

УДК 536.4+621.373.826

*Е.С. ПАНФИЛЕНКО, И.С. МАНАК, А. МЕДВИДЬ, П. ОНУФРИЕВ***МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ИЗМЕНЕНИЯ КОМПОНЕНТНОГО СОСТАВА SiGe-МАТЕРИАЛА ПРИ ИМПУЛЬСНОМ ЛАЗЕРНОМ ОБЛУЧЕНИИ**

Numerical calculations of processes of semiconductors heating by radiation as well as processes of the SiGe material component composition changing because of their uneven heating have been conducted. A physical model of three-dimensional structures formation on semiconductor surface by laser pulse radiation have been suggested.

В сравнении с такими распространенными методами формирования низкоразмерных структур, как молекулярно-лучевая эпитаксия, газофазная эпитаксия металлоорганических соединений и коллоидная химия, метод лазерного воздействия на материал является предпочтительным с точки зрения сравнительно небольших экономических затрат. В настоящее время активно разрабатываются различные методы, в основе которых лежит процесс лазерной абляции (вынос вещества с поверхности твердого тела под воздействием излучения и обтекающего потока горячего газа), а также процессы взаимодействия лазерного излучения с поверхностью вещества в доабляционном режиме. Существующие методы позволяют не только формировать периодические низкоразмерные структуры, но и получать чистые коллоидные частицы [1, 2].

Среди множества эффектов, возникающих при облучении лазером различных материалов, можно выделить термодиффузию примесей, наблюдаемую из-за существенного градиента температур, вызванного неравномерным нагревом [3]. На основании данного явления была показана возможность роста трехмерных структур на поверхности SiGe-материала под воздействием лазерного излучения. На полученном с помощью атомно-силового микроскопа трехмерном изображении облученной поверхности SiGe-сплава были зафиксированы низкоразмерные структуры конусоподобной формы. Произведенный по экспериментально полученным спектрам рамановского рассеяния расчет показал увеличение концентрации германия на поверхности сплава от 30 до 42 % [4].

Теоретическое рассмотрение взаимодействия лазерного излучения с веществом позволяет не только объяснить результаты эксперимента, но и предложить оптимальный технологический процесс формирования низкоразмерных структур на поверхности материалов при облучении их мощными лазерными импульсами, минимизируя финансовые и временные затраты. Цель настоящей работы – теоретически обосновать наблюдаемый экспериментальный результат увеличения поверхностной концентрации германия под воздействием лазерного излучения на SiGe-сплав и оценить возможность получения германиевого дельта-слоя в полупроводнике при облучении его со стороны кремниевой подложки.

В проведенном численном эксперименте использовались два образца, полученные путем выращивания SiGe-слоев на подложках Si методом молекулярно-лучевой эпитаксии. Для обоих образцов толщина кремниевых подложек составила 500 мкм, толщина слоев SiGe-сплава – 170 нм. Для уменьшения плотности дефектов на границе кремний – германий формировался низкотемпературный буферный SiGe-слой, в котором содержание Ge постепенно увеличивалось от нулевой до заданной концентрации. Толщина буферного слоя для первого и второго образцов составила 30 и 40 нм соответственно. Для первого образца концентрация Ge в сплаве равнялась 30 %, для второго – 42 %.

На поверхность образцов воздействовали мощным излучением Nd:YAG лазера с длиной волны 1,06 мкм, длительностью импульса 15 нс, частотой следования импульсов 14 Гц. С помощью коллимирующей оптики луч лазера фокусировался на поверхности образцов в пятно диаметром 3 мм с гауссовым распределением интенсивности в пучке.

Энергия лазерного импульса выбиралась из условий работы в допороговом (доабляционном) режиме, т. е. энергии импульса недостаточно для проплавления вещества или его выноса с поверхности.

Первый образец облучался со стороны SiGe-сплава.

