

06

Образование ячеистой структуры в слоях SiGe при наносекундном лазерном облучении

© Е.И. Гацкевич¹, Г.Д. Ивлёв², В.Л. Малевич^{3,4}

¹ Белорусский национальный технический университет, Минск, Беларусь

² Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

³ Институт физики НАН Беларуси, Минск, Беларусь

⁴ Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: gatskevich_elena@yahoo.com

Поступило в Редакцию 1 сентября 2014 г.

Проведено численное моделирование процессов нагрева, плавления и кристаллизации твердого раствора SiGe на кремниевой подложке, происходящих под действием наносекундного лазерного излучения, и проанализирован механизм формирования ячеистых структур из-за сегрегационного разделения элементов на стадии отвердевания бинарного расплава. Результаты вычислений сопоставлены с известными экспериментальными данными, характеризующими продолжительность лазерно-индуцированных фазовых превращений и средний размер ячеек (образующихся вследствие эффекта концентрационного переохлаждения) в зависимости от плотности энергии в лазерном импульсе.

В последнее время твердые растворы SiGe находят все более широкое применение в полупроводниковой электронике [1]. На основе данного материала созданы малощумящие биполярные транзисторы на гетеропереходах, работающие на частотах свыше 100 GHz. Преимуществом SiGe по сравнению с полупроводниками GaAs и InP, обычно применяемыми в быстродействующих электронных компонентах, является его совместимость с базовой кремниевой технологией. Несомненным достоинством этого бинарного полупроводникового соединения является также возможность изменения его композиционного состава в широких пределах, что позволяет контролировать параметр решетки и ширину запрещенной зоны. Это открывает большие возможности создания на основе сплавов SiGe фотоприемников, фотопреобразователей, светоизлучающих структур и других устройств оптоэлектроники.

Объемные кристаллы — слитки SiGe с достаточно низкой плотностью дефектов и высокой степенью однородности композиционного состава получают методом выращивания из бинарного расплава. Однако при выращивании кристаллов $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ с большим содержанием германия ($x > 0.3$) существенную роль начинает играть эффект концентрационного переохлаждения [2]. Этот эффект проявляется при превышении некоторого порогового значения скорости кристаллизации (при вытягивании слитка) и приводит к неустойчивости плоского фронта кристаллизации, приводящей к образованию ячеистой структуры. Пороговая скорость перемещения межфазной границы зависит от вида фазовой диаграммы бинарного соединения, градиентов температуры и концентрации примеси и для SiGe обычно лежит в диапазоне от 5 до $20 \mu\text{m/s}$ [3–5]. Характерный размер ячеек, образующихся в процессе выращивания слитка, обычно составляет несколько десятков μm .

Образование ячеистых структур наблюдалось также при наносекундном лазерном облучении $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, когда скорость движения фронта кристаллизации достигает порядка $10^6 \mu\text{m/s}$ [6–8]. В данном сообщении приведены результаты численного моделирования процессов нагрева, плавления и кристаллизации при облучении наносекундными лазерными импульсами с различными плотностями энергии структур $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, выращенных на подложке Si, и проанализировано образование в них ячеистой структуры, связанное с эффектом концентрационного переохлаждения.

Анализ динамики нагрева, плавления и кристаллизации $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ под действием наносекундного лазерного импульса проводился на основе численного решения одномерной задачи Стефана в конечных разностях [9]. Конкретные расчеты проводились для образца $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}/\text{Si}$ (толщина эпитаксиального слоя SiGe $2 \mu\text{m}$), облучаемого одиночным импульсом рубинового лазера (длина волны $0.69 \mu\text{m}$) длительностью 80 ns по полувысоте. Для $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ и Si в твердом и жидком состоянии использовались значения теплофизических и оптических параметров, приведенные на сайте [10] и в работах [7,11]. Расчетные значения времени существования жидкой фазы (рис. 1) достаточно хорошо согласуются с экспериментальными данными, полученными из временной зависимости амплитуды сигнала отраженного зондирующего излучения, регистрируемого от области, облучаемой рубиновым лазером [8]. Из расчетов следует, что при плотности энергии 0.3 J/cm^2 , соответствующей порогу плавления поверхности SiGe-слоя, ее пиковая

