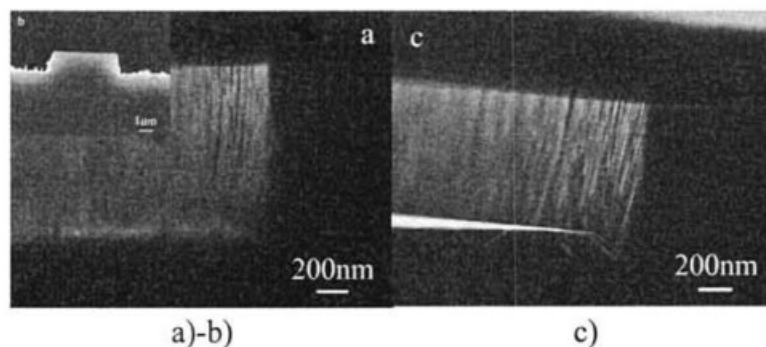


图 4-6 SiO_2 掩膜下 Cl_2/Ar 等离子体刻蚀 Si 形貌 SEM 图 a)-b) 压强: 12 mTorr; c) 压强: 6 mTorr; (Cl_2 : 20 sccm, Ar: 40 sccm, ICP 功率: 150 W, RF 功率: 100 W)

Fig.4-6 SEM micrograph of cross section of Si etched by Cl_2/Ar plasma with SiO_2 mask at a)-b) pressure = 12 mTorr; c) pressure = 6 mTorr; (Cl_2 flow rate = 20 sccm, Ar flow rate = 40 sccm, ICP power = 150 W, RF power = 100 W)

4.3 CMP 工艺研究

超大规模集成电路几何尺寸已经缩小深亚微米尺寸, 器件尺寸的缩小, 导致器件结构向立体化纵深发展。随着金属布线层数的增加, 刻蚀工艺要求每层表面十分平坦, 光刻的焦深缩小推动了全局平面化的发展。而化学机械抛光(CMP)是唯一能够实现全局平面化的方法, 其应用最广的是层间介质 SiO_2 抛光。实现 SiO_2 介质表面高平整对器件后续工艺起着至关重要的作用, 要获得效果最佳的平整表

面，就要有高质、高效、高选择性的抛光液及 CMP 技术^[71]。

4.3.1 CMP 机理分析

化学机械抛光中包括化学作用和机械作用两种机制。化学作用指抛光液可以与 SiO_2 发生化学反应并生成溶于水的物质，机械作用是指磨料在一定的压力下通过机械作用把 SiO_2 表面的生成物除去，并被流动的抛光浆料带走，使新鲜的被抛光表面重新裸露出来。化学作用与机械作用两者相互配合使反应继续下去，当两种作用达到一个精细的相对平衡时，才能得到低损伤高平整的抛光表面^[72]。CMP 的机械去除速率一般可用 Preston 方程来表示：

$$R_p = K_p P V \quad (4-8)$$

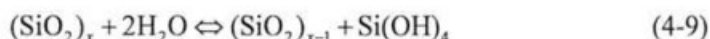
式中 R_p ——薄膜的去除速度；

K_p ——Preston 系数，它是与抛光液、抛光垫材料的性质相关的常数；

P ——抛光时所用的压力；

V ——抛光机台的旋转速度

SiO_2 的抛光机理：首先表面 SiO_2 通过化学反应形成易溶于水的表面水合层，然后通过抛光布与磨料的机械作用将水合层去除掉。抛光时表面间的相互作用受到抛光液中水的影响，如果水用有机溶液代替则去除速率就可以忽略。氧化层表面的硅-氧键的打开受到扩散入氧化层的水的控制。水充当摩擦表面的溶解源，并作为表面间氢键合德起源。反应式为：



通常二氧化硅介质 CMP 的磨料选用二氧化硅。

4.3.2 影响 CMP 的因素

影响 CMP 质量的因素众多^[71]，其中抛光液是化学反应的主要影响因素。

(1) 磨料的作用。抛光速率受抛光液化学性质的控制，磨料的尺寸会影响去除速率和表面损伤，磨料的硬度越大，表面损伤也越显著。

(2) pH 值的影响。pH 值影响被抛表面和磨料材料的去除分解和溶解度、被抛表面膜的生成。目前用 SiO_2 介质的抛光液多为碱性。

(3) 温度的影响。氧化物温度升高，抛光速率增加。高温下化学腐蚀严重，表面完美性差，且随着温度上升，抛光速率受到反应物去除速率限制，增长很慢。因此温度必须在合适的范围内，才能满足氧化层的平面化要求。

(4) 压力的影响。压力越大，抛光速率越大，但同时更易造成表面划伤。

(5) 抛光垫的影响。抛光垫对抛光速率起着重要作用，其孔隙将抛光液输送到不同部位，并将抛光产物移走。

4.3.3 CMP 实验研究

本实验中使用河北工业大学微电子研究所研发的 SiO_2 介质 CMP 碱性抛光液。目标是去除 Si 台阶顶端的 SiO_2 层，同时保留台阶侧壁以及沟槽底面上的 SiO_2 层，如图 4-7 所示。台阶图形为边长为 $10\ \mu\text{m}$ 的正方形，图形间距 $200\ \mu\text{m}$ ，台阶的高度为 $1\ \mu\text{m}$ ，由 ICP 刻蚀而成。 SiO_2 薄膜利用 PECVD 生长而成，厚度为 $500\ \text{nm}$ 。抛光机为 Logitech LP-50 精密研磨抛光机。

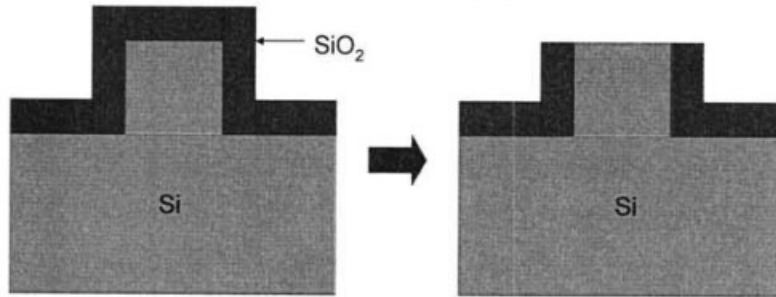


图 4-7 CMP 示意图

Fig.4-7 Schematic CMP

在实际的抛光过程中，除了台阶顶端的 SiO_2 会被去除外，台阶底部的 SiO_2 也会被部分去除。因此，我们在此定义去除速率为台阶顶端 SiO_2 去除速度减去台阶底部 SiO_2 去除速度。抛光液由水和抛光原液混合后配制而成。当水和抛光原液的体积比恒定为 20:1 时， SiO_2 的去除速率随着抛光机转速增加而增加，如图 4-8 所示，这是因为随着转速增加，抛光液通过抛光垫输运致材料表面的速度

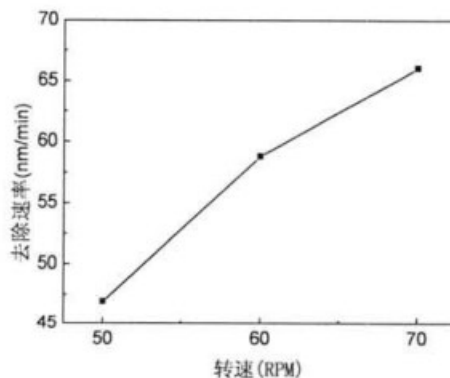


图 4-8 CMP SiO_2 去除速率与抛光机转速的关系

Fig.4-8 Removal rate of SiO_2 in CMP depending on polishing machine speed

增加,同时化学反应后的生成物由抛光布物理去除的速度也增加。但是继续增加转速,由于抛光液的浓度限制,化学反应作用增加变缓,因此去除速率的增幅减小。当转速恒定为 70 转/分钟时,转速随着水和抛光原液体积配比的增大而减小。这是因为随着水体积的比例增大,化学反应的作用逐渐减弱,从而导致去除速率的降低。要保证台阶顶端的 SiO_2 被去除干净,同时又要防止过抛,则需要根据抛光速率设定抛光条件,同时借助光学显微镜观察。台阶顶端 SiO_2 被去除干净后的显微镜照片如图 4-10 所示。

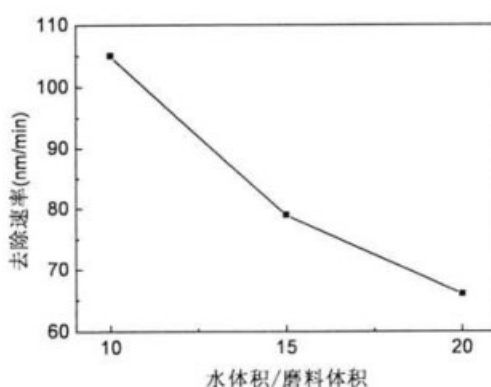


图 4-9 CMP SiO_2 去除速率与水与抛光液体积比的关系

Fig.4-9 Removal rate of SiO_2 in CMP depending on volume ratio of water and slurry

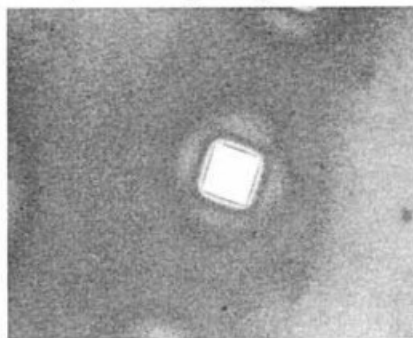


图 4-10 CMP 后台阶形貌 500 倍显微镜照片

Fig.4-10 Micrograph photo ($\times 500$) of mesa morphology after CMP

4.4 离子注入后退火工艺研究

本征半导体材料的导电性很差,只有通过掺入少量杂质,才能改变其电学特性,实现其应用的目的。掺杂有离子注入和扩散两种方法,为了得到尽可能精确控制的杂质浓度和掺杂深度,常采用离子注入的方法。离子注入所需的高能粒子,在掺杂过程中,会破坏硅的晶格结构,引入损伤,从而影响器件的电学性能。研

究发现,当经离子注入的材料经过高温退火($T > 800\text{ }^{\circ}\text{C}$)后,由于样品在高温下会发生重结晶,绝大部分因注入产生的缺陷被修复,晶体结构趋于完整^[73]。因此可以认为注入导致的缺陷被完全修复即杂质被充分激活,缺陷对注入掺杂层光学性质的影响也可忽略。我们对于 p(100) Si 衬底,电阻率为 $150\text{ }\Omega\cdot\text{cm}$,用离子注入方法注入 As,离子注入能量为 150 keV ,剂量为 $1\times 10^{15}\text{ cm}^{-2}$ 。采用透射谱表征退火对离子注入损伤的修复作用。

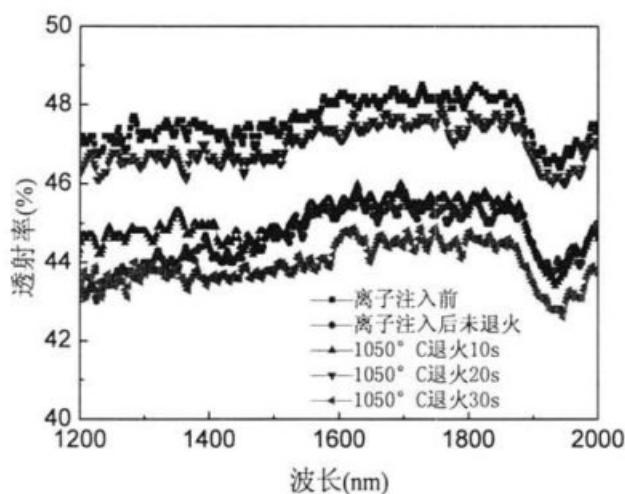


图 4-11 离子注入后硅材料透射谱

Fig.4-11 Transmission spectrum of ion implanted silicon

我们发现,离子注入后的硅片透射率在退火时间为 20 s 时最大,最接近未离子注入时的透射率。随着退火时间的增加,透射率反而下降,这是由于退火时间加长导致高密度缺陷扩散造成的。在快速热退火对于离子注入 pn 结漏电流的影响实验中,同样观察到存在最优退火时间,退火时间过长会导致高密度缺陷扩散而引起 pn 结漏电流增大^[74]。

4.5 金属-半导体接触特性的表征

用比接触电阻 ρ_c ,即单位面积金-半接触的微分电阻($\Omega\cdot\text{cm}^2$)来表征欧姆接触的好坏。 ρ_c 的定义式为:

$$\rho_c \equiv \left(\frac{\partial J}{\partial V} \right)_{V=0}^{-1} \quad (4-10)$$

对于 ρ_c 的测量,根据图 4-12 所示测量图,由式(4-11)-(4-14)计算得到。

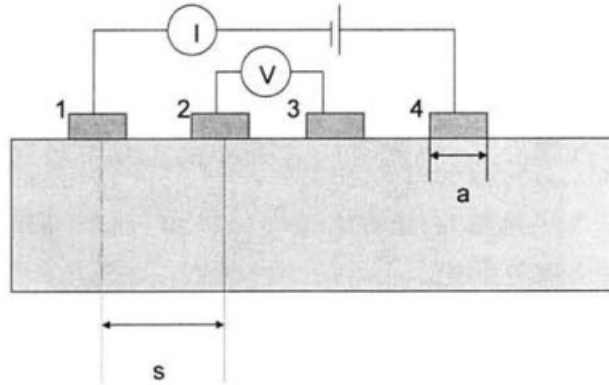


图 4-12 比接触电阻测量示意图

Fig.4-12 Schematic of ratio contact resistance measurement

$$\rho_c = A \left\{ \frac{V_{12}}{I_{14}} - R_s - \frac{V_{23}}{I_{14}} \cdot \frac{\ln[(3s/a) - (1/2)]}{2/n^2} \right\} \quad (4-11)$$

$$R_s = \frac{4\rho_c}{\pi a^2} \left\{ \frac{\sum_{m=0}^{\infty} Y^m / [2^{2m} (m!)^2]}{\sum_{m=0}^{\infty} Y^m / [(m+1)2^{2m} (m!)^2]} - 1 \right\} \quad (4-12)$$

$$Y = \rho a^2 / (4\rho_c t) \quad (4-13)$$

$$A = \pi a^2 / 4 \quad (4-14)$$

对于我们工艺中制备的 Al-Si 欧姆接触，测量计算得比接触电阻为 $1.6 \times 10^{-6} \Omega \cdot \text{cm}^2$ 。与文献中结果比较可知，欧姆接触良好。

4.6 小结

本节中主要研究了 ICP 刻蚀工艺的刻蚀机制，同时还研究了 CMP 工艺、退火工艺等。在 ICP 工艺中研究了 Cl_2/Ar 组分、ICP 功率和 RF 功率对于 Si 刻蚀速率和选择比的影响。同时分析研究了 ICP 功率和 RF 功率对于沟槽侧壁形貌的影响。研究发现，硅刻蚀速率随 Cl_2/Ar 组分变化主要归因于刻蚀过程中物理刻蚀机制和化学刻蚀机制的相互竞争，对于光刻胶的刻蚀则由物理刻蚀机制决定。硅刻蚀速率随着 ICP 功率的变化，相对稳定不变，但选择比则随 ICP 功率的增加而上升。硅和光刻胶的刻蚀速率强烈依赖于 RF 功率。随着 RF 功率的增大，微槽效应更加明显，同时增强了各项异性刻蚀。增加 ICP 功率可以减小刻蚀表面损伤，使得侧壁形貌更加平滑。降低压强有利于刻蚀生成物的清除，减少杂草的形成。在 CMP 中研究了抛光速率与抛光条件的关系。离子注入造成的晶格损伤可以通过退火修复。

