

## ДИФФУЗИЯ ПРИМЕСИ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ ПРИ ИМПУЛЬСНОМ ЛАЗЕРНОМ ОТЖИТЕ

Воронков В. П., Гурченок Г. А.

Показано, что характерное для импульсного лазерного нагрева неоднородное по объему и времени распределение температурного поля в кристалле приводит к существенному отличию процесса диффузии примеси в полупроводнике от изотермического. Сформулировано уравнение диффузии с учетом дополнительных потоков примеси за счет градиента температуры и термоупругого взаимодействия примеси с решеткой кристалла. Расчет основывался на численном решении системы взаимосвязанных уравнений теплопроводности и диффузии. Приведены распределения примеси, температуры, градиента температуры и скорости диффузии в приповерхностном слое. Показано, что в условиях лазерного нагрева, например, равномерное распределение примеси трансформируется в слоистое, а поверхность кристалла обогащается или обедняется примесью в зависимости от соотношения элементарных объемов атомов примеси и основного вещества.

В настоящее время имеется ряд экспериментальных работ, в которых указывается на особенности твердофазовой диффузии примесных атомов в полупроводниках при импульсном лазерном отжиге [<sup>1-4</sup>]. Отмечается, что коэффициенты диффузии примесных атомов при импульсном отжиге возрастают на 4–10 порядков по сравнению с изотермическим отжигом. Атомы различных примесей при этом диффундируют в глубь кристалла или к отжигаемой поверхности [<sup>4-6</sup>]. Обращает на себя внимание тот факт, что имеются некоторые общие закономерности в диффузии примеси при лазерном отжиге и импульсном механическом нагружении [<sup>7</sup>]. Полученные экспериментальные данные пока не находят адекватного объяснения.

В связи с этим в предлагаемой работе ставилась цель — рассмотреть влияние импульсных тепловых и механических воздействий, сопровождающих лазерный отжиг, на диффузию примеси в полупроводнике.

Доминирующим эффектом при действии импульсного лазерного отжига является неоднородный по объему и по времени нагрев кристалла. Диффузионные процессы перераспределения примесей происходят в условиях огромных температурных градиентов и термоупругих напряжений, сопровождающих неоднородный нагрев. При неоднородном нагреве в твердом теле возникают потоки фононов, направленные из горячих мест в холодные, которые увлекают атомы примеси. В этом случае выражение для силы, действующей на атом примеси в полупроводнике, можно записать в виде [<sup>8</sup>]

$$\mathbf{F}_T = -\frac{1}{s} \Omega_0 C \langle \sigma_0 / \sigma_I \rangle \nabla T, \quad (1)$$

где  $T$  — температура,  $C$  — теплоемкость кристалла,  $\langle \sigma_0 / \sigma_I \rangle$  — усредненное отношение сечений рассеяния фононов атомами кристалла и примеси,  $\Omega_0$  — элементарный объем атома основного вещества,  $\Omega_I$  — элементарный объем атома примеси,  $\nabla$  — оператор Пуассона.

Движение примесных атомов в поле термоупругих напряжений можно описать, приняв атом примеси за центр дилатации. Согласно модели центра дилатации [<sup>9</sup>], поле упругих деформаций действует на примесный атом силой

$$\mathbf{F}_G = \frac{2(1+\nu)}{3(1-2\nu)} G (\Omega_I - \Omega_0) \Delta \mathbf{u}, \quad (2)$$

где  $\nu$  — коэффициент Пуассона,  $G$  — модуль сдвига,  $u$  — вектор поля смещений,  $\Delta$  — оператор Лапласса.

Используя квазистационарную запись уравнения термоупругости, функцию  $\Delta u$  можно представить в виде

$$\Delta u = \frac{2(1-\nu)}{1-2\nu} \nabla (\alpha_T T), \quad (3)$$

где  $\alpha_T$  — коэффициент линейного термического расширения кристалла.

Суммируя силы (1), (2) и используя соотношение Эйнштейна для подвижности, можно записать выражение для скорости движения примесного атома в полях градиента температур и термоупругих напряжений

$$v = \frac{D}{kT} (F_T + F_G), \quad (4)$$

где  $D$  — коэффициент диффузии,  $k$  — постоянная Больцмана. Соответствующий примесный поток равен

$$J = NV, \quad (5)$$

где  $N$  — концентрация атомов примеси. Направление потока  $J$  зависит от соотношения сил  $F_T$  и  $F_G$ . Для  $F_T > F_G$  направление потока примеси противоположно направлению градиента температуры. В том случае, когда  $F_T < F_G$ , направление потока зависит от знака разности  $\Omega_1 - \Omega_0$ . Если  $\Omega_1 > \Omega_0$ , то направление потока примеси совпадает с направлением градиента температуры и примесь переносится из холодных мест в горячие. При  $\Omega_1 < \Omega_0$  направление потока примеси обратно направлению градиента температур и примесь диффундирует из горячих мест в холодные.