Лазерное излучение, проходя через полупроводник, частично поглощается, в результате в материале наблюдается температурный градиент, при этом различные атомы вещества могут смещаться как в область больших, так и меньших температур [3]. Согласно [5] атомы большего эффективного размера смещаются в область больших температур. Поскольку эффективный размер атомов германия превышает эффективный размер атомов кремния [6], атомы Ge в сплаве SiGe смещаются в область более высоких температур, т. е. к поверхности образца. Следовательно, после длительного лазерного воздействия концентрация германия на поверхности должна увеличиться. Согласно [7] при достижении концентрации германия в сплаве SiGe 50 % возможно формирование фазы Ge. При этом на поверхности образуются трехмерные структуры по механизму роста Странски – Крастанова [8].

При постановке численного эксперимента были рассмотрены процессы поглощения излучения, теплопередачи и диффузии атомов Ge в SiGe-сплаве. Анализ построен на совместном решении уравнений теплопроводности и диффузии. Уравнение теплопроводности имеет вид

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\alpha}{\rho C_p} I(\underline{r}, t) + \chi \nabla^2 T, \quad (1)$$

где T – абсолютная температура, t – время, α – коэффициент поглощения, ρ – плотность материала, C_p – удельная теплоемкость, $I(\underline{r}, t)$ – распределение интенсивности излучения, $\chi = \frac{k}{\rho C_p}$ – коэффициент температуропроводности, k – коэффициент теплопроводности.

Считаем, что интенсивность излучения в слое z затухает по закону Бугера и распределение интенсивности в сечении XOY пучка является гауссовым. Полагая, что при нагревании вещества теплообмен с окружающей средой отсутствует, решение уравнения (1) выражается формулой [9, 10]

$$T(\underline{r}, t) = \frac{\alpha(1 - R_{\text{отр}})I_0}{2\rho C_p} \int_0^\tau dt' \frac{R^2}{R^2 + 4\chi(t-t')} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{R^2 + 4\chi(t-t')}\right) \exp(\alpha^2 \chi(t-t')) \times \left\{ \exp(-\alpha z) \operatorname{erfc}\left(\alpha \sqrt{\chi(t-t')} - \frac{z}{2\sqrt{\chi(t-t')}}\right) + \exp(-\alpha z) \operatorname{erfc}\left(\alpha \sqrt{\chi(t-t')} + \frac{z}{2\sqrt{\chi(t-t')}}\right) \right\}. \quad (2)$$

Здесь $R_{\text{отр}}$ – коэффициент отражения, I_0 – интенсивность лазерного излучения в импульсе, τ – длительность лазерного импульса, R – радиус гауссова светового пучка.

Процесс диффузии описывается выражением

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \nabla(D\nabla N) + \frac{DN}{k_B T} F, \quad (3)$$

где N – концентрация диффундирующих атомов, D – коэффициент диффузии, k_B – постоянная Больцмана, $F \sim \nabla T$ – результирующая сила, действующая на диффундирующий атом в облучаемом излучением лазера материале [2].

Поскольку длительность лазерного импульса значительно меньше периода следования импульсов, полагаем, что к началу действия следующего импульса температурный градиент отсутствует и движение атомов германия прекращается, уравнение (3) преобразуется к виду

$$\nabla N(\underline{r}) + a \frac{N(\underline{r})}{T(\underline{r})} \nabla T(\underline{r}) = 0, \quad (4)$$

где $a < 0$ – численный коэффициент, зависящий от свойств сплава [5].

Рассматривая уравнение (4) относительно одной координаты, получим

$$N(z) = N(0) \left(\frac{T(z)}{T(0)} \right)^{-a}. \quad (5)$$

При оценке воздействия лазерных импульсов на образцы учитывалось, что кремний и германий являются непрямозонными полупроводниками. Это дает основание считать, что вся поглощенная в материале энергия переходит в колебательную энергию фононов решетки, т. е. расходуется на разогрев материала.

