

05:06;11

Моделирование фазовых переходов, инициируемых в арсениде галлия комбинированным воздействием лазерного излучения

© С.П. Жвавий, Г.Д. Ивлев, О.Л. Садовская

Институт электроники АН Белоруссии,
220090 Минск, Белоруссия

(Поступило в Редакцию 17 января 2000 г.)

Проведено численное моделирование фазовых переходов в арсениде галлия при комбинированном лазерном воздействии наносекундного импульса, инициирующего плавление, и дополнительного излучения неодимового лазера, позволяющего управлять скоростью движения границы раздела фаз. Показано, что при встречной геометрии воздействующих потоков лазерного излучения из-за сильной температурной зависимости коэффициент поглощения на длине волны $1.06 \mu\text{m}$ на межфазной границе возникает волна прогрева, которая затем отрывается от фронта плавления и, распространяясь навстречу излучению неодимового лазера, экранирует расплав. В случае попутной геометрии воздействия могут существовать режимы, при которых временная зависимость глубины распространения расплава имеет немонотонный характер.

Одним из основных параметров, характеризующих процессы модификации структуры тонких слоев полупроводниковых материалов при их нагреве и плавлении наносекундным воздействием лазерного излучения, является скорость движения V границы раздела твердой и жидкой фаз на стадии эпитаксиальной кристаллизации. От величины V , например, зависит неравновесный коэффициент распределения примесных атомов на межфазной границе и предельно достижимая концентрация электрически активной примеси в кристаллизованной области [1], а также концентрация в ней точечных дефектов. Поэтому контролируемым изменением скорости кристаллизации можно управлять свойствами лазерно-модифицированных полупроводниковых слоев. Варьирование начальной температуры подложки было первым методом регулирования V [2]. Расчеты показывают [3], что предварительный нагрев подложки кремния до 1000°C позволяет более чем в 10 раз замедлить процесс кристаллизации слоя, расплавленного наносекундным лазерным нагревом. Однако высокотемпературная выдержка полупроводникового кристалла по ряду практических соображений нежелательна, в частности, из-за возможности ухудшения его электрофизических параметров.

Другой метод управления величиной V — комбинированный лазерный нагрев [4–8], когда наносекундным импульсом производят плавление субмикронного слоя, а скорость его кристаллизации определяется интенсивностью дополнительного облучения при "попутной" [4,5] или "встречной" [6–8] геометрии воздействия лазерных пучков. Применительно к этой ситуации в работе [7] выполнено аналитическое решение задачи Стефана для GaAs. В аналитическом решении, однако, весьма проблематично и практически невозможно учесть существенные температурные зависимости некоторых физических параметров монокристаллического GaAs, в частности весьма сильную зависимость $\alpha(T)$ — коэффициента поглощения дополнительного лазерного излучения с $\lambda = 1.06 \mu\text{m}$.

Целью данной работы является численное моделирование фазовых переходов, происходящих в GaAs при комбинированном воздействии лазерных пучков. В работе рассматривается возможность управления скоростью движения межфазной границы при воздействии на арсенид галлия импульса рубинового лазера ($\tau = 70 \text{ ns}$, $h\nu > E_g$, где E_g — ширина запрещенной зоны GaAs), вызывающего нагрев и плавление приповерхностного слоя, и излучения неодимового лазера ($h\nu < E_g$), влияющего на температурное поле в полупроводнике и, следовательно, на скорость V .

Моделирование процессов плавления и рекристаллизации проводилось методом конечных разностей. Использовалось одномерное приближение, в соответствии с которым изменение температуры арсенида галлия описывается уравнением теплопроводности

$$\rho(T)[c(T) + L_m \delta(T - T_m)] \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[k(x) \frac{\partial T}{\partial x} \right] + S(x, t) \quad (1)$$

с граничными и начальными условиями

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=h} = 0, \quad T(x, t=0) = T_0,$$

где ρ — плотность, c — удельная теплоемкость, k — коэффициент теплопроводности, L_m — скрытая теплота плавления, T_m — температура плавления, T_0 — начальная температура, h — толщина пластины полупроводника, $\delta(x)$ — дельта-функция.