第5章 蚁群算法在增透膜设计中的应用

5.1 引言

光学薄膜的特性计算是一个相对简单的问题,而光学薄膜的膜系设计要复杂得多。膜系设计的目的是根据各种光学系统所特有的光谱特性(如反射率 R)要求,在给定波段范围和基片材料的情况下,确定各膜层介质的折射率及厚度。多层增透膜的优化设计一直是薄膜光学研究的重要课题。对于多层光学薄膜系统,其评价函数是复杂的非线性函数,在数值计算中必然会遇到局部极值和全局极值问题。设计膜系的方法分为解析法、图解法(矢量合成法)^[75]和数值法。解析法、图解法对层数、膜料和膜厚选择是试探性的。数值法是基于评价函数的一种自动设计方法,已得到广泛应用。对于多层膜系的设计优化问题,目前广泛采用的数值算法为遗传算法^[76]和模拟退火算法^[77],并且已经得到了许多令人满意的结果。傅里叶变换法也被用来设计宽带增透膜^[78],对于 $7.7\sim 12.3\ \mu\text{m}$ 范围设计了渐变折射率增透膜和多层增透膜,设计得到了性能非常良好的增透膜系。利用表面亚波长尺寸的微结构,也被应用于降低宽带的反射率^[79],结果表明,对于 $400\sim 800\ \text{nm}$ 范围,平均反射率可以降到1%以下。U.Schulz^[80]进一步将表面微结构和多层增透膜结合,将PMMA颗粒旋涂于增透膜最外层,并利用等离子体刻蚀,得到亚波长尺寸的微结构,进一步有效地降低了反射率,对于 $400\sim 1200\ \text{nm}$ 范围得到了平均反射率仅为0.35%的结合增透膜。而蚁群算法作为一种非常有效的全局优化算法,目前还没有发现关于蚁群算法用来设计宽带增透膜的相关报道。本章就针对蚁群算法在宽带增透膜设计问题中的应用做深入探讨。

5.2 蚁群算法介绍

蚂蚁的个体结构和行为很简单,但是大量蚂蚁构成的整个蚁群却表现出高度结构化的社会组织,能够完成远远超出蚂蚁个体能力的任务^[81]。蚂蚁有着独特的信息系统,通过信息素来传递信息。觅食行为时蚁群一个重要有趣的行为。生物世界中的蚂蚁有能力在没有任何可见提示下找出从蚁穴到食物源的最短路径,并且能够随环境的变化而变化地搜索到新的路径,产生新的选择。在从蚁穴到食物源并返回的过程中,蚂蚁能够在其走过的路径上分泌一种化学物质,被称为信息素,通过这种方式形成信息素轨迹。蚂蚁在行动过程中能够感知信息素的存在和强度,并以此指导自己的行动方向,使其倾向于朝着信息素强度高的方向移动。

信息素轨迹可以使蚂蚁找到它们返回食物源(蚁穴)的路径,其他蚂蚁也可以利用该轨迹找到由同伴发现的食物源位置。蚁群的觅食行为完全是一种自组织行为,蚂蚁根据自我组织来选择去食物源的路径。

5.2.1 蚂蚁觅食策略-双支桥实验

为了研究在受约束条件下的蚂蚁觅食行为,Goss 等人^[82]提出了不等长双支桥实验,如图 5-1 所示。其中图 5-1 a) 表示不对称的双支桥,蚂蚁从蚁穴到食物源只有左右桥两条路径,左桥的长度大于右桥。图 5-1 b) 和图 5-1 c) 分别为桥放置 4 min 和 8 min 后蚁群对短分支的选择图。在觅食过程中,蚂蚁会选择最短的路径:先回蚁穴的蚂蚁在最短的分支上走了两次(从蚁穴到食物源,再回到蚁穴)。这些蚂蚁回来用时短,所以在短分支上有更多的信息素,诱使其他蚂蚁选择短分支。实验表明,蚂蚁最终选择短分支的几率随着两个分支长度比例的增大而增长。

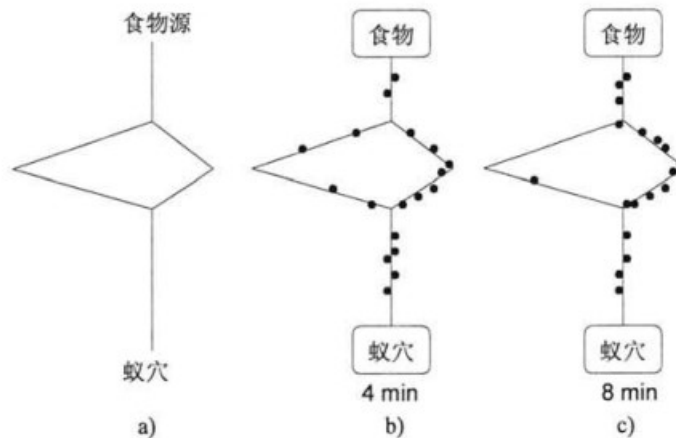


图 5-1 蚂蚁通过不等长双支桥实验

Fig.5-1 The experiment of ants through the unequal length double bridge

实验中蚂蚁行为的实质是简单个体的自组织行为体现出来的群体行为。每只蚂蚁的行为都对环境产生影响,环境的改变进而对蚁群行为产生控制作用,影响其他蚂蚁的行为。通过这种机制,简单的蚂蚁可以相互影响,相互协作,完成一些复杂的任务。在实验中蚂蚁之所以能够进行简单的间接通讯,是因为其是通过信息素的释放来传递的。蚂蚁的这种间接通讯具有独特的显著特征:(1)蚂蚁释放的信息素的物理特性与所经过的物理环境状态的改变保持一致;(2)所释放的信息具有局部特性,只有经过存有此信息的状态的蚂蚁才能获得此信息。蚂蚁觅食过程所进行的是一种分布式的最优化机制。单个蚂蚁在寻找食物源的时候贡献很小,但是整个蚁群的行为却表现出了具有找出最短路径的能力。大量蚂蚁组成

的蚁群的集体行为表现出信息的正反馈现象：某一路径上走过的蚂蚁越多，该路径对后来的蚂蚁就越有吸引力。

5.2.2 人工蚁群算法的基本思想

受到自然界蚁群集体行为的启发，M. Dorigo 提出了基于蚂蚁种群的新型优化算法——蚁群算法，并将其应用于解决 TSP(Traveling Salesman Problem)^[83,84] 问题。蚁群算法在组合优化问题中取得了一系列较好的实验结果，该算法逐渐引起了许多研究者的注意，并将其应用于实际工程问题中。为了建立蚁群算法，提出了人工蚂蚁的概念，它是对真实蚂蚁的一种抽象，并且具备一些真实蚂蚁不具备的特性。

人工蚂蚁的绝大部分行为特征都是来源于真实蚂蚁，它们具有的共同特征主要表现为如下^[81]：

(1) 人工蚂蚁和真实蚂蚁一样，是一群相互合作的个体

这些个体通过相互协作在全局范围内寻找问题较优的解决方案，每只人工蚁都能够建立一个解决方案，但高质量的解决方案是整个蚁群合作的结果。

(2) 人工蚂蚁和真实蚂蚁有着共同的任务

共同任务就是寻找起点(蚁穴)到终点(食物源)的最短路径。两种蚂蚁均不能跳跃，它们只能沿着相邻区域的状态行进。

(3) 人工蚂蚁和真实蚂蚁都是通过使用信息素进行间接通讯

人工蚂蚁能够在全局范围释放信息素，这些信息素被局部地存于它们所经过的问题状态中。蚁群算法中的信息素轨迹通过信息素矩阵来表示。矩阵中的元素 τ_{ij} 表示在节点 i 选择节点 j 作为移动方向的期望值。初始状态矩阵中的各个元素设初值，也可以为零。随着蚂蚁在所经过的路径上释放信息素的增多，矩阵中的相应项也随之改变。人工蚁群算法就是通过修改矩阵中的元素的代数值，来模拟自然界中的信息素轨迹更新的过程。人工蚁之间的通讯有两个主要特征：1)模仿真实蚂蚁信息素释放；2)状态变量只能被人工蚁局部到达。

(4) 人工蚂蚁利用了真实蚂蚁觅食行为中的自催化机制——正反馈

当某条路径上的蚂蚁增加，其留下来的信息素轨迹也相应增多，从而信息素强度增大。由于蚂蚁倾向于选择信息素强度大的路径，后来的蚂蚁选择该路径的概率也越大，从而进一步增加了该路径的信息素强度，这个过程叫做自催化过程。该过程的自增强作用使得问题的解向着全局最优的方向不断进化发展，最终获得相对较优的解。使用正反馈时要注意避免早熟收敛。

(5) 信息素的挥发机制

蚁群算法中存在着类似真实信息素挥发的挥发机制,这种机制可以帮助蚂蚁逐渐忘记过去,不受过去经验的过分约束,有利于指导蚂蚁搜寻新的最优解,避免早熟收敛。

(6) 不预测未来状态概率的状态转移策略

人工蚂蚁应用概率的决策机制沿着近邻状态移动,充分利用了局部信息,并没有利用前瞻性来预测未来的状态。

1. 人工蚁群算法的实现过程

在蚁群算法中,一个有限规模的蚁群群体,可以相互协作地搜索用于解决优化问题的较优解。每只蚂蚁根据问题所给出的约束条件,从被选的初始状态出发建立一个可行的解或者解的一部分。在建立解决方案的过程中,每只蚂蚁搜集关于问题特征和自身行为的信息。蚂蚁利用这些信息不断修正问题的表现形式。每只蚂蚁都能够找出一个解,但未必是最优的,找出高质量的解是群体中所有个体之间全局相互协作地结果。

在蚁群算法中,以下四个部分对蚂蚁的搜索行为起到了决定作用:

(1) 局部搜索策略。每只蚂蚁经过有限步的移动,应用随机的局部搜索策略选择移动方向,建立问题的一个解。

(2) 蚂蚁的内部状态。蚂蚁的内部状态存储了关于蚂蚁过去的信息。内部状态携带了用于计算生成方案贡献的信息。

(3) 信息素轨迹。局部的、公共的信息包含了一些具体问题的启发信息和从初始阶段积累起来的知识,这些知识通过编码以信息素轨迹的形式来表达。

(4) 蚂蚁决策表。蚂蚁决策表是由信息素函数和启发信息函数共同决定,指导蚂蚁向着搜索空间中最有吸引力的区域移动。

一旦一只蚂蚁完成了使命,包括建立一个解决方案和释放信息素,这只蚂蚁将被系统删除。

2. 蚁群算法的应用

优化技术是一种以数学为基础,用于求解各种工程问题优化解得应用技术。目前除了广泛应用的遗传算法、模拟退火算法、人工神经网络等算法外,蚁群算法逐渐得到了发展应用,为解决复杂困难的系统优化问题提供了新的具有竞争力的求解方法。蚁群优化算法最初用于解决旅行商问题(TSP)^[84],并且取得了巨大的成效。随后陆续应用于解决图着色问题^[85]、公交网络设计问题^[86]等。蚁群算法在动态组合优化问题研究的应用主要集中在通讯网络方面^[87]。蚁群算法作为一种全局搜索算法,它能够有效地避免局部极优。为了使算法更加有效的找到问题的最优解,在其解决具体问题时,需要根据情况加入适当的局部搜索算法,寻求二者的完美结合。

5.3 增透膜反射率计算理论

对于任意的光学多层膜系特性的精确计算，常采用特征矩阵方法来实现，下面是特征矩阵法的基本原理^[75]。

5.3.1 单层介质薄膜的反射率

对于单层介质膜，在单一界面上应用边界条件可得：

$$\eta_1(k \times E_1) = \eta_0(k \times E_0^+ - k \times E_0^-) = H_0 \quad (5-1)$$

$$E_1 = E_0^+ + E_0^- = E_0 \quad (5-2)$$

式中 η_0 ——入射光所在介质的光学导纳；

η_1 ——透射光所在介质的光学导纳；

H ——磁场强度矢量；

E ——电场强度矢量；

k ——光的传播方向

由式(5-1)和(5-2)可得：

$$\eta_1 = \eta_0 |E_0^+ - E_0^-| / |E_0^+ + E_0^-| \quad (5-3)$$

则振幅反射系数为

$$r = (\eta_0 - \eta_1) / (\eta_0 + \eta_1) \quad (5-4)$$

这是光垂直入射界面情形的推广，因此只要将导纳 N 用修正导纳 η 代替，垂直入射的结果也适用于倾斜入射的情形。需要注意的是，计算 P-分量的反射率是用

$$\eta_p = N / \cos \theta \quad (5-5)$$

而在计算 S-分量时用

$$\eta_s = N \cdot \cos \theta \quad (5-6)$$

代入然后由 $(R_p + R_s)/2$ 得到自然光合成的反射率。

如图 5-2 所示，单层薄膜的两个界面在数学上可以用一个等效的界面来表示。膜层和基片组合的导纳为 Y ，则由式(5-1)和(5-2)可知

$$Y(k \times E_0) = H_0 \quad (5-7)$$

式中

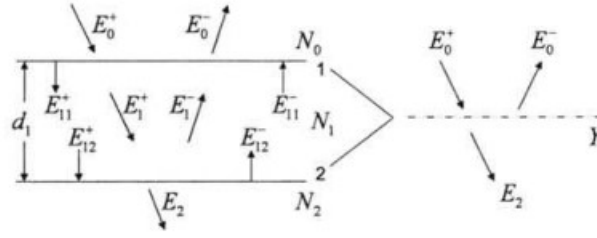


图 5-2 单层薄膜的等效界面

Fig.5-2 Equivalent interface of single-layer film

$$H_0 = H_0^+ + H_0^- \quad (5-8)$$

$$E_0 = E_0^+ + E_0^- \quad (5-9)$$

单层膜的振幅反射系数为：

$$r = (\eta_0 - Y) / (\eta_0 + Y) \quad (5-10)$$

因此只要确定了组合导纳 Y ，就可以计算单层膜的反射率。接下来推导组合导纳 Y 的表达式。

在界面处应用边界条件得：

$$(k \times E_0) \begin{bmatrix} 1 \\ Y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \delta_1 & \frac{i}{\eta_1} \sin \delta_1 \\ i\eta_1 \sin \delta_1 & \cos \delta_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ \eta_2 \end{bmatrix} (k \times E_2) \quad (5-11)$$

令

$$\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \delta_1 & \frac{i}{\eta_1} \sin \delta_1 \\ i\eta_1 \sin \delta_1 & \cos \delta_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ \eta_2 \end{bmatrix} \quad (5-12)$$

矩阵

$$\begin{bmatrix} \cos \delta_1 & \frac{i}{\eta_1} \sin \delta_1 \\ i\eta_1 \sin \delta_1 & \cos \delta_1 \end{bmatrix} \quad (5-13)$$

称为薄膜的特征矩阵。它包含了薄膜的全部有用的参数，矩阵 $\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix}$ 定义为基片和

薄膜组合的特征矩阵。其中

$$\delta_1 = \frac{2\pi}{\lambda} N_1 d_1 \cos \theta_1 \quad (5-14)$$

对于 P-分量

$$\eta_1 = N_1 / \cos \theta_1 \quad (5-15)$$

而对于 S-分量

$$\eta_1 = N_1 \cos \theta_1 \quad (5-16)$$

由 $Y = C / B$ 得

$$Y = \frac{\eta_2 \cos \delta_1 + i \eta_1 \sin \delta_1}{\cos \delta_1 + i (\eta_2 / \eta_1) \sin \delta_1} \quad (5-17)$$