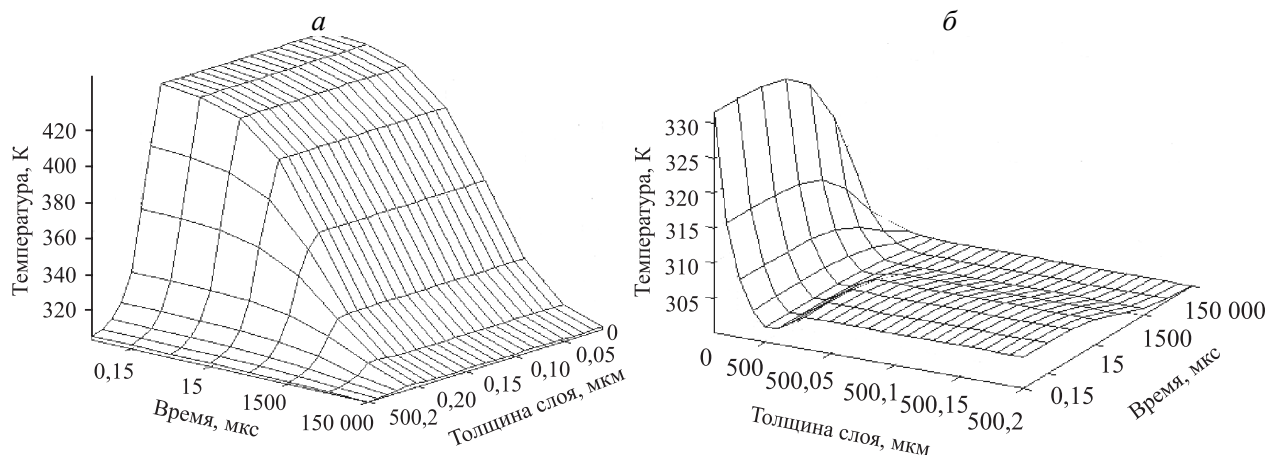


Рис. 1. Изменение температуры в образце SiGe/Si с течением времени (от конца действия импульса к началу следующего импульса) после облучения поверхности (а) и подложки (б) образца импульсом длительностью 15 нс с плотностью мощности 20 МВт/см²

За время после воздействия одного импульса к началу действия следующего образец полностью остывает до комнатной температуры (рис. 1 а). Это означает, что при расчете воздействия множества импульсов на распределение температуры в приповерхностном слое можно полагать, что температура материала к началу действия каждого лазерного импульса составляет 300 К. Кроме того, полагалось, что характеристики материала в течение действия импульса остаются без изменений. Однако к началу действия следующего импульса параметры материала меняются в зависимости от концентрации x в слое согласно таблице. Параметры удельной теплоемкости, коэффициента поглощения и коэффициента отражения получены путем линейной аппроксимации данных (см. таблицу).

Параметры сплава Si_{1-x}Ge_x, используемые при расчетах

Параметр	Значение параметра
Молярная масса Si, г/моль	28,08 [11]
Молярная масса Ge, г/моль	72,61 [11]
Удельная теплоемкость, Дж/г·К	0,7–0,39x [11]
Теплопроводность, Вт/(см·К)	0,046+0,084x [11]
Коэффициент поглощения на $\lambda=1,06$ мкм, см ⁻¹	730x+67; 0,2<x≤0,85 [12] 88733x–74733; x>0,85 [13]
Коэффициент отражения	0,0177x+0,32126 [12]
Плотность, г/см ³	2,329+3,493x–0,499x ² [11]
Коэффициент пропорциональности a	–0,15 [11]

Численная оценка градиента температуры в слоях образца (за положительное значение градиента принимается состояние, когда температура увеличивается при приближении к поверхности SiGe) показывает, что максимального значения градиент температур достигает в буферном SiGe-слое с переменной концентрацией компонентов. Кроме того, градиент температуры положителен по всей толщине слоя, что подтверждает положения, описанные ранее.

Расчет изменения концентрации атомов в слоях материала после длительного облучения (рис. 2 а) показывает значительное увеличение концентрации Ge на поверхности образца. Так, концентрация Ge после воздействия на него двухсот импульсов увеличилась с 30 до 45 %, что согласуется с результатами эксперимента [3].

Второй образец облучался со стороны кремниевой подложки.