Примесный поток (5) обуславливает появление дополнительного члена в уравнении диффузии

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \nabla (D \nabla N) + \frac{DN}{kT} (F_T + F_G), \quad (6)$$

которое должно решаться совместно с уравнением теплопроводности

$$C \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla (K \nabla T) + Q, \quad (7)$$

где  $K$  — коэффициент теплопроводности кристалла,  $Q$  — удельная тепловая мощность, выделяемая при поглощении лазерного излучения:

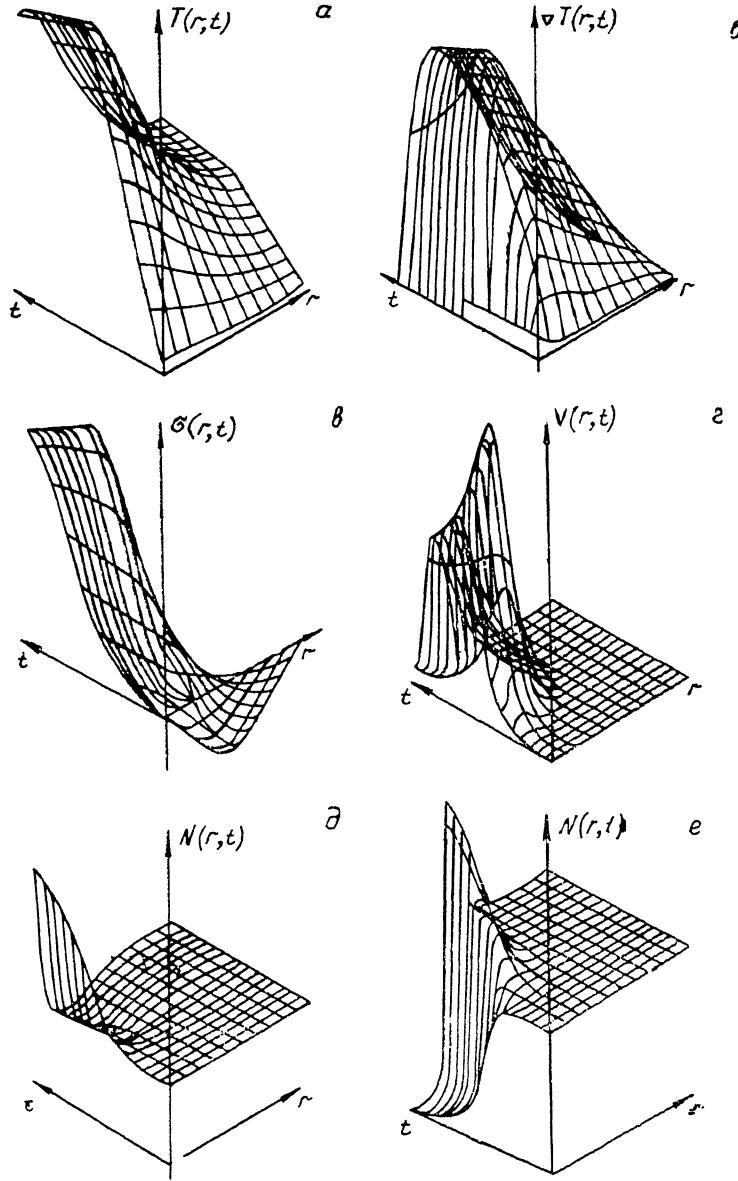
$$Q = (1 - R) P \alpha \exp(-\alpha r)$$

( $P$ ,  $R$  и  $\alpha$  — плотность мощности, коэффициенты отражения и поглощения лазерного излучения в полупроводнике).

Система уравнений (6), (7) решалась для случая нагрева лазерным излучением полуограниченного кристалла арсенида галлия, однородно легированного медью или теллуром. При решении пренебрегали процессами теплопередачи и радиофизики примеси с поверхности полупроводника и полагали отсутствие стоков для примеси в объеме полупроводника. Использовались данные работ [10, 11] о нелинейных зависимостях от температуры тепловых, упругих и оптических характеристик арсенида галлия. Численное решение системы уравнений (6), (7) проводилось методом сеток с использованием неявной схемы счета [12]. Расчет проведен для лазерного импульса длительностью  $5 \cdot 10^{-6}$  с и энергии 0.9 Дж/см<sup>2</sup>.