故反射率为:

$$R = r \cdot r^* = \left(\frac{\eta_0 - Y}{\eta_0 + Y} \right) \cdot \left(\frac{\eta_0 - Y}{\eta_0 + Y} \right)^* = \frac{(\eta_0 - \eta_2)^2 \cos^2 \delta_1 + (\eta_0 \eta_2 / \eta_1 - \eta_1)^2 \sin^2 \delta_1}{(\eta_0 + \eta_2)^2 \cos^2 \delta_1 + (\eta_0 \eta_2 / \eta_1 + \eta_1)^2 \sin^2 \delta_1} \quad (5-18)$$

5.3.2 多层介质薄膜的反射率

利用矩阵法可以把对单层膜组合导纳的推导推广到任意膜层的场合。如图 5-3 所示, 在界面 j 和 $j+1$ 应用边界条件得到:

$$\begin{bmatrix} k \times E_{j-1,j} \\ H_{j-1,j} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \delta_j & \frac{i}{\eta_j} \sin \delta_j \\ i \eta_j \sin \delta_j & \cos \delta_j \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} k \times E_{j+1} \\ H_{j+1} \end{bmatrix} \quad (5-19)$$

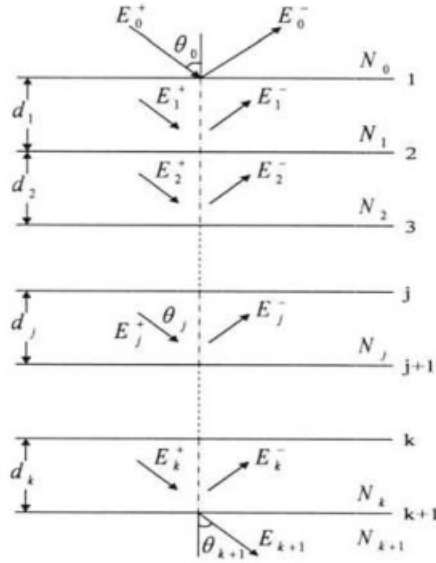


图 5-3 求解多层介质膜的矩阵法示意图

Fig.5-3 The schematic diagram of the multilayer dielectric matrix method

因为 $\begin{bmatrix} k \times E_{12} \\ H_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k \times E_{22} \\ H_{22} \end{bmatrix}$, $\begin{bmatrix} k \times E_{23} \\ H_{23} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k \times E_{33} \\ H_{33} \end{bmatrix}$, ..., $\begin{bmatrix} k \times E_{k-1,k} \\ H_{k-1,k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k \times E_{k,k} \\ H_{k,k} \end{bmatrix}$, 所以

经过连续的线性变换, 最后可得矩阵方程式:

$$\begin{bmatrix} k \times E_0 \\ H_0 \end{bmatrix} = \left\{ \prod_{j=1}^k \begin{bmatrix} \cos \delta_j & \frac{i}{\eta_j} \sin \delta_j \\ i\eta_j \sin \delta_j & \cos \delta_j \end{bmatrix} \right\} \times \begin{bmatrix} k \times E_{k+1} \\ H_{k+1} \end{bmatrix} \quad (5-20)$$

因此，多层膜系的特征矩阵为：

$$\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix} = \prod_{j=1}^k \begin{bmatrix} \cos \delta_j & \frac{i}{\eta_j} \sin \delta_j \\ i\eta_j \sin \delta_j & \cos \delta_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ \eta_{k+1} \end{bmatrix} \quad (5-21)$$

膜层的位相厚为

$$\delta_j = \frac{2\pi}{\lambda} N_j d_j \cos \theta_j \quad (5-22)$$

折射角 θ_j 由折射定律确定。对于 P-分量

$$\eta_j = N_j / \cos \theta_j \quad (5-23)$$

而对于 S-分量

$$\eta_j = N_j \cos \theta_j \quad (5-24)$$

多层膜和基片的组合导纳为 $Y = C / B$ ，因此可以得到多层膜系的反射率为：

$$R = \left(\frac{\eta_0 B - C}{\eta_0 B + C} \right) \left(\frac{\eta_0 B - C}{\eta_0 B + C} \right)^* \quad (5-25)$$

5.4 垂直入射宽带增透膜蚁群算法优化设计

增透膜已经非常广泛的被用于光学系统中，去降低系统的反射率。对于太阳能电池和探测器，增透膜对于降低表面反射率进而提高效率至关重要。传统常用的四分之一波长增透膜只能对某一特定的波长起到降低反射率的作用，但是对于其他波长的减反作用就会明显降低。随着探测器应用波段范围的不断扩大，为了对于某一宽带内的波长都有高的探测效率，设计宽带增透膜是十分必要的。已经有大量的研究来实现这一目标，其中包括利用表面微结构^[88-90]、多层多孔硅增透膜^[91]，以及湿法工艺处理的单层硅球结构^[92]。

对于多层增透膜的优化设计非常困难，这是由于在优化数值求解过程中存在很多极值点，往往导致局部最优解的出现，而非我们想要的全局最优解。为了解决这个问题，遗传算法^[76,93]和模拟退火算法^[77]被用来优化增透膜结构。据我们所知，以蚁群算法为基础的优化技术，到目前为止还没有被应用到光学薄膜设计领域。在本节的研究中，我们尝试建立可以使用蚁群优化算法的增透膜数学模型，为简化起见，薄膜材料选用硅工艺成熟且广泛使用的 SiO_2 和 SiN 薄膜。我们针对

波长400~1000 nm范围内垂直入射光,通过采用蚁群算法,对硅表面增透膜系结构进行优化设计,以减小增透膜的平均反射率为目标。

5.4.1 增透膜设计的蚁群优化算法

图5-4是本研究中所要用到的多层增透膜探测器结构模型。通过高折射率材料和低折射率材料薄膜的交替生长,可以得到等效折射率介于这两种折射率之间的等效薄膜,而等效折射率的大小则由生长两种材料的比例决定。硅衬底上的第一层薄膜为SiN,这是由于SiN的高折射率。而与空气接触的最后一层薄膜的折射率与空气的折射率越接近,越能有效地降低反射率,所以选择SiO₂作为最后一层。在优化计算中所采用的SiO₂和SiN折射率色散曲线,是利用椭偏仪测量单晶硅上相应薄膜得到的。

本节内容针对光垂直入射情况下,波长400~1000 nm范围内的光波平均反射率,对多层膜系的结构进行设计优化。我们假设每层膜的材料均已给定(即折射率确定,分别为 n_{SiO_2} 和 n_{SiN}),需要设计优化的参数仅仅为每层膜的厚度 t_i , $i = \{1, 2, \dots, n\}$ 。光波从空气中(折射率为 n_0)垂直入射到膜层表面,为简化计算,我们假设入射进入的光波均被硅衬底(折射率为 n_{Si})吸收。

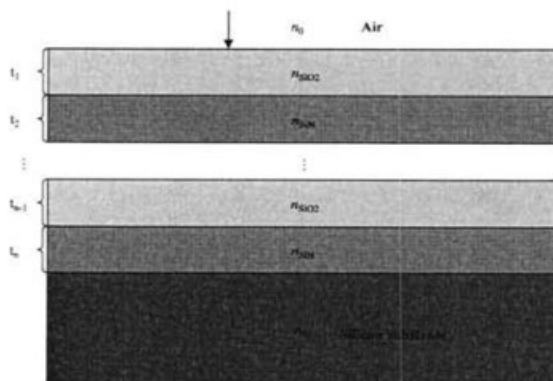


图5-4 硅探测器反射率计算二维结构示意图

Fig.5-4 Two-dimensional structure for the reflectance calculation of a silicon detector

本节中用来优化设计膜系结构的迭代优化算法为蚁群算法(ACA)。由ACA找到的全局最优解对于膜系结构的初始值是不敏感的,而传统的某些算法的计算结果则严重依赖于初始值的选取。接下来我们介绍应用ACA对增透膜系进行优化设计的具体步骤。

我们提出了一种多路径层旅行商模型。而对于增透膜系的设计优化则是基于该模型。在多路径层旅行商模型中,第 n 个路径层代表了增透膜系的第 n 层。而膜层厚度的选择则由相应路径层中 m 条路径来表示,所有可供选择的路径构成了路

径矩阵。用相邻两个路径层间的城市代表膜系结构中相邻膜层间的界面。如图5-5所示，每一列包含 m 条路径被称为一个路径层，路径矩阵和城市一起构成了多路径层系统。图5-5中所示的为一个 n 路径层系统。

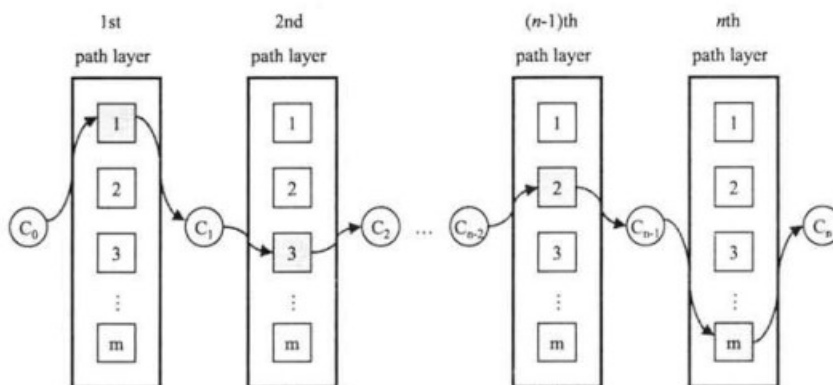


图5-5 多路径层系统示意图

Fig.5-5 Illustrate of the multi path layer system

在该模型中，旅行者必须从第一个城市 C_0 开始他的旅行，然后在第一个路径层中选择一条路径通过并到达第二个城市 C_1 ，然后依次经过每一个路径层和城市，直到最后一个城市。在此过程中，每个路径层和城市均只经过一次。当旅行者到达最后一个城市时，旅行宣告结束。在多路径层系统中，每一个完整的旅行都可以产生一个相应问题的解。例如图5-5中所示红色线条所代表的旅程，可以表示为 $\{1\ 3\ \dots\ 2\ m\}$ ，而它可以代表厚度分别为 $[1\delta\ 3\delta\ \dots\ 2\delta\ m\delta]$ 的增透膜系结构，其中 $\delta = \Gamma / m$ ， Γ 代表了可以选择的膜层最大厚度，这个值由波段中最长波长和可选材料中较低的折射率值决定。

为了得到增透膜系设计问题中的最优解，我们需用多路径层旅行商系统对增透膜系设计问题进行建模。在增透膜系优化设计中，每一层膜的厚度有 m 个选择： $\{1\ 2\ \dots\ m-1\ m\}$ ，每一个选择均可用一条路径来表示。相邻膜层的界面表示为 C_j ， $j = \{0, 1, \dots, n\}$ ，用城市来代表。一次完整的旅程包括了固定不变的 $n+1$ 个城市和选择出来的 n 条路径，这可以代表一种增透膜系的结构。

一次旅行的总路程，也就是目标评价函数，由平均反射率来定义。在此情况下，寻找最小反射率的增透膜优化设计问题就转化为在多路径旅行商问题中寻找最短路径。评价函数也就是平均反射率为 R_{ave} 。

$$R_{ave} = \frac{1}{\lambda_2 - \lambda_1} \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} R(\lambda) d\lambda \quad (5-26)$$

对于400~1000 nm波段范围内，每个波长的权重均相等，其中 R 代表与波长有关

的反射率。反射率的计算利用本章5.3节中提到的特征矩阵法。

接下来我们使用蚁群算法求解旅行商问题的解决思路,来设计优化增透膜系的结构。假设共有总共有 K 只蚂蚁,所有的蚂蚁都被放置在起始点 C_0 处,并且按照规则依次选择路径并经过每个城市,直到到达终点 C_n 。蚂蚁经过路径轨迹的信息强度表示了蚂蚁遗留信息素的浓度。我们用 $\tau(i, j)$ 来表示城市 $i-1$ 和城市 i 间第 j 条路径上的信息素浓度,其中 $i = \{1, 2, \dots, n\}$, $j = \{1, 2, \dots, m\}$ 。首先初始化所有轨迹上的信息素矩阵,每个元素设为 τ_0 。对于某一在城市 $i-1$ 的蚂蚁,它选择路径 j 到达城市 i 的概率通过下式得到:

$$P(i, j) = \frac{\tau(i, j)}{\sum_j \tau(i, j)} \quad (5-27)$$

信息素的更新要经历两个步骤:局域更新和全局更新。当所有蚂蚁都完成自己的旅行后,信息素首先要按照如下规则进行局域更新。

$$\tau(i, j) = (1 - \alpha) \cdot \tau(i, j) + \Delta\tau(i, j) \quad (5-28)$$

其中 α 为(0,1)之间的经验参数,并且

$$\Delta\tau(i, j) = \sum_{k=1}^K \Delta\tau^k(i, j) \quad (5-29)$$

对于第 k 只蚂蚁

$$\Delta\tau^k(i, j) = \begin{cases} Q / R_{ave} & \text{如果 } (i, j) \in \text{经过路径} \\ 0 & \text{否则} \end{cases} \quad (5-30)$$

Q 为经验参数, R_{ave} 为根据第 k 只蚂蚁走过路径计算得出的平均反射率。

局域更新规则使得每只蚂蚁经过的路径上的信息素浓度都得以增强,而其他路径上信息素浓度随着时间而逐渐扩散消失。信息素更新的浓度 $\Delta\tau$ 与蚂蚁经过该路径的路程成反比。局域更新可以避免后续蚂蚁过多的选择同一路径而出现过早的局域收敛。

然后在对信息素浓度进行全局更新。全局更新的核心思想是全局最优解的路径上有更多的信息素,从而使所有的蚂蚁尽可能快速的向全局最优解的方向收敛。全局更新规则如下:

$$\tau(i, j) = (1 - \rho) \cdot \tau(i, j) + \rho \cdot \Delta\tau^e(i, j) \quad (5-31)$$

其中, ρ 为(0,1)之间的经验参数, e 为精英蚂蚁的数量, 也由经验决定。并且

$$\Delta\tau^e(i, j) = \begin{cases} Q/R_{ave}^+ & \text{如果 } (i, j) \in \text{最短旅程} \\ 0 & \text{否则} \end{cases} \quad (5-32)$$

其中 R_{ave}^+ 表示已经找到的全局最优解。信息素 $\Delta\tau^e$ 为了增强全局最优路径上的信息素浓度。利用 ACA 对增透膜进行优化设计的具体步骤如图 5-6 所示:

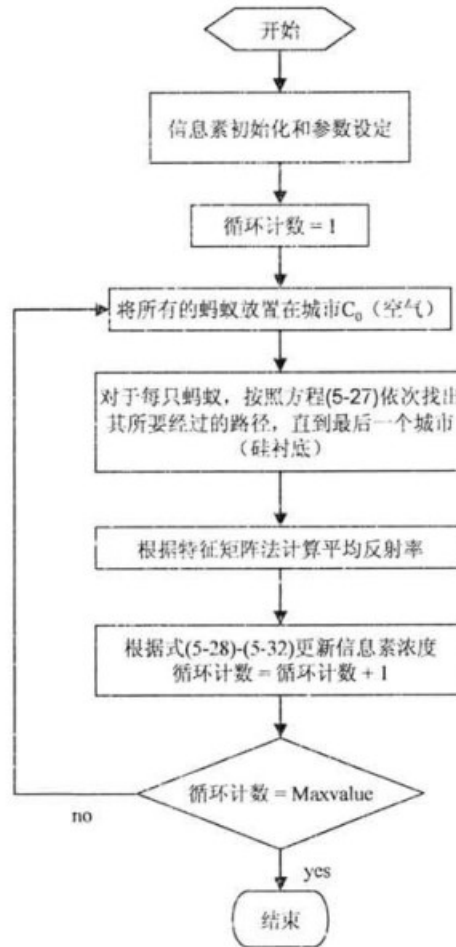


图 5-6 ACA 优化设计增透膜流程图

Fig.5-6 Flow chart for ACA-based AR coating optimization method

1. 设定参数和初始化信息素浓度;
2. 将所有的蚂蚁放置于城市 C_0 ;
3. 每一只蚂蚁按照方程(5-27), 从所有的可选路径中概率选择一条到达下一城市, 直到到达终点;
4. 利用特征矩阵法计算每一只蚂蚁所经过的路径长度, 也就是 R_{ave} ;
5. 根据式(5-28)-(5-32)进行信息素浓度的局域更新和全局更新;
6. 如果迭代次数达到预先设定的最大值, 则终止计算; 否则重复过程2-5。

在ACA对增透膜系进行设计优化过程中的参数选取如表5-1所示。ACA程序代码使用Matlab编写。

表5-1 ACA优化设计中参数选取

Table 5-1 Parameters chosen in the optimization using ACA-based method

参数	K	ρ	α	τ_0	e	m	Q	Maxvalue	n
取值	1000	0.2	0.3	1	1	500	0.01	30	1, 2, 4, 6

5.4.2 增透膜蚁群算法优化设计结果

利用蚁群算法对硅探测器增透膜进行了最多达到6层膜的结构优化设计，结果汇总在表5-2中。本文中所用到的硅衬底的折射率均使用椭偏仪对n型Si(100) (电阻率 $0.001\sim 0.009\ \Omega\cdot\text{cm}$)的测量结果($\lambda = 550\ \text{nm}$, $n = 4.08$)。可以看到对于2层、4层、6层增透膜，蚁群算法优化设计出了不同厚度的由 SiO_2 和 SiN 交替生长的膜层结构。平均反射率 R_{ave} 随着膜层层数的增加而降低。当膜层从4层增加到6层时，平均反射率降低的很小，继续增加膜层层数将很难再进一步改善平均反射率。

表5-2 ACA设计出的硅探测器增透膜层厚度 t (nm) (其中L = SiO_2 H = SiN)Table 5-2 Thickness t (in nm) of individual layers in ACA-optimized silicon detector antireflection coatings (L = SiO_2 H = SiN)

	1-layer	1-layer	2-layer	4-layer	6-layer
t_1	103.2 (L)	71.2 (H)	100.0 (L)	99.2 (L)	98.0 (L)
t_2	—	—	68.0 (H)	141.6 (H)	143.5 (H)
t_3	—	—	—	194.4 (L)	58.6 (L)
t_4	—	—	—	68.0 (H)	7.9 (H)
t_5	—	—	—	—	117.2 (L)
t_6	—	—	—	—	66.5 (H)
$R_{\text{ave}} (\%)$					
400~1000 nm	13.69	7.68	5.42	4.12	4.04

为了进行对比，我们也计算了单层 SiO_2 和单层 SiN 的反射谱，根据四分之一波长规则，设计波长为 $700\ \text{nm}$ ，如图5-7 a)所示。对于单层 SiN 增透膜，对于波长范围为 $400\sim 1000\ \text{nm}$ ，计算得到的平均反射率为9.04%，而对于单层 SiO_2 增透膜，平均反射率则高达14.4%。图5-7 b)中为蚁群算法设计优化的2层、4层和6层复合增透膜反射率图谱。对于6层增透膜系，在 $400\sim 1000\ \text{nm}$ 波长范围内，对于所有波长，反射率均小于9%，而平均反射率仅为4.04%，分别比单层 SiO_2 和单层 SiN 增透膜低了9.65%和3.64%。此结果表明使用蚁群算法对于宽带范围内增透膜设

计优化是非常有效的。

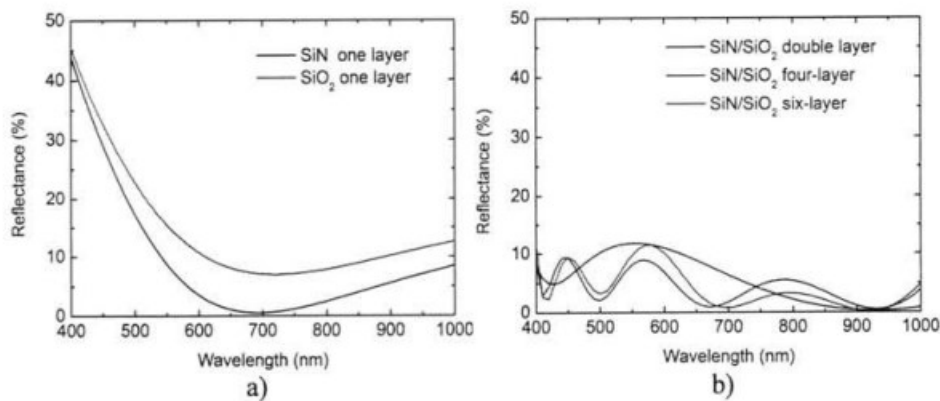


图5-7 硅衬底增透膜反射率计算图谱 a) 单层膜 b) 2层、4层、6层膜

Fig.5-7 Calculated reflectance spectra of silicon substrate with a) single-layer and b) double-, four- and six-layer antireflection coating depending on wavelength

5.5 全角度宽带增透膜蚁群算法优化设计

从上节的结果可以看出, 蚁群算法应用于增透膜系优化设计中还是非常有效的。但是优化结果跟遗传算法等其他算法相比较, 还不令人满意。上节中对于增透膜设计优化模型的建立, 只是将蚁群算法引入膜系设计问题的初次尝试, 接下来我们将通过改进模型, 进行更加全面的计算分析。本节中我们讨论在全角度入射条件下, 增透膜的设计优化问题。

首先需要建立可以应用蚁群算法的增透膜系结构的数学模型, 上节中我们采用的是多路径层旅行商模型。在计算中发现, 蚂蚁在做每次概率选择时, 可供选择的途径过多(为 m 条, 为了保证在给定范围内膜厚选择的精度, 上节中 $m = 500$), 如果某一条途径的信息素得到增强或者减弱, 这样的改变对于该途径最终的选择概率影响并不明显, 并且很容易导致某些途径很难被选择到。为此, 本节中我们将对增透膜系优化设计的数学模型进行改进, 建立全角度入射、宽带范围、折射率和厚度均可优化设计的膜系设计优化方法。

5.5.1 改进的增透膜设计蚁群优化算法

本节仍然以单晶硅为衬底材料, n 层薄膜依次在硅衬底上生长。设计优化结构示意图如图 5-8 所示。与上节不同的是, 每层膜的厚度和折射率均未知, 同时光波不再只是垂直入射, 而是在一定的入射角范围内入射到器件表面。膜层材料的折射率为 n_i , 相应膜层厚度为 t_i , $i = \{1, 2, \dots, n\}$ 。光波从空气中(折射率为

n_0)以入射角 θ 射到膜层表面,为简化计算,我们仍假设入射进入的光波均被硅衬底(折射率为 n_{Si})吸收。对于膜系反射率的计算仍采用 5.3 节中的特征矩阵法。

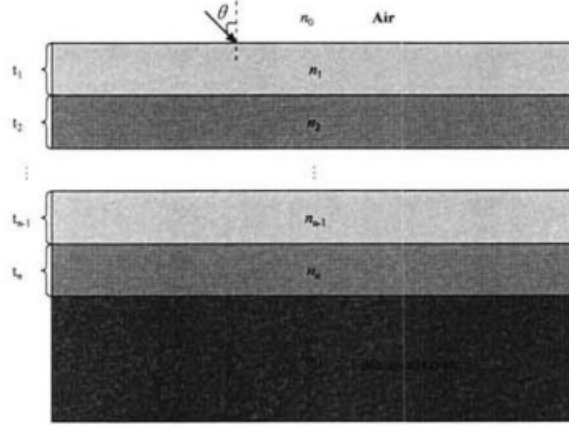


图5-8 硅探测器全角度入射反射率计算二维结构示意图

Fig.5-8 Two-dimensional structure for the reflectance calculation with omnidirectional incidence of silicon detector

膜系结构数学模型的建立思想来源于遗传算法在增透膜系设计中的应用^[94]。膜系结构采用二进制数进行编码。假设 d_{max} 为设定的一层膜的最大可能厚度, n_{min} 和 n_{max} 为设定的一层膜的最小和最大可能折射率。则可用 s 位二进制数表示第 i 层膜材料的折射率为:

$$C_i = c_i^1 c_i^2 \dots c_i^s \quad (5-33)$$

第 i 层膜的实际折射率为:

$$n_i = (n_{max} - n_{min}) \frac{\sum_{j=1}^s c_i^j 2^{j-1}}{2^s - 1} + n_{min} \quad (5-34)$$

同理,第 i 层膜材料的厚度可以用 m 位二进制数表示:

$$D_i = d_i^1 d_i^2 \dots d_i^m \quad (5-35)$$

第 i 层膜的实际厚度为:

$$d_i = d_{max} \frac{\sum_{j=1}^m d_i^j 2^{j-1}}{2^m - 1} \quad (5-36)$$

那么 n 层膜系可以用一串二进制数表示为:

$$L = C_1 D_1 C_2 D_2 \dots C_n D_n \quad (5-37)$$

因此我们可以用一个 $(n \times s + n \times m)$ 位的二进制数表示一确定的膜系结构。

为了方便利用蚁群算法优化膜系结构，我们对这 $(n \times s + n \times m)$ 位二进制数进行重新编码。不妨设 $s = m = g$ (s 和 m 越大，虽然增加了问题的求解规模，但是同时提高了求解精度，故可以取 s 和 m 同时等于某一较大整数 g)。因此可以用 $2n \cdot g$ 位二进制数确定一膜系结构。对能够代表膜系结构的二进制数排序如下：

$$L = d_1^1 c_1^1 d_1^2 c_1^2 \dots d_1^g c_1^g d_2^1 c_2^1 d_2^2 c_2^2 \dots d_j^i c_j^i \dots d_n^g c_n^g \quad (5-38)$$

对于 $d_j^i c_j^i$ ，其取值总共有4种情况：00，01，10，11，分别用A，B，C，D表示。

根据上述编码分析过程，我们提出了一种改进的多城市层旅行商模型，如图5-9所示。对于我们设计的结构，城市的层数为 $n \cdot g$ ，每层中均有A，B，C，D四

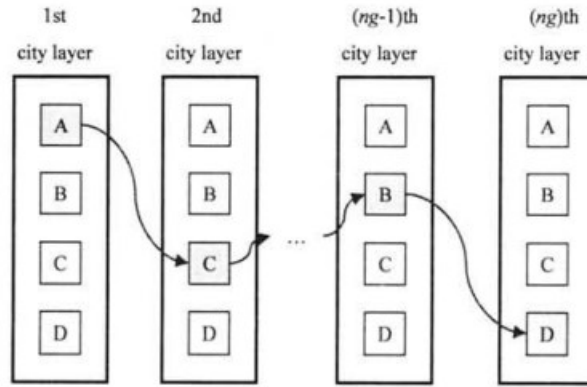


图5-9 多城市层系统示意图

Fig.5-9 Illustrate of the multi city layer system

个城市。接下来我们对增透膜系的优化设计就是基于该模型。在该模型中，旅行者被等概率的分配到第一城市层中的四个城市中，然后按照一定的原则，在第二个城市层中选择一个目标到达的城市，以此类推，最终到达最后一个城市层中的某个城市。在此过程中，每个城市层均只经过一次。当旅行者到达最后一个城市层时，旅行宣告结束。在多城市层系统中，每一个完整的旅行同样都可以产生一个相应问题的解。例如图中所示红色线条所代表的旅程，可以表示为{A C ... B D}，而它给出的二进制数信息为 $\{d_1^1=0, c_1^1=0, d_1^2=1, c_1^2=0, \dots, d_n^{g-1}=0, c_n^{g-1}=1, d_n^g=1, c_n^g=1\}$ 的增透膜系结构，通过这些二进制数，利用前述的编码规则就可以确定膜系的具体折射率和厚度。为了得到全角度宽带增透膜设计问题中的最优解，我们用多城市层旅行商系统对增透膜设计问题进行建模求解。

一次旅行的总路程，也就是目标评价函数，由平均反射率来定义。同样的，寻找最小反射率的增透膜优化设计问题就转化为在多路径旅行商问题中寻找最短路径。评价函数也就是平均反射率为 R_{ave}^θ [76]，

$$R_{ave}^{\theta} = \frac{1}{\lambda_2 - \lambda_1} \frac{1}{\theta_2 - \theta_1} \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \int_{\theta_1}^{\theta_2} \frac{R_{TE} + R_{TM}}{2} d\theta d\lambda \quad (5-39)$$

对于所研究波段范围及入射角范围内，反射率权重均相等，其中 R_{TE} 和 R_{TM} 分别代表与波长和入射角有关的TE波和TM波反射率。

接下来我们使用蚁群算法求解旅行商问题的解决思路，来设计优化全角度宽带增透膜的结构。假设共有总共有 K 只蚂蚁，所有的蚂蚁都等概率被放置在起始点第一城市层内的四个城市上，并且按照规则依次选择下一个城市层中的城市，直到到达最后一个城市层中的城市。用蚂蚁遗留信息素的浓度来表示经过路径轨迹的信息强度。我们用 $\tau(d, i, j)$ 来表示城市层 d 中的城市 i 和城市层 $d+1$ 中的城市 j 之间路径的信息素浓度，其中 $d = \{1, 2, \dots, ng-1\}$, $i = \{1, 2, 3, 4\}$, $j = \{1, 2, 3, 4\}$ 。首先初始化所有轨迹上的信息素矩阵，每个元素设为 τ_0 。对于某一在城市层 d 中的城市 i 上的蚂蚁，它通过式(5-40)给出的规则选择下个城市层将要达到的城市 j 。

$$j = \begin{cases} \arg \max [\tau(d, i, j)] & \text{如果 } q \leq q_0 \text{ 按先验知识选择路径} \\ P & \text{否则按概率选择} \end{cases} \quad (5-40)$$

其中， q 是在 $[0,1]$ 区间均匀分布的随机数， q_0 是一个 $[0,1]$ 区间内的经验参数， P 为根据式(5-41)给出的概率分布选出的一个随机变量。

$$P(d, i, j) = \frac{\tau(d, i, j)}{\sum_j \tau(d, i, j)} \quad (5-41)$$

信息素的更新经历两个步骤：局域更新和全局更新。更新规则如下：

$$\tau(i, j) = (1 - \rho) \cdot \tau(i, j) + \Delta\tau(i, j) + e \cdot \Delta\tau^e(i, j) \quad (5-42)$$

其中 ρ 为 $[0,1]$ 区间内经验参数， e 为精英蚂蚁的数量，也由经验决定。并且

$$\Delta\tau(i, j) = \sum_{k=1}^K \Delta\tau^k(i, j) \quad (5-43)$$

对于第 k 只蚂蚁

$$\Delta\tau^k(i, j) = \begin{cases} Q / R_{ave}^{\theta} & \text{如果 } (i, j) \in \text{旅行路径} \\ 0 & \text{否则} \end{cases} \quad (5-44)$$

$$\Delta\tau^e(i,j) = \begin{cases} Q/R_{ave}^{\theta^+} & \text{如果 } (i,j) \in \text{最短旅行路径} \\ 0 & \text{否则} \end{cases} \quad (5-45)$$