Тепловой источник $S(x, t) = S_R(x, t) + S_N(x, t)$ описывает выделение тепла при поглощении излучения рубинового лазера

$$S_R(x, t) = (1 - R)\alpha(x, t) \frac{W}{\tau_i} \exp\left(-\int_0^x \alpha(z, t) dz\right) \quad (2)$$

и неодимового

$$S_N(x, t) = (1 - R)\alpha(x, t) I_0 \exp\left(-\int_0^x \alpha(z, t) dz\right) \quad (3')$$

Значения параметров GaAs, используемых при решении задачи [9]

Параметры	Кристаллический GaAs	Расплавленный GaAs
ρ , g/cm ³	5.317	5.317
c , J/g · K	$0.303 + 5.0 \cdot 10^{-5} T$	0.379
L_m , J/g	730 [10]	
k , W/cm · K	$\frac{2271}{T^{1.463}}$	0.178 [10]
$E_g(T)$, eV	$1.575 - 5.0 \cdot 10^{-4} T$	
$\lambda = 1.06 \mu\text{m}$		
R	0.30	0.64
α , cm ⁻¹	$10 \exp[149(-0.36 + 0.5 \cdot 10^{-3} T)],$ $T < 812 \text{ K}$ $2.91 \cdot 10^4 \exp[3.22(-0.77 + 0.5 \cdot 10^{-3} T)],$ $T > 812 \text{ K}$	10^6
$\lambda = 0.69 \mu\text{m}$		
R	0.33	0.64
α , cm ⁻¹	$2.91 \cdot 10^4 \exp[3.22(-0.16 + 0.5 \cdot 10^{-3} T)],$ $T < 400 \text{ K}$ $3.48 \cdot 10^4 \exp[1.71(-0.2 + 0.5 \cdot 10^{-3} T)],$ $T > 400 \text{ K}$	10^6

в случае попутной геометрии воздействия на GaAs или

$$S_N(x, t) = (1 - R)I_0 \left\{ \alpha(x, t) \exp\left(-\int_x^h \alpha(z, t) dz\right) + \alpha(x, t)R_{sl} \exp\left(-\int_d^h \alpha(z, t) dz - \int_x^d \alpha_l(z, t) dz\right) + (1 - R_{sl})\alpha_l(x, t) \exp\left(-\int_d^h \alpha(z, t) dz - \int_x^d \alpha_l(z, t) dz\right) \right\} \quad (3'')$$

в случае встречной геометрии. Два первых члена в правой части (3'') описывают поглощение излучения неодимового лазера в кристалле, а третий — в расплаве. Здесь R и α — коэффициент отражения и поглощения; R_{sl} — коэффициент отражения на границе раздела кристалл–расплав; $d = d(x, t)$ — положение фронта плавления в момент времени t ; W и τ_i — плотность энергии и длительность импульса рубинового лазера; I_0 — интенсивность излучения неодимового лазера; индекс l относится к жидкой фазе.

Задача (1)–(3) решалась методом прогонки с применением итерационного процесса. Форма импульса рубинового лазера задавалась функцией $\sin^2(\pi t/2\tau_i)$, где $\tau_i = 70 \text{ ns}$. Толщина пластины арсенида галлия полагалась значительно большей длины тепловой диффузии за время импульса ($30 \mu\text{m}$). Значения теплофизических и оптических параметров, использованных при решении задачи, приведены в таблице.

Получены зависимости времени существования жидкой фазы τ от плотности энергии излучения рубинового

лазера при различных значениях интенсивности излучения неодимового лазера показаны на рис. 1. На графике приведены также экспериментальные данные $\tau(W)$ для двух кристаллографических ориентаций пластин GaAs

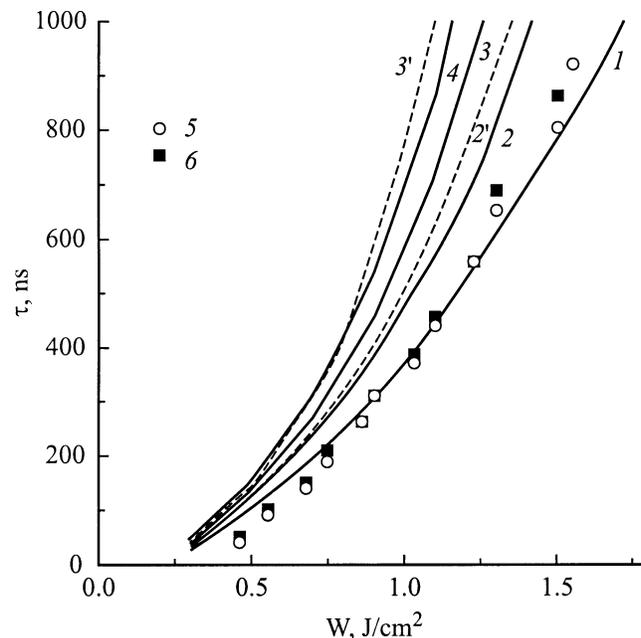


Рис. 1. Время существования расплава арсенида галлия в случае встречной (сплошная кривая) и попутной (штриховая) геометрии воздействия в зависимости от плоскости энергии излучения рубинового лазера при интенсивности излучения неодимового лазера $I_0 = 0$ (1), 300 (2), 500 (3) и 700 kW/cm² (4); 5, 6 — экспериментальные значения для ориентации (100) и (111) при $I_0 = 0$.