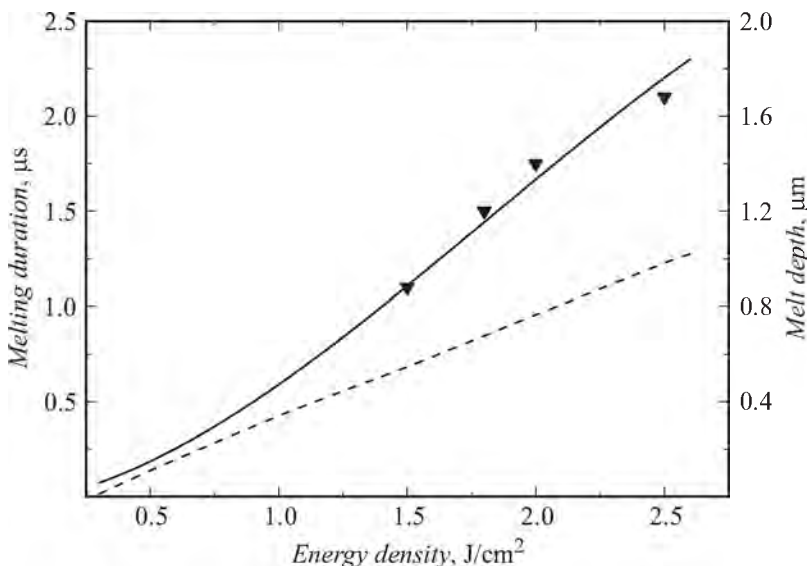


Рис. 1. Рассчитанные зависимости времени существования расплава (сплошная кривая) и максимальной глубины проплавления (пштриховая линия) от плотности энергии лазерного облучения; ▼ — экспериментально измеренные значения времени существования расплава [8].

температура достигает температуры ликвидуса (1540 К). При изменении плотности энергии от 0.3 до 2.6 J/cm² пиковая температура изменяется от 1540 до 2340 К.

Существенной особенностью бинарного сплава Si_{0.5}Ge_{0.5} является его низкая теплопроводность в твердом состоянии: при комнатной температуре значение коэффициента теплопроводности составляет около 0.08 W/(cm · К) [10]. Это приводит к значительному увеличению времени существования расплава. Так, по сравнению с монокристаллом кремния это время возрастает примерно в 5–6 раз [9]. К концу лазерного импульса глубина проплавления достигает максимальной величины, и затем начинается процесс кристаллизации, т.е. обратное движение границы раздела фаз со скоростью v , определяемой эффективностью отвода скрытой теплоты кристаллизации от границы фазового перехода. Из проведенных расчетов следует, что на стадии кристаллизации

градиент температуры в расплаве достаточно мал и поэтому скорость v можно аппроксимировать соотношением $v = (k_s/\rho L)G_T$, где k_s — коэффициент теплопроводности $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ в твердом состоянии, G_T — градиент температуры в твердой фазе на границе кристалл–расплав, ρ — плотность кристаллизующего слоя при температуре плавления и L — удельная скрытая теплота плавления.

Выражение для инкремента нарастания неустойчивости плоского фронта кристаллизации в линейном приближении было впервые получено в работе [12]. В рассматриваемой нами ситуации, возникающей непосредственно с прекращением действия наносекундного лазерного импульса, отводом скрытой теплоты кристаллизации в расплав можно пренебречь. В таком случае выражение для инкремента неустойчивости [12] можно представить в виде

$$\gamma = \frac{v\omega \left\{ -(T_m\Gamma\omega^2 + \frac{vL}{k_s+k_l})[\alpha(\omega) - \frac{vp}{D}] + mG_c[\alpha(\omega) - \frac{v}{D}] \right\}}{\frac{vL}{k_s+k_l}[\alpha(\omega) - \frac{vp}{D}] + \omega mG_c}, \quad (1)$$

$$\alpha(\omega) = \frac{v}{2D} + \left(\frac{v^2}{4D^2} + \omega^2 \right)^{1/2}, \quad G_c = \frac{vx(k-1)}{Dk}, \quad p = 1 - k.$$

Здесь ω — волновое число возмущения, m — наклон линии ликвидуса, D — коэффициент диффузии Ge в расплаве, T_m — температура плавления Si, $k_s(l)$ — коэффициенты теплопроводности в твердой (s) и жидкой (l) фазах, Γ — отношение поверхностной энергии границы расплав–кристалл к объемной скрытой теплоте плавления, G_c — градиент концентрации Ge в расплаве. Зависимость коэффициента распределения примеси k от скорости фронта кристаллизации определяется выражением $k = (k_0 + v/v_D)/(1 + v/v_D)$, где $k_0 = 0.45$ — равновесный коэффициент распределения для $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, $v_D = 2.5$ м/с [11]. Характерный размер ячеек, образующихся в результате неустойчивости, определяется как $2\pi/\omega^*$, где ω^* — волновое число, при котором достигается максимум инкремента неустойчивости [12].