Q 为经验参数, R_{ave}^{θ} 为根据第 k 只蚂蚁走过路径计算得出的平均反射率, $R_{ave}^{\theta^+}$ 表示已经找到的全局最优解。

局域更新规则使得每只蚂蚁经过的路径上的信息素浓度都得以增强, 而其他路径上信息素浓度随着时间而逐渐扩散消失。信息素更新的浓度 $\Delta\tau$ 与蚂蚁经过该路径的路程成反比。局域更新可以避免后续蚂蚁过多的选择同一路径而出现过早的局域收敛, 得到局域最优解。全局更新使得最优路径上的信息素不断增强。其中 $R_{ave}^{\theta^+}$ 表示已经找到的全局最优解。信息素 $\Delta\tau^e$ 为了增强全局最优路径上的信息素浓度。

利用 ACA 对全角度宽带增透膜进行优化设计的具体步骤如图 5-10 所示:

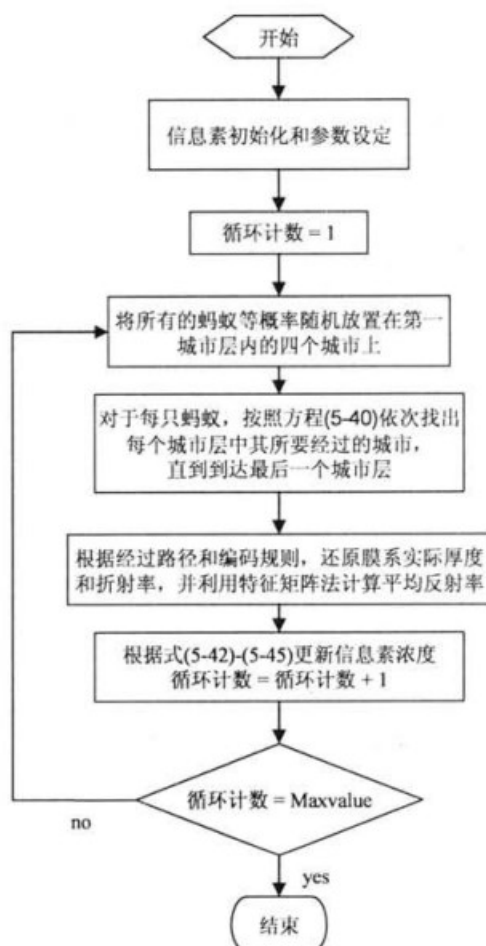


图 5-10 ACA 优化设计全角度宽带增透膜流程图

Fig.5-10 Flow chart for ACA-based broadband omnidirectional AR coating optimization method

1. 设定参数和初始化信息素浓度；
2. 将所有的蚂蚁等概率随机放置于第一城市层中的城市上；
3. 每一只蚂蚁按照式(5-40)，从所有的可选路径中选择一条到达下一城市层中的某个城市，直到到达终点；
4. 根据经过路径和编码规则，还原增透膜系的实际厚度和折射率，并利用特征矩阵法计算每一只蚂蚁所经过的路径长度，也就是 R_{ave}^{θ} ；
5. 根据式(5-42)-(5-45)进行信息素浓度的局域更新和全局更新；
6. 如果迭代次数达到预先设定的最大值，则终止计算，否则重复过程2-5。

5.5.2 全角度宽带增透膜蚁群算法优化设计结果

在使用上述方法对增透膜进行全面的优化设计之前，我们先将该方法与已经报道的增透膜设计方法作对比。针对文献[95]中的3层膜系结构，原文中使用遗传算法对每层膜的厚度进行了优化设计，并在实验上给予验证。这种3层膜系结构由多孔SiO₂层($\lambda = 550\text{ nm}$, $n = 1.07$)，SiO₂层($\lambda = 550\text{ nm}$, $n = 1.47$)，TiO₂层($\lambda = 550\text{ nm}$, $n = 2.66$)组成，衬底材料为单晶硅，结构如图5-11所示。对于该结构，固定折射率不变，针对波长400~750 nm，入射角范围为40°~80°，只设计每层膜的厚度。应用上文中提出的蚁群算法优化设计方法得到的平均反射率为1.89%，计算得文献[95]中遗传算法优化结构的平均反射率为3.6%，文献[77]利用模拟退火算法对结构优化后的平均反射率为3.51%。在ACA对全角度宽带增透膜进行设计优化过程中的参数选取如表5-3所示。ACA程序代码使用Matlab编写。详细的设计结果对比如表5-4所示。

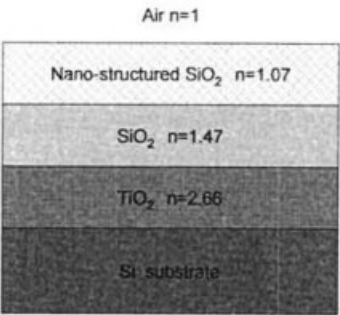


图5-11 3层增透膜结构示意图^[95]

Fig.5-11 Schematic of three-layer antireflection structure

表5-3 ACA优化设计中参数选取

Table 5-3 Parameters chosen in the optimization using ACA-based method

参数	K	ρ	q_0	τ_0	e	g	Q	Maxvalue	n
取值	50	0.02	0.3	1	1	8	0.01	100	3

表5-4 不同优化算法设计的单晶硅衬底上3层增透膜厚度(nm)及平均反射率比较(入射角40°~80° 波长400~750 nm)

Table 5-4 Thickness (nm) of individual layers of the three-layer AR coatings on Si designed by different algorithms and the related average reflectivity (incidence angle 40°~80° wavelength 400~750 nm)

算法	TiO ₂ (nm)	SiO ₂ (nm)	Porous SiO ₂ (nm)	R_{ave}^0 (%)
蚁群算法	50.88	123.68	296.67	1.89
遗传算法 ^[95]	45	120	200	3.6
模拟退火算法 ^[77]	56.81	122.88	373.14	3.51

图5-12分别表示了表5-4中3种算法优化结果中反射率随波长和入射角度的关系。从图中可以看出, 蚁群算法优化的结果, 对于整个波长和入射角范围, 均有较低的反射率, 而遗传算法优化的结果在入射角度大于75°时, 出现了较高的反射率。模拟退火算法优化的结果在短波处(尤其是在410 nm以下)反射率较高。

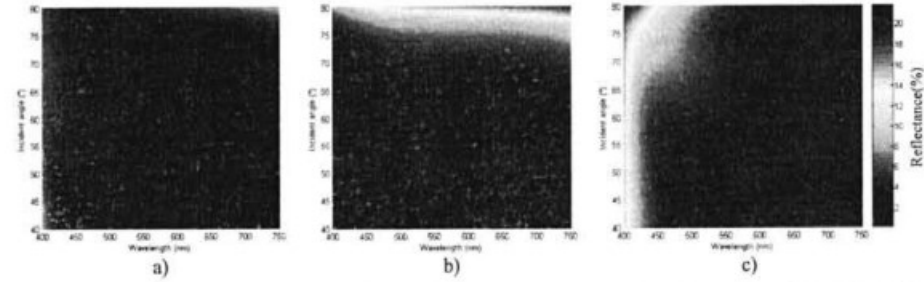


图5-12 Si衬底上3层增透膜系反射率随波长和入射角度变化关系 a) 蚁群算法优化结果 b) 遗传算法优化结果^[95] c) 模拟退火算法优化结果^[77]

Fig.5-12 Calculated reflectance of three-layer antireflection coatings on Si substrate depending on wavelength and incidence angle designed by a) ACA b) genetic algorithm c) simulated annealing algorithm

接下来我们利用上述的蚁群优化算法, 优化设计硅衬底上全角度入射宽带3层增透膜, 结构如图5-8所示。同时考虑优化每层膜的折射率和厚度。折射率的取值范围1.05~2.66^[77]。波长范围和入射角范围和上述算法对比计算中一致, 优化结果如表5-5所示。

表5-5 ACA设计的单晶硅衬底3层增透膜结构 (入射角40°~80° 波长400~750 nm)

Table 5-5 Structure of the three-layer AR coatings on Si designed by ACA (incidence angle 40°~80° Wavelength 400~750 nm)

	第一层	第二层	第三层	平均反射率 R_{ave}^0 (%)
折射率	$n_1 = 1.0754$	$n_2 = 1.4430$	$n_3 = 2.6220$	1.68
厚度(nm)	$t_1 = 245.67$	$t_2 = 119.68$	$t_3 = 53.54$	

表5-5优化结果中反射率随波长和入射角度的关系如图5-13所示。通过比较

图5-13和图5-12 a)可以发现,通过分别优化3层膜的折射率,进一步使得图中低反射率范围扩大,波长600 nm左右,入射角55°左右对应部分的反射率进一步降低。由此我们证明了蚁群算法对于增透膜系的设计优化问题是十分有效地。

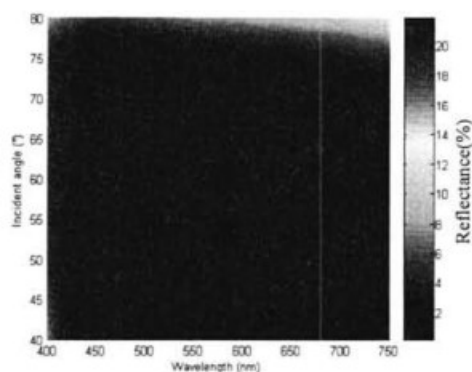


图5-13 Si衬底上蚁群算法优化3层增透膜系反射率随波长和入射角度变化关系

Fig.5-13 Calculated reflectance of three-layer antireflection coatings on Si substrate depending on wavelength and incidence angle designed by ACA

进一步我们尝试增加设计的膜层层数,对4层增透膜在400~1000 nm波段,入射角度0°~80°范围内的反射率进行优化设计,蚁群算法设计得到的平均反射率为2.86%,与文献[77]中的结果对比可知,文献中的结果较好。这是因为蚁群算法中某些经验参数的设定,随着问题规模的扩大,变得越来越难以选取,需要依靠大量的实验来优化经验参数的组合。对于4层增透膜的设计,目前还没有得到更优的结果。4层膜设计优化过程中,对于每一次迭代中所有蚂蚁获得的平均反射率再取平均值,以及当前代获得的最优解随迭代次数的关系如图5-14所示。

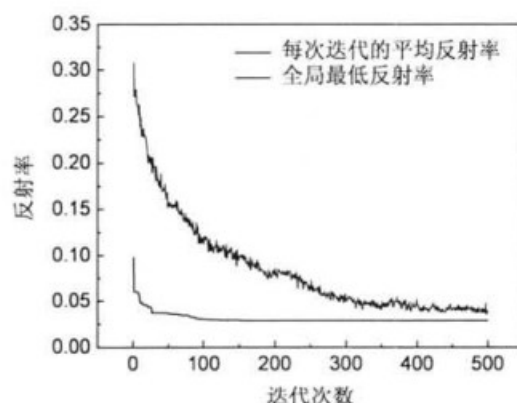


图5-14 蚁群算法优化4层增透膜过程中反射率随迭代次数关系

Fig.5-14 The reflectance depending on the number of iterations in the four-layer AR coating design process by ACA

从图中可以看到,对于4层膜设计中,蚁群算法在迭代约150次时就收敛致最优解,收敛速度较快。事实上,对于前文中所述的3层增透膜设计问题,蚁群算法在大约迭代50次后就收敛致最优解。对于蚁群算法在多层膜系优化设计问题中的应用,还需要进一步研究。

5.6 小结

本章中对蚁群算法在增透膜优化设计问题中的应用做了首次尝试。在此基础上,进一步优化设计模型,对于3层全角度宽带增透膜进行了设计优化,通过和已报道结果对比,发现蚁群算法的结果最优。并进一步利用蚁群算法设计了在400~750 nm 波段,入射角度 40°~80°范围内的平均反射率仅为 1.68%的3层增透膜。最后,对于蚁群算法在4层增透膜设计中进行了尝试,我们发现对于更加复杂的设计问题,还需进一步研究。

第6章 硅雪崩光电二极管制备和测试分析

6.1 引言

本章中我们根据传统的硅工艺条件以及我们所能实现的实验条件,设计了本文第三章中提出了新型 Si APD 结构制备流程,并且进行了实验制备。对首次制备的器件性能进行了测试分析。

6.2 硅雪崩光电二极管制备流程设计

单晶硅的制法通常是先制得多晶硅或无定形硅,然后用直拉法或悬浮区熔法从熔体中生长出棒状单晶硅。熔融的单质硅在凝固时硅原子以金刚石晶格排列成许多晶核,如果这些晶核长成晶面取向相同的晶粒,则这些晶粒平行结合起来便结晶成单晶硅。本实验中使用直拉法制备的高电阻率单晶硅。衬底材料为 p 型(100) Si, 电阻率为 $150\ \Omega\cdot\text{cm}$, 对应掺杂浓度约为 $8.87\times 10^{13}\ \text{cm}^{-3}$ 。

对于 Si APD 器件的制备流程,主要工艺步骤如图 6-1 所示:

1. 台阶内部 p 型层的离子注入,注入前先在表面干氧氧化 20 nm 厚的 SiO_2 薄膜,减小离子注入对硅片晶格的损伤,注入杂质为硼,注入能量为 150 keV,注入剂量为 $1\times 10^{14}\ \text{cm}^{-2}$;
2. 表面 n^+ 型层的离子注入,注入杂质为砷,注入能量为 30 keV,注入剂量为 $1\times 10^{15}\ \text{cm}^{-2}$;
3. 使用 ICP 刻蚀台阶,刻蚀后对使用台阶仪对台阶高度测量,测量值为 $1.3\ \mu\text{m}$;
4. PECVD 淀积 $1\ \mu\text{m}$ 厚的 SiO_2 薄膜,充当 p+层离子注入掩膜,并光刻出注入图形;
5. 表面 p^+ 型层的离子注入,注入杂质为硼,为了保证离子注入的深度和表面杂质浓度,采用两次注入,注入能量分别为 150keV 和 30 keV,注入剂量均为 $1\times 10^{15}\ \text{cm}^{-2}$;
6. PECVD 淀积 $0.8\ \mu\text{m}$ 厚的 SiO_2 薄膜,充当 n 层离子注入掩膜,光刻出注入图形后进行离子注入,注入杂质为砷,注入能量为 30 keV,注入剂量为 $1\times 10^{14}\ \text{cm}^{-2}$,并快速热退火激活离子;
7. 使用 PECVD 淀积的 SiO_2 薄膜对器件进行钝化,然后采用溅射方法淀积金属 Al,光刻出淀积图形。