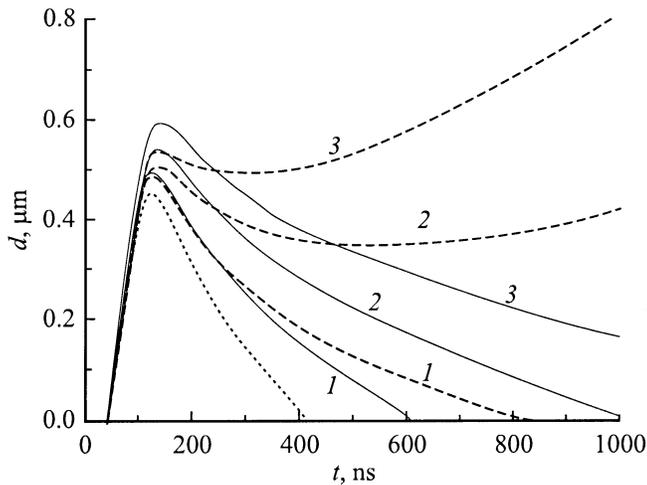


Рис. 2. Временные зависимости толщины расплавленного слоя при $W = 1 \text{ J/cm}^2$ и $I_0 = 500$ (1), 1000 (2), 1500 kW/cm^2 (3). Пунктир — $I_0 = 0$, сплошная кривая — встречная геометрия, штриховая — попутная.

(100) и (111) без дополнительной подсветки ($I_0 = 0$). Видно, что рассчитанные зависимости находятся в хорошем согласии с результатами измерений, выполненных в экспериментальных условиях [11]. Дополнительный нагрев излучением неодимового лазера приводит к заметному увеличению времени существования расплава, причем в случае попутной геометрии воздействия $\Delta\tau$ значительно больше, чем при встречной. Так, при $W = 1 \text{ J/cm}^2$ и $I_0 = 300 \text{ kW/cm}^2$ в первом варианте $\Delta\tau \approx 400 \text{ ns}$, а во втором $\Delta\tau$ составляет 190 ns. Еще более заметны количественные и качественные различия для двух вариантов комбинированного лазерного воздействия в зависимостях $d = d(t)$ (рис. 2). Из наших расчетов для встречной геометрии воздействия излучения на GaAs не следует возможности "вытягивания" фронта плавления, как предсказывалось в [7]. В связи с сильной температурной зависимостью коэффициента поглощения на длине волны $\lambda = 1.06 \text{ μm}$ (при температурах $T > 600 \text{ K}$ α очень резко увеличивается и при $T \geq 800 \text{ K}$ достигает значений $\sim 10^4 \text{ cm}^{-1}$) начинает поглощаться излучение в прогретом слое кристалла перед границей раздела расплав–кристалл. Происходит формирование волны прогрева (рис. 3, *a*, кривые 1, 2), которая "отрывается" от фронта фазового перехода и, распространяясь навстречу излучению неодимового лазера, экранирует расплав (кривые 3–5). Таким образом, замедление движения межфазной границы здесь обусловлено уменьшением температурного градиента в связи с дополнительным выделением тепла при поглощении излучения неодимового лазера.

В случае попутной геометрии воздействия лазерного излучения на арсенид галлия при достаточно больших значениях I_0 может наблюдаться немонотонное движение межфазной границы (рис. 2, кривые 2, 3). На спадающем участке зависимости $d = d(t)$ (стадия рекристаллизации) происходит формирование поля температур с

квазистационарным профилем (рис. 3, *b*, кривые 1–3), и если интенсивность дополнительного излучения оказывается достаточной для компенсации теплоотвода от границы в объем полупроводника, то процесс кристаллизации через некоторое время прекращается и развивается дальнейшее плавление (рис. 2, кривые 2, 3). При таком режиме лазерного нагрева по мере продвижения фронта плавления в глубь образца достаточно сильно возрастает температура поверхности (рис. 3, *b*, кривые 4, 5).

Таким образом, в случае встречной геометрии воздействующих лазерных излучений на GaAs из-за сильной температурной зависимости α в области края полосы собственного поглощения в монокристалле может возникать тепловая волна, экранирующая область фазовых переходов. При попутной геометрии воздействия возможна немонотонная временная зависимость глубины распространения расплава.