При малых скоростях движения фронта кристаллизации ($< 10 \mu\text{m/s}$), когда характерный размер ячеек составляет несколько десятков микрон, первое отрицательное слагаемое в числителе выражения (1), описывающее влияние эффекта капиллярности, мало, и пороговое значение скорости движения фронта кристаллизации определяется

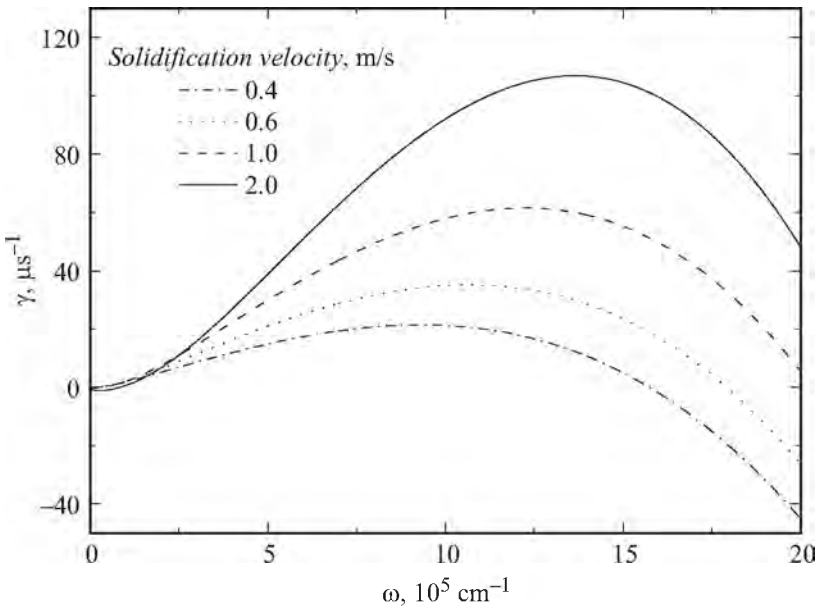


Рис. 2. Зависимости инкремента неустойчивости от волнового числа, рассчитанные по формуле (1) для разных значений скорости движения фронта кристаллизации.

конкуренцией второго и третьего слагаемых. Однако при наносекундном лазерном воздействии характерный размер ячеек составляет примерно около $0.1 \mu\text{m}$ [8], т.е. он на 2–3 порядка меньше, чем в предыдущем случае. В результате первое слагаемое в числителе (1) становится намного больше второго и, следовательно, основной вклад в подавление неустойчивости будет давать эффект поверхностного натяжения.

Инкремент неустойчивости рассчитывался из выражения (1) для нескольких значений скорости фронта кристаллизации. Как следует из расчетов (рис. 2), неустойчивость ($\gamma > 0$) имеет место в определенном интервале значений волнового числа, причем с ростом скорости кристаллизации нижняя и верхняя границы этого интервала сдвигаются в область больших волновых чисел. Понижение скорости движения фронта кристаллизации приводит к уменьшению инкремента неустойчивости, а также волнового числа, соответствующего максимуму γ .