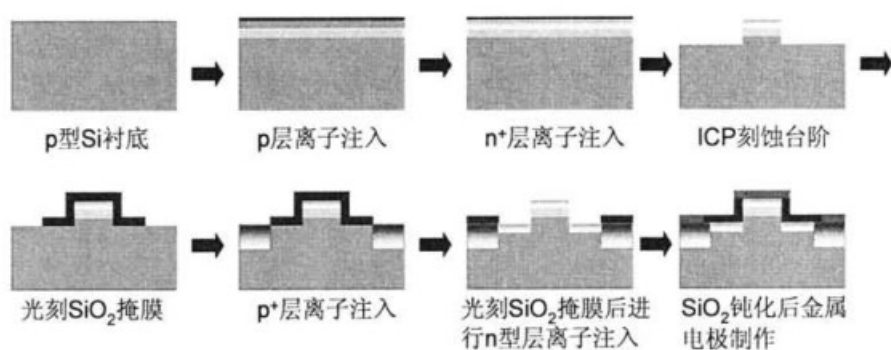


图 6-1 Si APD 制备流程图

Fig.6-1 Flow chart for Si APD manufacturing

Si APD 俯视结构示意图, 如图 6-2 所示, 制备中台阶形状为正方形, 实验对比组设计中, 只改变器件中间台阶的边长尺寸, 实际制备中, 台阶边长尺寸分别为 $2\ \mu\text{m}$ 、 $10\ \mu\text{m}$ 、 $40\ \mu\text{m}$ 和 $80\ \mu\text{m}$, 未被电极遮挡的吸收区面积恒定为 $10^4\ \mu\text{m}^2$ 。

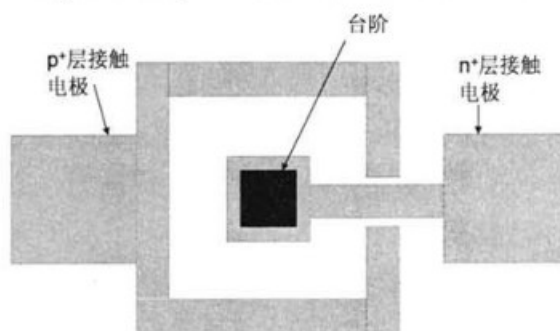


图 6-2 Si APD 俯视结构示意图

Fig.6-2 The schematic structure for overlooking Si APD

由于器件台阶内部 p 型层的离子注入均匀性, 对于器件的性能影响十分显著, 为了保证 p 型层的杂质分布均匀, 以及考虑到实际离子注入为避免隧道效应采用 7° 角注入, 因此, 在 ICP 刻蚀前, 预先注入 p 型层。

ICP 刻蚀后由于表面存在损伤, 为了减小表面损伤, 常采用湿法腐蚀的方法。KOH 和 TMAH 是目前常用的硅腐蚀剂(TMAH 四甲基氢氧化铵, 分子式 $(\text{CH}_3)_4\text{NOH}$), TMAH 腐蚀液的优点: 与 CMOS 工艺兼容、无金属离子, 具有与 KOH 接近的腐蚀速率和选择比, 腐蚀表面效果好, 不腐蚀 SiO_2 , 无毒无污染。腐蚀速率: 70°C 条件下, 25% TMAH, 约 $300\ \text{nm}\cdot\text{min}^{-1}$ 。因此, 在制备步骤中第 7 步钝化和制备电极之前, 采用 25% TMAH 硅腐蚀剂, 在 70°C 条件下对器件处理了 5 秒钟, 腐蚀掉表面约 $25\sim 30\ \text{nm}$ 的硅层, 以减小表面刻蚀损伤, 以此来减小表面漏电流。由于器件内部的离子注入掺杂分布对高温敏感, 为了不改变杂质浓度分布, 因此在整个流程中应尽可能避免高温处理, 在所有的离子注入均完成后, 进行了一次性的快速热退火, 激活离子, 快速热退火条件为 1050°C , 20 s。

6.3 硅雪崩光电二极管测试分析

对于制备的 Si APD 器件, 本节采用 Agilent 4156C 半导体特性测试仪对器件的电流-电压特性进行测量。

首先, 在器件制备完成后, 在封装之前, 利用探针台在室温无光的条件下对器件进行测试, 在反向偏置条件下, 不同台阶尺寸的电流电压特性测试结果如图 6-3 所示。结果表名, 四种不同尺寸器件的击穿电压为 8~9 V 左右, 室温下, 随着器件尺寸的增加, 暗电流成增加趋势。其中一个原因是, 随着器件台阶尺寸的

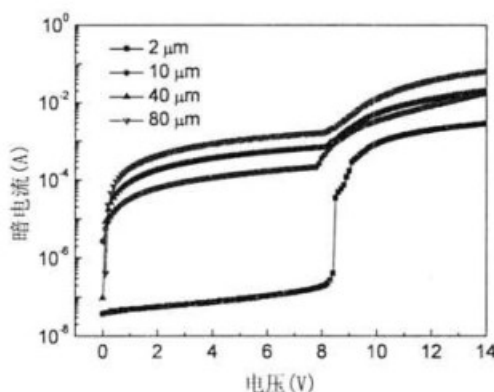


图 6-3 室温下 Si APD 电流-电压特性

Fig.6-3 Current-voltage characteristics of Si APD at room temperature

增加, 雪崩区面积增大, 从而雪崩区的产生复合电流增大。击穿前四种尺寸的暗电流值均远大于理论值, 尤其是对于台阶边长 10 μm 以上的器件。这主要是由于 CMP 工艺中对台阶顶端的 n^+ 层出现了过抛, 导致台阶顶端边界处 n^+p 结的势垒降低, 如图 6-4 所示。在 CMP 过程中发现, 台阶顶端边界处的抛光速率大于台阶中间部位, 为了使得台阶顶端的 SiO_2 可以去除干净, 台阶边界处不可避免的出现了过抛光。对于 80 μm 尺寸器件, 由台阶仪测试器件形貌结果如图 6-5 所示, 从测试结果可以看到, CMP 后, 台阶顶端边界处比中间部位低大约 50 nm, 也就是说边界处过抛了至少 50 nm。由于四种尺寸的器件制备在同一硅片上, 台阶尺寸越大, 台阶边界处与中间部位的高度差越大, 从而在使得所有尺寸器件顶端 SiO_2 均去除干净后, 台阶尺寸越大, 过抛越严重, 而器件顶端的 n^+ 层的厚度仅仅为 0.13 μm 左右, 台阶掺杂浓度分布仿真结果如图 6-6 所示, 因此表面 n^+p 结的结特性对于过抛很敏感。而对于 2 μm 的小尺寸器件, 过抛现象最轻微, 所以 2 μm 器件的结特性最接近理想情况, 暗电流也最小。

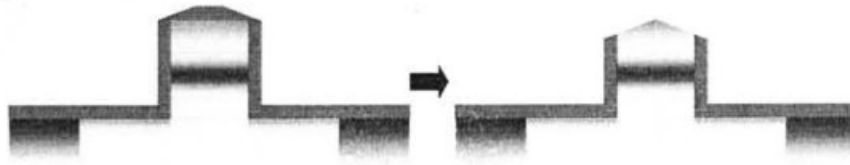


图 6-4 Si APD CMP 结果形貌示意图

Fig.6-4 The schematic morphology of Si APD by CMP

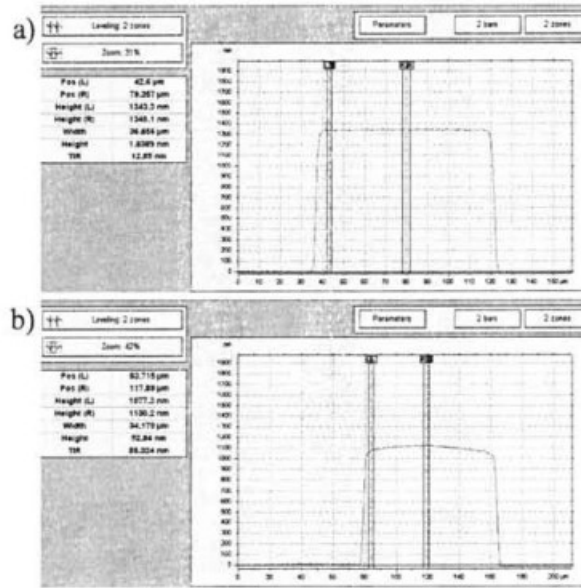


图 6-5 Si APD 形貌台阶仪测试结果 a) CMP 前 b) CMP 后

Fig.6-5 The morphology of Si APD obtained by stylus profiler a) before CMP b) after CMP

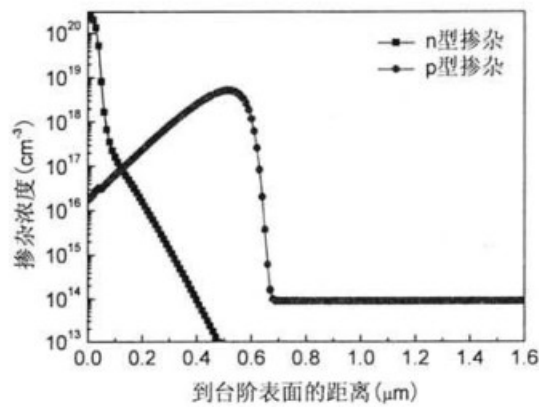


图 6-6 Si APD 台阶纵向掺杂浓度分布

Fig.6-6 Vertical doping concentration distribution of Si APD mesa

将制备的器件压焊至管座后再进行测试, 室温下测试结果如图 6-7 所示。压焊后器件击穿电压与探针台测试结果相比均有所减小, 这是因为压焊后测试仪器与器件电极之间的接触电阻减小所致。测试中光源由卓立汉光光谱测试系统中的光源提供, 波长 850 nm。从测试数据可以看到, 随着器件台阶尺寸的减小, 器件击穿前对光电流的探测越来越灵敏, 这主要依赖于当光强固定前提下, 小尺寸器件暗电流成分中雪崩区产生复合电流和台阶侧壁表面漏电流较小的缘故, 这部分暗电流强烈的依赖于器件的尺寸。由于器件尺寸 10 μm 以上时的暗电流过大, 光电流和暗电流曲线基本重合。而所有尺寸器件在击穿后, 光电流曲线和暗电流曲线均几乎重合, 说明击穿后雪崩区内的产生复合电流过大, 此结果表明雪崩区制备时工艺存在问题, 离子注入造成的晶格损伤并没有完全消除。对于下一步工作, 必须通过优化工艺降低雪崩击穿时暗电流和击穿前大尺寸器件的暗电流, 才能够使得其对光电流有探测能力。

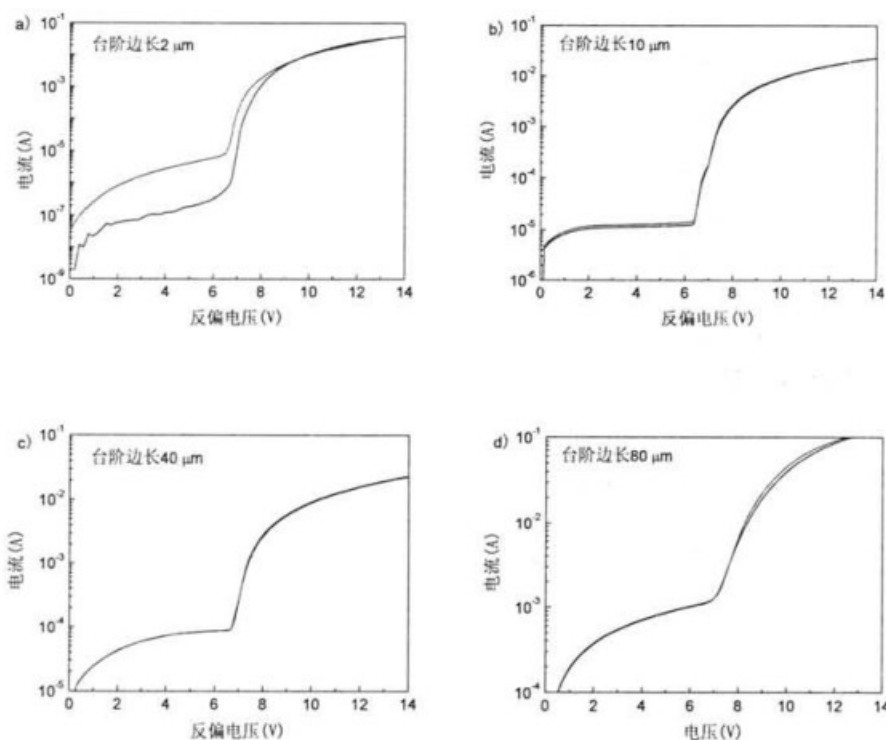


图 6-7 室温下不同尺寸 Si APD 电流-电压特性(红线: 有光照, 黑线: 无光照) a) 2 μm , b) 10 μm , c) 40 μm , d) 80 μm

Fig.6-7 Current-voltage characteristics of Si APD at room temperature (red line: with light; black line: without light) a) 2 μm , b) 10 μm , c) 40 μm , d) 80 μm

为了进一步分析制备器件的性能, 接下来对台阶边长为 2 μm 的器件, 在液

氮温度下的电流-电压特性进行测试分析,如图 6-8 所示。首先可以发现,当温度降低时,器件的暗电流明显降低,这是因为器件的产生复合电流和扩散电流均对与温度非常敏感,随着温度降低,产生复合电流和扩散电流均大幅降低,如式 (1-8)和(1-9)所示。结果表明,随着温度上升,器件的击穿电压升高。这是由于当温度上升时,声子散射成为主要因素,因而载流子的碰撞离化系数随温度的升高而减小。这导致上述的击穿电压随温度的变化。电子和空穴的离化系数随温度变化的经验公式^[15]:

$$\alpha = 6.2 \times 10^5 \exp[-(1.05 \times 10^6 + 1.3 \times 10^3 T) / E] \quad (6-1)$$

$$\beta = 2.0 \times 10^6 \exp[-(1.95 \times 10^6 + 1.1 \times 10^3 T) / E] \quad (6-2)$$

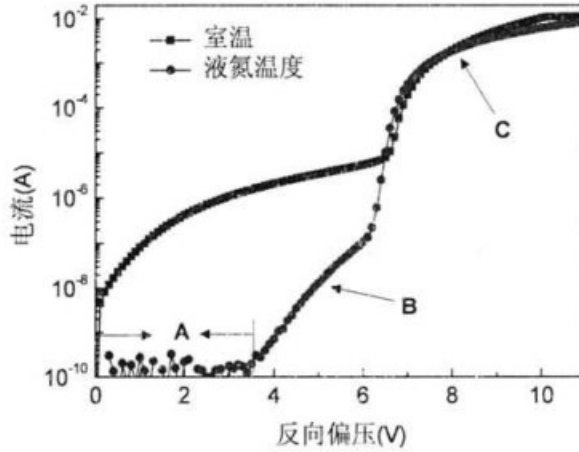


图 6-8 台阶尺寸 2 μm Si APD 在不同温度下电流-电压特性

Fig.6-8 Current-voltage characteristics of Si APD with 2 μm mesa size at different temperature

当温度上升 dT 时,为了维持击穿条件所必须的电场的增加为 dE_m ,所需的击穿电压的变化 dV 为:

$$dV = dE_m \cdot L_D \quad (6-3)$$

对于图 6-8 中液氮温度下的 APD 电流-电压曲线,可以分为三个区域^[96]:

- (1) 图中的 A 段。此时外加偏压较低,耗尽层在台阶中的雪崩区内,未扩展到中间的 p 型区。吸收区产生的电子的能量不足以克服 p 区和衬底 p-区之间的势垒,无法到达雪崩区进而到达 n^+ 电极,所以吸收区电子对外电路中电流没有贡献。
- (2) 图中的 B 段。此时耗尽区扩展到了 p 型区,使得该处的能带发生弯曲,从而降低了界面势垒对于吸收区电子的阻挡作用,吸收区内的电子可以跃

过界面势垒并在电场作用下,到达 n^+ 电极,从而在外电路中形成电流。随着偏压的增大,吸收层中耗尽区增大,同时 p 型区和衬底间能带弯曲更加严重,使得外电路电流增大。但是由于在 p 区和 p -区界面处势垒仍然存在,仍然有部分吸收区的电子在界面处复合,响应度偏低。