Коэффициент поглощения Si на выбранной длине волны лазерного излучения примерно 60 см⁻¹, что значительно меньше коэффициента поглощения чистого Ge на данной длине волны (примерно 14 000 см⁻¹) [13]. Это означает, что при увеличении процента содержания Ge в сплаве SiGe поглощение излучения в слое возрастает согласно данным, приведенным в таблице.

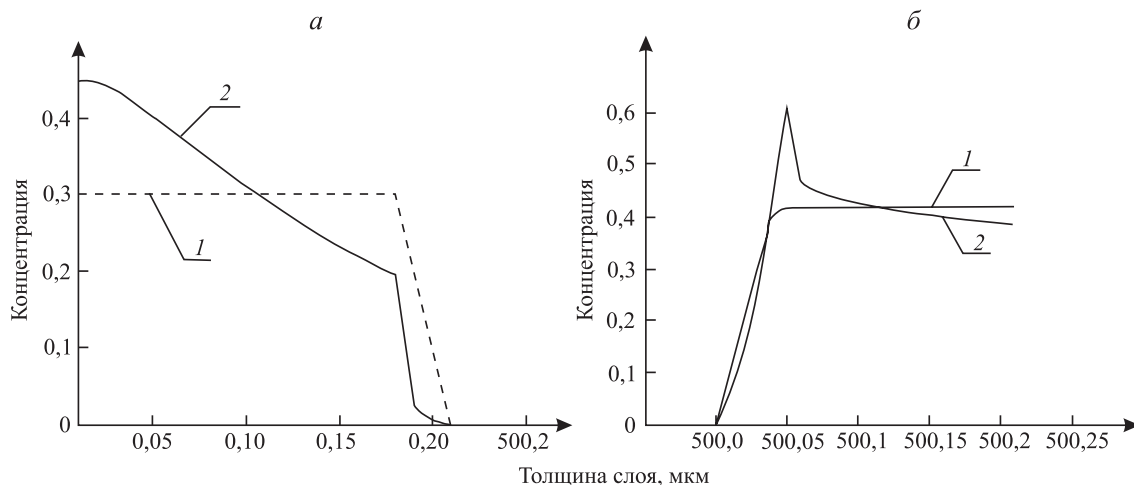


Рис. 2. Распределение концентрации Ge в образце SiGe/Si до (кривые 1) и после (кривые 2) воздействия двухсот лазерных импульсов при облучении поверхности (а) и пятисот лазерных импульсов при облучении со стороны подложки (б) (длительность лазерного импульса 15 нс, плотность мощности 20 МВт/см²)

При таких условиях поглощение происходит преимущественно в слоях SiGe. В этом случае повышение температуры будет наблюдаться сразу по двум направлениям. На границе кремниевой подложки и буферного слоя с переменной концентрацией германия будет фиксироваться резкое повышение температуры из-за большего поглощения энергии в слоях с большим содержанием германия. С обратной стороны образца температура также увеличивается от поверхности (SiGe) в глубь материала, что объясняется затуханием интенсивности проходящего через материал излучения по закону Бугера.

Распределение температуры в образце после воздействия одного лазерного импульса (рис. 1 б) приводит к появлению как положительной области температурного градиента, так и отрицательной. Причем положительный температурный градиент наблюдается в буферном слое образца с переменной концентрацией Ge и достигает максимума на границе со слоем SiGe с постоянным содержанием германия.

На рис. 2 б представлено распределение концентрации Ge в образце до (кривая 1) и после (кривая 2) воздействия 500 импульсов. После облучения образца слой с максимальной концентрацией Ge располагался на границе буферного слоя с переменной концентрацией и поверхностного слоя Si_{0,58}Ge_{0,42}. Концентрация изменялась с 42 до 61 %.