На рисунке,  $a$  приведено рассчитанное тепловое поле, возникающее в кристалле при действии лазерного импульса. Наиболее высокая температура развивается на поверхности кристалла, тогда как максимум градиента температуры несколько смещен от поверхности в глубь кристалла (б). Максимальное значение  $\nabla T \sim 10^5$  К/см. В соответствии с градиентом температуры возникают термоупругие напряжения (в), величина которых приближается к пределу прочности кристалла. Как видно из рисунка, происходит смена знака упругих напряжений в объеме кристалла. Скорость переноса атомов меди в полях термо-

упругих напряжений достигает значений  $V \simeq 180$  см/с (?), что намного превышает скорость переноса в обычных условиях изотермического отжига. Максимум в распределении по скоростям атомов примеси соответствует максимальному значению термоупругих напряжений и градиента температуры.



Координатно-временное распределение функций, характеризующих процесс импульсного лазерного нагрева.

*a* — температура  $T$ , *б* — градиент температуры  $\nabla T$ , *в* — термоупругие напряжения, *г* — скорость диффузии атомов меди, *д* — распределение атомов теллура в поверхностном слое GaAs, *е* — распределение атомов меди в поверхностном слое GaAs.

Результаты расчета распределения атомов примеси под действием импульса лазерного излучения приведены на рисунке, *д*, *е*.

Расчеты показывают, что при используемых параметрах импульса лазерного излучения доминирующей силой, действующей на примесный атом, является  $F_{\text{т}}$ , следовательно, направление движения атомов примеси зависит от соотношения элементарных объемов  $\Omega_1$  и  $\Omega_0$ . На рисунке, *д* показана трансформация однородного распределения в арсениде галлия теллура. Так как  $\Omega_{\text{Te}} > > \Omega_{\text{As}}$ , теллур диффундирует к поверхности, образуя высоколегированный

поверхностный слой. Более глубокая область кристалла при этом обедняется примесью. Для меди  $\Omega_{\text{Cu}} < \Omega_{\text{Ga}}$ , наоборот, максимум распределения примесных атомов сдвинут в глубь кристалла и поверхность обедняется примесью (см. рисунок, е).

Таким образом, особенности поведения примеси в полупроводнике при импульсном лазерном нагреве — аномальные профили и коэффициенты диффузии — могут быть объяснены возникновением потоков примеси за счет больших градиентов температуры и термоупругого взаимодействия примеси с решеткой кристалла.

#### Список литературы

- [1] Фистуль В. И., Павлов А. М. // ФТП. 1983. Т. 17. В. 5. С. 854—858.
- [2] Горин Е. А. // ФТП. 1984. Т. 18. В. 9. С. 1696—1698.
- [3] Стрекалов В. Н. // ФТП. 1986. Т. 20. В. 2. С. 361—363.
- [4] Двуреченский А. В., Качурин Г. А., Низаев Е. В., Смирнов Л. С. Импульсный отжиг полупроводниковых материалов. М., 1982. 208 с.
- [5] Damgaard S., Oron M., Petersen J. W., Peterikin Y. V., Weyev G. // Phys. St. Sol. 1980. V. A59. N 1. P. 63—67.
- [6] Киян С. Г., Кречун В., Маненков А. А. и др. // ФТП. 1989. Т. 23. В. 3. С. 421—424.
- [7] Ларionов Л. Н. // ДАН СССР. 1975. Т. 21. В. 5. С. 1073—1075.
- [8] Фикс В. Б. Ионная проводимость в металлах и полупроводниках. М., 1969. 269 с.
- [9] Эшлеби Д. Д. Континуальная теория дислокаций. М., 1963. 295 с.
- [10] Барабановский П. И., Ключков В. П., Потыкевич И. В. Полупроводниковая электроника. Справочник. Киев, 1975. 703 с.
- [11] Акустические кристаллы. Справочник / Под ред. М. Шаскольской. М., 1982. 632 с.
- [12] Беляев И. М., Рядно А. А. Методы теории теплопроводности. Ч. II. М., 1982. 327 с.

Сибирский физико-технический институт  
им. В. Д. Кузнецова при ТГУ  
Томск

Получена 14.02.1990  
Принята к печати 21.06.1990