- (3) 图中的 C 段。此时雪崩区中的电场强度达到了发生雪崩倍增的临界电场,吸收区输运过来的电子在电场下获得足够的能量,与 Si 晶格发生碰撞电离,电流获得了雪崩增益。

由上述的分析结果可以知道,本次制备的器件暗电流偏大,性能没有达到预期的效果,主要原因有: 1. CMP 工艺中出现了过抛光现象,降低了台阶顶端附近 n^+p 结的势垒; 2. 离子注入工艺导致的器件损伤未被完全修复,从而导致雪崩击穿后的暗电流大幅增加,淹没了光生电流的响应; 3. ICP 刻蚀中对器件表面的损伤导致的表面漏电流的增加,没有充分衡量表征。

6.4 小结

设计了新型 Si APD 器件制备流程,并对器件的制备进行了首次尝试。通过测试分析发现,首次制备出的器件的雪崩击穿电压大约在 7 V 左右,与理论设计相近,但是工艺中,尤其是 CMP 工艺和离子注入雪崩区工艺中存在的问题,导致了暗电流过大。同时,根据目前已经得到的测试结果发现,随着器件台阶尺寸的减小,器件的暗电流呈降低趋势,但是器件尺寸在 10 μm 以上时,器件尺寸的变化对于器件性能的影响并不显著,当尺寸降低至 2 μm 时,性能大大提高。因此,我们下一步的工作就是改进制备工艺,尤其针对 CMP 和雪崩区的离子注入,并进一步制备台阶尺寸更小的器件,以期获得性能更加优良的 Si APD 器件。

结 论

本论在国家自然科学基金的资助下,围绕硅高增益雪崩光电探测器,进行了深入的理论分析、器件仿真模拟、算法研究和实验研究。并对制备硅 APD 器件进行了初次尝试。本文的主要工作和研究成果总结如下:

(1)通过利用 ISE TCAD 模拟仿真软件,应用流体动力学传输模型和热力学模型,考虑到雪崩倍增、复合机制等物理过程,对设计的新型硅 APD 器件的能带结构、电学特性进行了仿真模拟。同时研究了器件的物理结构对于其电学特性的影响。在仿真中通过加光照,研究了 APD 增益与器件尺寸间存在的关系,结果发现随着器件台阶尺寸的减小,器件增益成增加趋势,并且发现通过添加 n 型漂浮电极,可以提高雪崩增益。理论上设计出了器件台阶尺寸为 100 nm,击穿电压为 9.3 V,雪崩增益可达到 10^6 以上的硅 APD 器件结构。

(2)根据本文中设计的硅 APD 器件结构,结合传统的硅工艺技术,设计了器件的工艺制备流程。针对工艺中最关键的电感耦合等离子体(ICP)刻蚀工艺,深入研究分析了 Cl_2/Ar 混合气体对于硅材料的刻蚀规律及其内在机制,研究发现离子辅助刻蚀机制在 Cl_2/Ar 混合气体刻蚀材料过程中起着关键的作用,化学刻蚀机制与物理刻蚀机制之间的相对强弱决定了刻蚀结果。刻蚀速率随着 RF 功率的增大近似线性增加,ICP 功率的大小对于刻蚀速率影响不大,但是严重影响着器件的侧壁形貌,通过增加 ICP 功率可以有效地平滑侧壁,减少物理刻蚀损伤,但同时也增加了各向同性刻蚀,因此需要折中考虑刻蚀条件。此外,对于化学机械抛光(CMP)、离子注入后退火等工艺进行了初步研究,找到了制备器件比较合适的工艺条件。

(3)在分析蚁群优化算法特点的基础上,结合该算法在解决 TSP 问题中的应用,对增透膜设计问题进行数学建模,并将蚁群算法应用于宽带垂直入射情况下的增透膜设计中。针对 SiO_2 和 SiN 交替结构的多层膜结构,设计出的 6 层膜平均反射率比 SiN 单层膜降低了 3.64%。在此基础上,我们对基于蚁群算法的增透膜设计方法进行了改进,建立了全角度宽带增透膜设计方法,并针对波长 400~750 nm,入射角 $40^\circ\sim 80^\circ$ 范围,设计出了 3 层全角度宽带增透膜,理论计算结果表明设计出的 3 层增透膜平均反射率仅为 1.68%,比已报道的遗传算法设计结果 (3.6%) 和模拟退火算法设计结果 (3.51%) 都要低,从而初次证明了蚁群算法在增透膜设计问题中应用的有效性和优越性。

(4)在实验上制备了台阶尺寸分别为 2 μm 、10 μm 、40 μm 、80 μm 的器件,通过测试分析发现,随着器件台阶尺寸的减小,器件的暗电流呈现减小趋势,与

仿真结果一致。同时发现器件尺寸在 $10\ \mu\text{m}$ 以上时, 器件尺寸的变化对于器件性能的影响并不显著, 当器件的尺寸降低至 $2\ \mu\text{m}$ 时, 在液氮温度下器件的击穿电压为 $6.5\ \text{V}$ 左右, 并且暗电流明显降低。通过分析发现了器件工艺(尤其是 CMP 工艺和离子注入工艺)中存在的问题, 我们下一步的工作就是改进制备工艺, 并进一步制备台阶尺寸更小的器件, 以期获得性能更加优良的硅 APD 器件。

通过本课题的研究, 我们认识到蚁群算法对于增透膜设计问题是一种十分有效的优化算法, 并且将会起到越来越重要的作用。对于硅 APD 器件的初次尝试制备和测试发现, 尽管器件性能没有达到预期, 但是理论仿真结果和测试结果都预示着纳米量级尺寸的器件将会有着更加优越的性能。

参考文献

- 1 R. Sudharsanan, P. Yuan, J. Boisvert, P. McDonald, T. Isshiki, S. Mesropian, E. Labios, M. Salisbury. Single photon counting Geiger mode InGaAs/InP avalanche photodiode arrays for 3D imaging. *Proceedings of SPIE*. 2008, 6950:N9500
- 2 S. Vasile, J. Lipson. Low-cost LADAR imagers. *Proceedings of SPIE*. 2008, 6950:P9500
- 3 Y. S. Kim, Y. C. Jeong, S. Sauge, V. Makarov, Y. H. Kim. Ultra-low noise single-photon detector based on Si avalanche photodiode. *Review of Scientific Instruments*. 2011, 82(9):093110
- 4 M. Montes, G. Dunn, A. Stephen, A. Khalid, C. Li, D. Cumming, C.H. Oxley, R. H. Hopper, M. Kuball. Reduction of impact ionization in GaAs-based planar gunn diodes by anode contact design. *IEEE Transactions on Electron Devices*. 2012, 59(3):654-660
- 5 M. Forster, A. Cuevas, E. Fourmond, F. E. Rougieux, M. Lemiti. Impact of incomplete ionization of dopants on the electrical properties of compensated p-type silicon. *Journal of Applied Physics*. 2012, 111(4):043701
- 6 S. Dong, N. Li, S. H. Chen, X. H. Liu, W. Lu. Impact ionization in quantum well infrared photodetectors with different number of periods. *Journal of Applied Physics*. 2012, 111(3):034504
- 7 S. M. Csutak, J. D. Schaub, W. E. Wu, J. C. Campbell. High-speed monolithically integrated silicon optical receiver fabricated in 130-nm CMOS technology. *IEEE Photonics Technology Letters*. 2002, 14(4):516-518
- 8 刘恩科, 朱秉生, 罗晋生等. 半导体物理学. 第4版. 国防工业出版社, 1994: 256-264
- 9 余金中. 半导体光电子技术. 化学工业出版社, 2003:106-124
- 10 S. Cova, M. Ghioni, A. Lacaita, C. Samori, F. Zappa. Avalanche photodiodes and quenching circuits for single-photon detection. *Applied Optics*. 1996, 35(12):1956-1976
- 11 M. Stipcevic. Active quenching circuit for single-photon detection with Geiger mode avalanche photodiodes. *Applied Optics*. 2009, 48(9):1705-1714
- 12 K. Zhao, S. F. You, J. Cheng, Y. H. Lo. Self-quenching and self-recovering InGaAs/InAlAs single photon avalanche detector. *Applied Physics Letters*. 2008, 93(15):153504
- 13 R. Braunstein. Nonlinear optical effects. *Physical Review*. 1962, 125(2):475-477
- 14 H. R. Philipp. Influence of oxide layers on the determination of the optical properties of silicon. *Journal of Applied Physics*. 1972, 43(6):2835-2839
- 15 W. T. Tsang. 半导体光检测器. 杜宝勋, 等译. 电子工业出版社, 清华大学出版社, 1992:3-114
- 16 A. M. Moloney, A. P. Morrison. Investigation of the bandwidth of geiger-mode avalanche photodiodes. *Proceedings of SPIE*. 2005, 5825:300-309

- 17 J. J. Chang. Frequency response of PIN avalanching photodiodes. *IEEE Transactions on Electron Devices*. 1967, 14(3):139-145
- 18 R. J. McIntyre. The distribution of gains in uniformly multiplying avalanche photodiodes: Theory. *IEEE Transactions on Electron Devices*. 1972, 19(6):703-713
- 19 K. Kato. Ultrawide-band/high-frequency photodetectors. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*. 1999, 47(7):1265-1281
- 20 O. Thomas, Z. L. Yuan, J. F. Dynes, A.W. Sharpe, A. J. Shields. Efficient photon number detection with silicon avalanche photodiodes. *Applied Physics Letters*. 2010, 97(3):031102
- 21 韦啸, 杨涛, 彭承志, 蔡文奇. 恒温控制下的硅雪崩光电二极管单光子探测器的研制, *核电子学与探测技术*, 2006,26(6):1013-1016
- 22 D. G. ESAEV, S. G. MATSIK, M. B. M. RINZAN, A. G. U. PERERA, H. C. LIU, Z. R. WASILEWSKI, M. BUCHANAN. Resonant cavity enhanced GaAs/AlGaAs IR detectors. *Quantum Sensing: Evolution and Revolution from Past to Future*. 2003, 4999:467-477
- 23 N. QUACK, P. RUST, S. BLUNIER, J. DUAL, F. FELDER, M. RAHIM, M. FILL, M. ARNOLD, H. ZOGG. A comb drive actuated vertically moving micromirror for tunable mid-infrared Resonant Cavity Enhanced Detectors. *Microelectronic Engineering*. 2009, 86(4-6):1243-1246
- 24 I. W. KWON, D. S. KIM, W. Y. KIM, C. H. HWANG, H. C. LEE. Resonant cavity integrated absorber structure for capacitive infrared detectors. *Electronics Letters*. 2011, 47(8):497-499
- 25 P. CHAISAKUL, D. MARRIS-MORINI, G. ISELLA, D. CHRASTINA, M. S. ROUIFED, X. LE ROUX, S. EDMOND, E. CASSAN, J. R. COUDEVILLE, L. VIVIEN. 10-Gb/s Ge/SiGe multiple quantum-well waveguide photodetector. *IEEE Technology Letters*. 2011, 23(20):1430-1432
- 26 L. VIVIEN, A. POLZER, D. MARRIS-MORINI, J. OSMOND, J. M. HARTMANN, P. CROZAT, E. CASSAN, C. KOPP, H. ZIMMERMANN, J. M. FEDELI. Zero-bias 40Gbit/s germanium waveguide photodetector on silicon. *Optics Express*. 2012, 20(2):1096-1101
- 27 J. ZHANG, A. M. K. FOUFRAY, P. D. COTT, R. FARRELL, K. SHAH, C. S. LEVIN. Performance characterization of a novel thin position-sensitive avalanche photodiode for 1 mm resolution positron emission tomography. *IEEE Transactions on Nuclear Science*. 2007, 54(3):415-421
- 28 F. KOCAK, I. TAPAN. PbWO₄ Cherenkov light contribution to Hamamatsu S8148 and zinc sulfide silicon avalanche photodiodes signals. *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section A*. 2010, 617(1-3):398-399
- 29 M. S. OH, H. J. KONG, T. H. KIM, S. E. JO. Autofocus technique for three-dimensional imaging, direct-detection laser radar using Geiger-mode avalanche photodiode focal-plane array. *Optics Letters*. 2010, 35(24):4214-4216
- 30 A. GOETZBERGER, B. McDONALD, R. H. HAITZ, R. M. SCARLETT. Avalanche effects in silicon p-n junctions.II. structurally perfect junctions. *Journal of Applied Physics*. 1962, 34(6):1591-1600
- 31 R. H. HAITZ. Model for the electrical behavior of a microplasma. *Journal of Applied Physics*. 1964, 35(5):1370-1376
- 32 P. P. WEBB, R. J. MCINTYRE, J. CONRADI. Properties of avalanche photodiodes. *RCA Review*.

- 1974, 35(2):234-278
- 33 J. P. Gordon, R. E. Nahory, M. A. Pollack, J. M. Worlock. Low-noise multistage avalanche photodetector. *Electronics Letters*. 1979, 15(17):518-519
- 34 K. Nishida, K. Taguchi, Y. Matsumoto. InGaAsP heterostructure avalanche photodiodes with high avalanche gain. *Applied Physics Letters*. 1979, 35(3):251-253
- 35 S. L. Chuang, K. Hess. Impact ionization across the conduction band edge discontinuity of quantum-well heterostructures. *Journal of Applied Physics*. 1986, 59(8):2885-2894
- 36 T. Kagawa, H. Iwamura, O. Mlkami. Dependence of the GaAs/AlGaAs superlattice ionization rate on Al content. *Applied Physics Letters*. 1989, 54(1):33-35
- 37 B. F. Levine, K. K. Choi, C. G. Bethea, J. Walker, R. J. Malik. Quantum well avalanche multiplication initiated by 10 μm intersubband absorption and photoexcited tunneling. *Applied Physics Letters*. 1987, 51(12):934-936
- 38 M. Toivonen, M. Jalonen, A. Salokatve, M. Pessa. Unipolar avalanche multiplication phenomenon in multiquantum well structures. *Applied Physics Letters*. 1993, 62(14):1664-1666
- 39 A. N. Otte, J. Barral, B. Dolgoshein, J. Hose, S. Klemen, E. Lorenz, R. Mirzoyan, E. Popova, M. Teshim. A test of silicon photomultipliers as readout for PET. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*. 2005, 545(3):705-715
- 40 H. D. Liu, X. G. Zheng, Q. G. Zhou, X. G. Bai, D. C. McIntosh, J. C. Campbell. Double mesa sidewall silicon carbide avalanche photodiode, *IEEE Journal of quantum electronics*. 2009, 45(12):1524-1528
- 41 J. R. Chelikowsky, M. L. Cohen. Nonlocal pseudopotential calculations for electronic -structure of 11 diamond and zincblende semiconductors. *Physical Review B*. 1976, 14(2):556-582
- 42 C. A. Lee, R. A. Logan, R. L. Batdorf, J. J. Keimack, W. Wiegmann. Ionization rates of holes and electrons in silicon. *Physical Review*. 1964, 134(3A):A761-A773
- 43 R. J. McIntyre. Multiplication noise in uniform avalanche diodes. *IEEE Transactions on Electron Devices*. 1966, 12(1):164-168
- 44 F. Capasso, W. T. Tsang, G. F. Williams. Staircase solid-state photomultipliers and avalanche photodiodes with enhanced ionization rates ratio. *IEEE Transactions on Electron Devices*. 1983, 30(4):381-390
- 45 S. L. Chuang. *Physics of optoelectronic devices*. John Wiley. New York. 1995:604-612
- 46 L. W. Cook, G. E. Bulman, G. E. Stillman. Electron and hole impact ionization coefficients in InP determined by photomultiplication measurements. *Applied Physics Letters*. 1982, 40(7):589-591
- 47 K. Nishida, K. Ishii, K. Minemura, K. Taguchi. Double epitaxial silicon avalanche photodiodes for optical-fibre communications. *Electronics Letters*. 1977, 13(10):280-281
- 48 T. Kaneda, S. Kagawa, T. Yamaoka, H. Nishi, T. Inada. Low-noise avalanche photo-diodes by