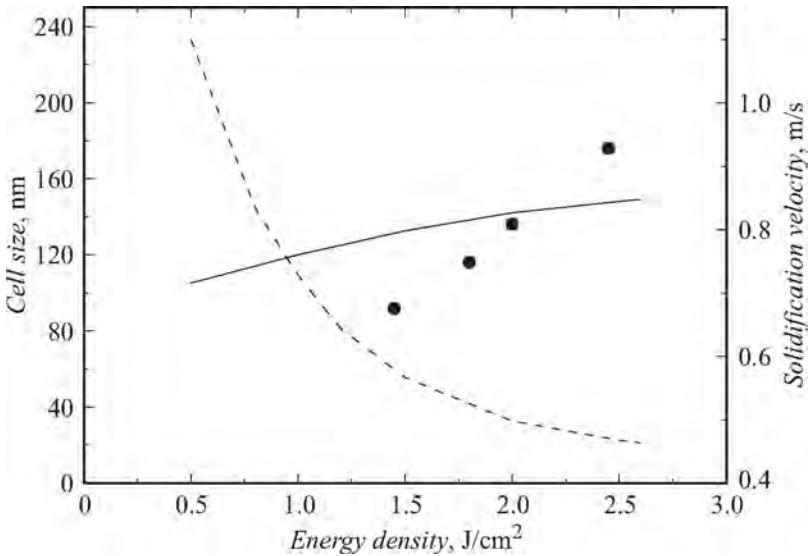


Рис. 3. Рассчитанные зависимости среднего размера ячеек (сплошная линия) и скорости движения фронта кристаллизации (штриховая кривая) от плотности энергии лазерного облучения; ● — результат эксперимента [8].

На рис. 3 представлены рассчитанные зависимости средней скорости движения фронта кристаллизации и размера ячейки от плотности энергии лазерного импульса. Средняя скорость кристаллизации определялась как отношение максимальной толщины расплава к времени движения фронта кристаллизации, которое примерно на 150 ns (время плавления) меньше длительности существования расплава. Из расчетов следует, что при увеличении плотности энергии от 0.5 до 2.5 J/cm^2 скорость движения фронта кристаллизации уменьшается более чем в 2 раза. Соответственно рассчитанный размер ячеек увеличивается от 100 до 150 nm, т.е. примерно в полтора раза. Однако в эксперименте [8] наблюдается более резкое увеличение размера ячеек с ростом плотности энергии лазерного импульса: при возрастании плотности энергии от 1.5 до 2.5 J/cm^2 средний размер ячеек увеличивается от 90 до 180 nm. Таким образом, в рамках используемой здесь модели [12] достигается качественное согласие результатов расчета среднего размера

ячеек с экспериментальными данными. Несоответствие, скорее всего, связано с использованием линейной модели неустойчивости, а также неточностью задаваемых параметров бинарного полупроводника SiGe в твердом и жидком состояниях.

Работа выполнена при поддержке БРФФИ по проекту Ф13К-117.

Список литературы

- [1] *Paul D.J.* // *Semicond. Sci. Technol.* 2004. V. 19. P. R76–108.
- [2] *Tiller W.A., Jackson K.A., Rutter J.W., Chalmers B.* // *Acta metallurgica.* 1953. V. 1. N 4. P. 428–437.
- [3] *Smirnova O.V., Kalaev V.V., Makarov Y. N., Abrosimov N.V., Riemann H.* // *J. Cryst. Growth.* 2004. V. 266. P. 74–80.
- [4] *Yonenaga I., Taishi T., Ohno Y., Tokumoto Y.* // *J. Cryst. Growth.* 2010. V. 312. P. 1065–1068.
- [5] *Yang X., Fujiwara K., Abrosimov N.V., Gotoh R., Nozawa J., Koizumi H., Kwasniewski A., Uda S.* // *Appl. Phys. Lett.* 2012. V. 100. P. 141 601.
- [6] *Sobolev N.A., Ivlev G. D., Gatskevich E.I., Leitao J.P., Fonseca N., Carmo M.C., Lopes A.B., Sharaev D.N., Kibbel H., Presting H.* // *Mater. Sci. Eng. C.* 2003. V. 23. P. 19–22.
- [7] *Weizman M., Nickel N.H., Sieber I., Yan B.* // *J. Appl. Phys.* 2008. V. 103. P. 093 536.
- [8] *Gaiduk P.I., Prakopyeu S.L.* // *Subsecond Annealing of Advanced Materials, Springer Series in Material Science / Ed. by W. Scorupa and H. Schmidt.* Springer, 2014. V. 192. P. 79–105.
- [9] *Пилипович В.А., Малевич В.Л., Ивлев Г.Д., Жидков В.В.* // *Инжен.-физич. журнал.* 1985. Т. 48. В. 2. С. 306–311.
- [10] <http://www.ioffe.rssi.ru/SVA/NSM/Semicond/SiGe>.
- [11] *Brunco D. P., Thompson M.O., Hoglund D.E., Aziz M.J., Gossmann H.-J.* // *J. Appl. Phys.* 1995. V. 78. P. 1575–1582.
- [12] *Mullins W.W., Sekerka R.F.* // *J. Appl. Phys.* 1964. V. 35. P. 444–451.