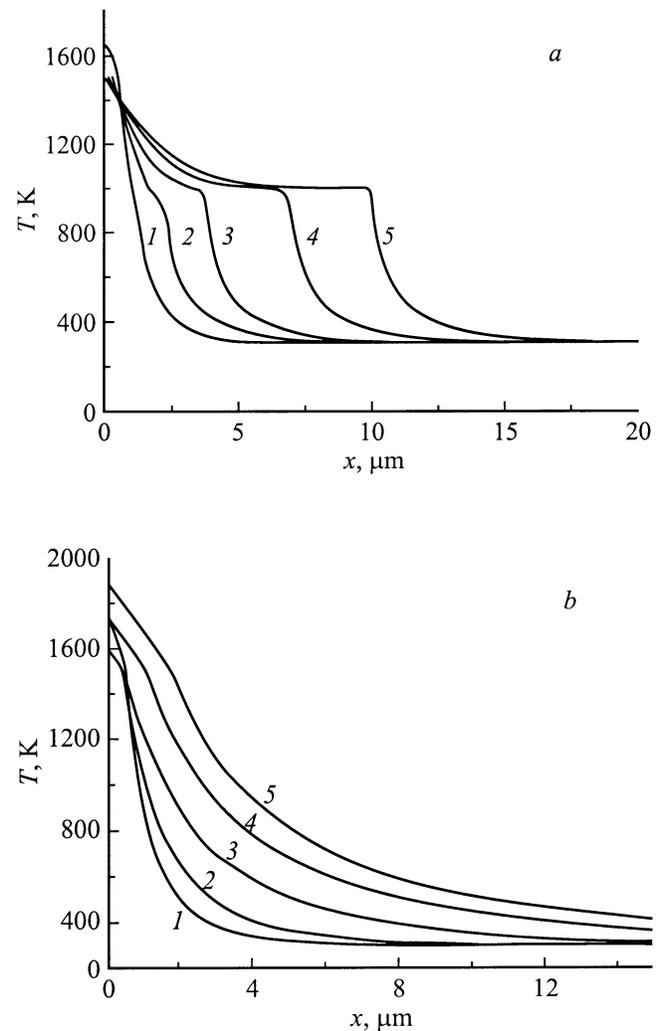


Рис. 3. Распределение температуры по глубине при встречной (*a*) геометрии лазерного воздействия: $t = 140$ (1), 290 (2), 430 (3), 730 (4) и 1015 ns (5) и при попутной (*b*): $t = 140$ (1), 290 (2), 1000 (3), 2540 (4) и 4040 ns (5). $W = 1 \text{ J/cm}^2$ и $I_0 = 1000 \text{ kW/cm}^2$.

Список литературы

- [1] Модифицирование и легирование поверхности лазерными, ионными и электронными пучками / Под ред. Дж.М. Поута, Г. Фоти, Д.К. Джекобсона. М., 1987.
- [2] *Gullis A.G., Webber H.C., Poate J.M., Simons A.L.* // *Appl. Phys. Lett.* 1980. Vol. 36. P. 320.
- [3] *Жвавый С.П., Ивлев Г.Д.* // *ИФЖ.* 1996. Т. 69. № 5. С. 790–793.
- [4] *Auston D.H., Golovchenko J.A., Venkatesan T.N.C.* // *Appl. Phys. Lett.* 1979. Vol. 34. N 9. P. 558–560.
- [5] *Громов Г.Г., Жук С.В., Руденко К.В., Уфимцев В.Б.* // *ФТП.* 1987. Т. 21. Вып. 4. С. 688–693.
- [6] *Ковальчук Ю.В., Кучинский В.И., Мячин В.Е., Соколов И.А., Скопина В.И.* // *Письма в ЖТФ.* 1984. Т. 10. Вып. 7. С. 220–227.
- [7] *Абакумов В.Н., Гуман В.Н., Юферев В.С.* *ФТП.* 1986. Т. 20. Вып. 12. С. 2178–2182.
- [8] *Арутюнов Е.Н., Беляков Л.В., Васильев А.Н.* и др. // *ЖТФ.* 1985. Т. 55. Вып. 11. С. 2144–2148.
- [9] *Meyer J.R., Kruer M.R., Bartoli F.T.* // *J. Appl. Phys.* 1980. Vol. 51. N 3. P. 5513–5522.
- [10] *Ивлев Г.Д., Малевич В.Л.* // *ЖТФ.* 1990. Т. 60. Вып. 2. С. 199–201.
- [11] *Гацкевич Е.И., Ивлев Г.Д., Чаплинов А.М.* // *Квантовая электрон.* 1995. Т. 22. № 8. С. 805–810.