- channeling of 800-keV boron into (110) silicon. *Journal of Applied Physics*. 1978, 49(12):6199-6200
- 49 K. Bløtekjær. Transport equations for electrons in two-valley semiconductors. *IEEE Transaction on Electron Devices*. 1970, 17(1):38-47
- 50 Synopsys Corporation. ISE TCAD Release 9.5 User Manual. Zurich:ISE Integrated Systems Engineering AG,1995-2003
- 51 L. A. Donohue, J. Hopkins, R. Barnett, A. Newton, A. Barker. Developments in Si and SiO₂ etching for MEMS based optical applications. *Proceedings of SPIE* 2004, 5347:44-53
- 52 R. J. Shul, L. Zhang, A. G. Baca, C. G. Willison, J. Han, S. J. Pearton, F. Ren. Inductively coupled plasma-induced etch damage of GaN p-n junctions. *Journal of Vacuum Science and Technology A*. 2000, 18(4):1139-1143
- 53 F. A. Khan, L. Zhou, V. Kumar, I. Adesida. Low-damage etching of silicon carbide in Cl₂-based plasmas, *Journal of the Electrochemical Society*. 2002, 149(7):G420-G423
- 54 E. A. Ogryzlo, D. E. Ibbotson, D. L. Flamm, J. A. Mucha, Doping and crystallographic effects in Cl-atom etching of silicon, *Journal of Applied Physics*. 1990, 67(6):3115-3120
- 55 D. L. Flamm. Mechanisms of silicon etching in fluorine-containing and chlorine containing plasmas, *Pure and Applied Chemistry*. 1990, 62(9):1709-1720
- 56 R. J. Hoekstra, M. J. Grapperhaus, M. J. Kushner. Integrated plasma equipment model for polysilicon etch profiles in an inductively coupled plasma reactor with subwafer and superwafer topography, *Journal of Vacuum Science and Technology A*. 1997, 15(4):1913-1921
- 57 C. C. Cheng, K. V. Guinn, V. M. Donnelly, I. P. Herman, In-situ pulsed laser-induced thermal-desorption studies of the silicon chloride surface-layer during silicon etching in high-density plasmas of Cl₂ and Cl₂/O₂ mixtures, *Journal of Vacuum Science and Technology A*. 1994, 12(5):2630-2640
- 58 L. D. Jiang, N. Plank, M. A. Blauw, R. Cheung, E. van der Drift, Dry etching of SiC in inductively coupled Cl₂/Ar plasma, *Journal of Physics D-Applied Physics*. 2004, 37(13):1809-1814
- 59 M. A. Lieberman, A. J. Lichtenberg. 等离子体放电原理与材料处理. 蒲以康, 等译. 科学出版社, 2007:453-465
- 60 J. P. Chang, H. H. Sawin, Kinetic study of low energy ion-enhanced polysilicon etching using Cl, Cl₂, and Cl⁺ beam scattering, *Journal of Vacuum Science and Technology A*. 1997, 15(3):610-615
- 61 S. L. Wu, C. H. Lee, S. J. Chang, Y. M. Lin, Inductively coupled plasma etching of Si_{1-x}Ge_x in CF₄/Ar and Cl₂/Ar discharges, *Journal of Vacuum Science and Technology A*. 2006, 24(3):728-731
- 62 U. Gerlachmeyer, Ion enhanced gas-surface reactions-A kinetic-model for the etching mechanism, *Surface Science*. 1981, 103(2-3):524-534

- 63 J. Y. Choe, I. P. Herman, V. M. Donnelly, Laser-induced thermal desorption analysis of the surface during Ge etching in a Cl_2 inductively coupled plasma, *Journal of Vacuum Science and Technology A*. 1998, 16(6):3266-3273
- 64 C. Steinbrüchel, Universal energy-dependence of physical and ion-enhanced chemical etch yields at low ion energy, *Applied Physics Letters*. 1989, 55(19):1960-1962
- 65 E. Zhimov, S. Stepanov, A. Gott, W. N. Wang, Y. G. Shreter, D. V. Tarkhin, N. I. Bochkareva, ICP etching of III-nitride based laser structure with Cl_2 -Ar plasma assisted by Si coverplate material, *Journal of Vacuum Science and Technology A*. 2005, 23(4):687-692
- 66 R. J. Hoekstra, M. J. Kushner, V. Sukharev, P. Schoenborn, Microtrenching resulting from specular reflection during chlorine etching of silicon, *Journal of Vacuum Science and Technology B*. 1998, 16(4):2102-2104
- 67 E. S. Aydil, B. Quiniou, J. Lee, J. A. Gregus, R. A. Gottscho, Incidence angle distributions of ions bombarding grounded surfaces in high density plasma reactors, *Solid-State Electronics*. 1998, 42(5):A75-A82
- 68 O. Joubert, P. Czuprynski, F. H. Bell, P. Berruyer, R. Blanc, Analyses of the chemical topography of silicon dioxide contact holes etched in a high density plasma source, *Journal of Vacuum Science and Technology B*. 1997, 15(3):629-639
- 69 Y. J. Lee, S. W. Hwang, G. Y. Yeom, J. W. Lee, J. Y. Lee, Etch-induced damage in single crystal Si trench etching by planar inductively coupled Cl_2/N_2 and Cl_2/HBr plasmas, *Thin Solid Films*. 1999, 341(1-2):168-171
- 70 Q. D. Duanmu, A. P. Zhang, G. Z. Wang, Y. J. Gao, Y. Li, D. L. Jiang, L. C. Fu, J. Q. Tian. Silicon micro-hole array prepared by ICP. *MEMS/MOEMS Technologies and Applications II*. 2004, 5641:344-347
- 71 檀柏梅, 刘玉岭. ULSI 多层布线中 SiO_2 介质 CMP 技术. *电子器件*. 2001, 24(2):101-106
- 72 P. R. Dandu Veera, S. Peddeti, S. V. Babu. Selective chemical mechanical polishing of silicon dioxide over silicon nitride for shallow trench isolation using ceria slurries. *Journal of the Electrochemical Society*. 2009, 156(12):H936-H943
- 73 L. Pelaz, L. A. Marques, J. Barbolla. Ion-beam-induced amorphization and recrystallization in silicon. *Journal of Applied Physics*. 2004, 96(11):5947-5976
- 74 张通和, 吴瑜光, 赵寿南, 祝忠华. 砷离子注入硅的快速热退火对晶格应力和 PN 结漏电流的影响. *自然科学进展—国家重点实验室通讯*. 1993, (4):363-368
- 75 唐晋发, 郑权. *应用薄膜光学*. 海科学技术出版社, 1984:39-56
- 76 D. J. Poxson, M. F. Schubert, F. W. Mont, E. F. Schubert, J. K. Kim. Broadband omnidirectional antireflection coatings optimized by genetic algorithm. *Optics Letters*. 2009, 34(6):728-730
- 77 Y. J. Chang, Y. T. Chen. Broadband omnidirectional antireflection coatings for metal-backed solar cells optimized using simulated annealing algorithm incorporated with solar spectrum. *Optics Express*. 2011, 19(14):A875-A887

- 78 P. G. Verly, J. A. Dobrowolski, R. R. Willey. Fourier-transform method for the design of wideband antireflection coatings. *Applied Optics*. 1992, 31(19):3836-3846
- 79 U. Schulz, P. Munzert, R. Leitel, I. Wendling, N. Kaiser, A. Tünnermann. Antireflection of transparent polymers by advanced plasma etching procedures. *Optics Express*. 2007, 15(20):13108-13111
- 80 U. Schulz. Wideband antireflection coatings by combining interference multilayers with structured top layers. *Optics Express*. 2009, 17(11):8704-8708
- 81 李士勇, 陈永强, 李研. 蚁群算法及其应用. 哈尔滨工业大学出版社, 2004:1-34
- 82 S. Goss, S. Aron, J. L. Deneubourg, J. M. Pasteels. Self-organized shortcuts in the argentine ant. *Naturwissenschaften*. 1989, 76(12):579-581
- 83 M. Dorigo, V. Maniezzo, A. Colomi. Ant System: Optimization by a colony of cooperating agents. *IEEE Transactions on systems man and cybernetics part B*. 1996, 26(1):29-41
- 84 M. Dorigo, L. M. Gambardella. Ant colonies for the traveling salesman problem. *Biosystems*. 1997, 43(2):73-81
- 85 O. P. Verma, P. Kumar, M. Hanmandlu, S. Chhabra. High dynamic range optimal fuzzy color image enhancement using Artificial Ant Colony System. *Applied Soft Computing*. 2012, 12(1):394-404
- 86 S. N. Kuan, H. L. Ong, K. M. Ng. Solving the feeder bus network design problem by genetic algorithms and ant colony optimization. *Advances in Engineering Software*. 2006, 37(6):351-359
- 87 M. Dorigo, G. Di Caro, L.M. Gambardella. Ant algorithms for discrete optimization. *Artificial life*. 1999, 5(3):137-172
- 88 N. Wang, Y. Zhu, W. Wei, J. J. Chen, P. Li, Y. M. Wen. Conversion efficiency enhanced photovoltaic device with nanohole arrays in antireflection coating layer. *Optics Communications*. 2011, 284(19):4773-4777
- 89 C. H. Sun, W. L. Min, N. C. Linn, P. Jiang, B. Jiang. Templated fabrication of large area subwavelength antireflection gratings on silicon. *Applied Physics Letters*. 2007, 91(23):231105
- 90 S. Wang, X. Z. Yu, H. T. Fan. Simple lithographic approach for subwavelength structure antireflection. *Applied Physics Letters*. 2007, 91(6):061105
- 91 E. Osorio, R. Urteaga, L. N. Acquaroli, G. García-Salgado, H. Juaréz, R. R. Koropecski. Optimization of porous silicon multilayer as antireflection coatings for solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*. 2011, 95(11):3069-3073
- 92 Y. H. Wang, R. Tummala, L. Chen, L. Q. Guo, W. D. Zhou, M. Tao. Solution-processed omnidirectional antireflection coatings on amorphous silicon solar cells. *Journal of Applied Physics*. 2009, 105(10):103501
- 93 M. F. Schubert, F. W. Mont, S. Chhajed, D. J. Poxson, J. K. Kim, E. F. Schubert. Design of multilayer antireflection coatings made from co-sputtered and low-refractive-index materials

- by genetic algorithm. *Optics Express*. 2008, 16(8):5290-5298
- 94 徐江峰, 陈秋灵. 增透膜的遗传算法设计, *中国激光*. 2007, 34(9):1271-1275
- 95 S. Chhajed, M. F. Schubert, J. K. Kim, E. F. Schubert. Nanostructured multilayer graded-index antireflection coating for Si solar cells with broadband and omnidirectional characteristics. *Applied Physics Letters*. 2008, 93(25):251108
- 96 肖雪芳, 杨国华, 归强, 王国宏, 马晓宇, 陈朝, 陈良惠. InGaAs/InP APD 探测器光电特性检测. *电子科技大学学报*. 2008. 37(3):460-463

攻读硕士学位期间发表的学术论文

- 1 郭帅, 周弘毅, 陈树华, 郭霞. Cl_2/Ar 感应耦合等离子体刻蚀 Si 工艺研究. 电子科技. 2012, 25(9) (已录用)
- 2 X. J. Ren, B. L. Guan, S. Guo, S. Li, C. C. Li, C. X. Hao, H. Y. Zhou, X. Guo. Tunable Vertical-Cavity Surface-Emitting Lasers Integrated with Two Wafers. Chinese Physics Letters. 2011, 28(2):024213
- 3 关宝璐, 张敬兰, 任秀娟, 郭帅, 李硕, 揣东旭, 郭霞, 沈光地. 具有宽调谐范围的微纳光机电系统可调谐垂直腔面发射激光器研究. 物理学报. 2011, 60(3): 034206
- 4 关宝璐, 郭霞, 张敬兰, 任秀娟, 郭帅, 李硕, 揣东旭, 沈光地. 双波长垂直腔面发射激光器及特性研究. 物理学报. 2011, 60(1):014209
- 5 郝聪霞, 郭霞, 关宝璐, 郭帅, 李硕, 苏治平. Au 纳米颗粒的形状和尺寸对表面等离子体的影响. 半导体光电. 2012, 33 (已录用)
- 6 郭霞, 关宝璐, 周弘毅, 郭帅, 陈树华. 一种高增益雪崩二极管. 发明专利 (公开号: CN102214724A)
- 7 关宝璐, 郭霞, 张敬兰, 任秀娟, 郭帅, 李硕, 沈光地. 基于一维光子晶体的多波长垂直腔面发射激光器及制备方法. 发明专利 (公开号: CN101764354A)
- 8 郭霞, 关宝璐, 李川川, 郝聪霞, 任秀娟, 李硕, 郭帅, 周弘毅, 史国柱, 周治平, 陈树华. 一种高反射低电压的倒装发光二极管及其制备方法. 发明专利 (公开号: CN101997070A)
- 9 关宝璐, 任秀娟, 李硕, 史国柱, 李川川, 郝聪霞, 郭帅, 周弘毅, 郭霞. 双片集成可调谐垂直腔面发射激光器结构及制备方法. 发明专利 (已过初审 申请号: 201010616548.0)

致 谢

本论文是在导师郭霞教授的悉心指导下完成的，在此表示衷心的感谢。郭老师渊博的知识、扎实的理论功底、敏锐的科学洞察力、严谨的治学态度对我影响深远。在三年的研究生学习中，无论是在学习工作中还是在生活中，郭老师时刻给予我积极的影响，为我指明了未来的方向。在此向郭霞老师表示最崇高的敬意和最衷心的感谢！

特别感谢关宝璐老师在课题上给予我的帮助和指导，关老师对工作的认真态度和精益求精的精神使我受益匪浅。

特别感谢邹德恕老师、韩金茹老师、徐晨老师、李建军老师、韩军老师、邓军老师、郭伟玲老师、崔碧峰老师、朱彦旭老师、邢艳辉老师、董欣老师、刘莹老师、高志远老师在我理论课程学习、器件工艺制备期间给予的指导和帮助。

特别感谢光电子器件研究实验室的张敬兰、揣东旭、任秀娟、李川川、李硕、郝聪霞、周弘毅、史国柱、陈树华、苏治平等同学的帮助。

特别感谢范修军博士对我在论文写作中的指点和帮助，使我受益匪浅。

特别感谢实验室的付丹、李清、尹龙、吴文荣、刘娜、李惠敏、张晓佳、刘蒙、陆红等在工作和实验中给予的支持和帮助，使我的工作得以顺利进行。

特别感谢蒋文静师姐在实验上给予的指导和帮助；感谢我的同学毛明明，在论文完成过程中与他许多有益的讨论给了我很大的启发和帮助。

特别感谢我的家人对我无微不至的关心、照顾和鼓励，是他们给我勇气和信心，支持我在求学科研道路上勇往直前。

最后，感谢国家自然科学基金委员会、教育部和北京市留学人员科技活动择优资助项目对于本论文工作的支持。