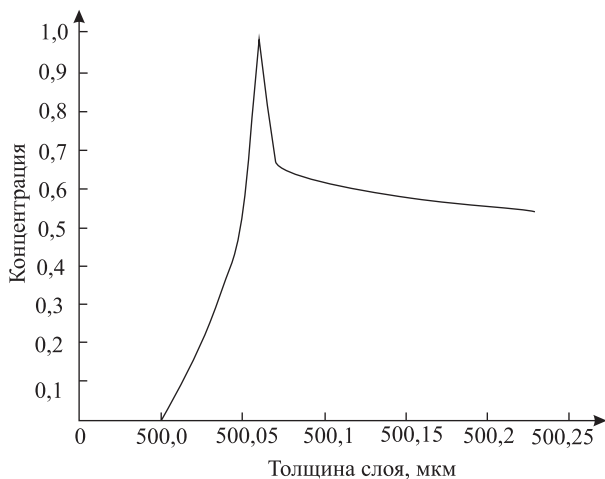


Рис. 3. Распределение концентрации Ge в образце SiGe/Si после воздействия двухсот пятидесяти импульсов длительностью 15 нс с плотностью мощности 20 МВт/см²

На основании результатов описанного эксперимента был выбран третий образец с начальным содержанием германия в сплаве 60 %. В этом случае уже после воздействия 250 импульсов концентрация германия на границе буферного слоя и слоя SiGe с постоянным содержанием германия увеличивается до 99 % (рис. 3).

Таким образом, теоретически доказано увеличение Ge на поверхности SiGe-сплава при воздействии на него мощного лазерного излучения, что согласуется с результатами эксперимента [4]. Как уже отмечалось, при достижении концентрации Ge в сплаве 50 % возможен рост трехмерных структур. Кроме того, обоснована

возможность формирования узкого слоя германия с большим содержанием кремния (дельта-слоя) в специфических условиях, когда в структуре реализуется встречный температурный градиент.

1. Казакевич П. В., Симакин А. В., Шафеев Г. А. // КЭ. 2005. Т. 35. № 9. С. 831.

2. Казакевич П. В., Воронов В. В., Симакин А. В., Шафеев Г. А. // КЭ. 2004. Т. 34. № 10. С. 951.

3. Воронков В.П., Гурченко Г.А. // ФТП. 1990. Т. 24. № 10. С. 1831.
4. Medvid' A., Onufijevs P., Lyutovich K. et al. // Materials Science. 2008. Vol. 14. № 4. P. 288.
5. Kaupuzs J., Medvid' A. // Proc. SPIE. 1994. Vol. 2335. P. 134.
6. Atomic size [Electronic resource]. Chemical Systems, Chemical Bond Approach Project. New York, 1964. Mode of access: http://dl.clackamas.cc.or.us/ch104-07/atomic_size.htm. Date of access: 09.09.2009.
7. Kamenev B.V., Baribeau J.-M., Lockwood D.J., Tsybeskov L. // Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. 2005. № 26. P. 174.
8. Леоненя М.С., Манак И.С., Панфиленок Е.С., Чижик Д.И. // Электроника инфо. 2008. № 8. С. 54.
9. Панфиленок Е.С., Манак И.С., Медвидь А. // Электроника инфо. 2009. № 7. С. 72.
10. Коротеев Н.И., Шумай И.Л. Физика мощного лазерного излучения. М., 1991.
11. SiGe: Optical properties [Electronic resource]. Ioffe phys. tech. institute, 2005. Mode of access: <http://www.ioffe.rssi.ru/SVA/NSM/Semicond/SiGe>. Date of access: 20.01.2010.
12. Optical Properties of SiGe and Ge [Electronic resource]. Virginia Semiconductor, Inc. Mode of access: <http://www.virginiasemi.com/pdf/Optical%20Properties%20fo%20SiGe%20and%20Ge.pdf>. Date of access: 20.01.2010.
13. Semiconductor Properties [Electronic resource]. Brigham young university. Mode of access: <http://cleanroom.byu.edu/OpticalCalc.phtml>. Date of access: 20.01.2010.

Поступила в редакцию 17.12.09.

Елена Сергеевна Панфиленок – студентка 5-го курса факультета радиофизики и электроники.

Иван Степанович Манак – кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник кафедры квантовой радиофизики и оптоэлектроники.

Артур Медвидь – доктор физики хабилитированный, профессор, заведующий кафедрой физики конденсированных материалов Рижского технического университета.

Павел Онуфриев – доктор физики, научный сотрудник кафедры физики конденсированных материалов Рижского технического университета.