

06

## Образование ячеистой структуры в слоях SiGe при наносекундном лазерном облучении

© Е.И. Гацкевич<sup>1</sup>, Г.Д. Ивлев<sup>2</sup>, В.Л. Малевич<sup>3,4</sup>

<sup>1</sup> Белорусский национальный технический университет, Минск, Беларусь

<sup>2</sup> Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

<sup>3</sup> Институт физики НАН Беларуси, Минск, Беларусь

<sup>4</sup> Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: gatskevich\_elena@yahoo.com

Поступило в Редакцию 1 сентября 2014 г.

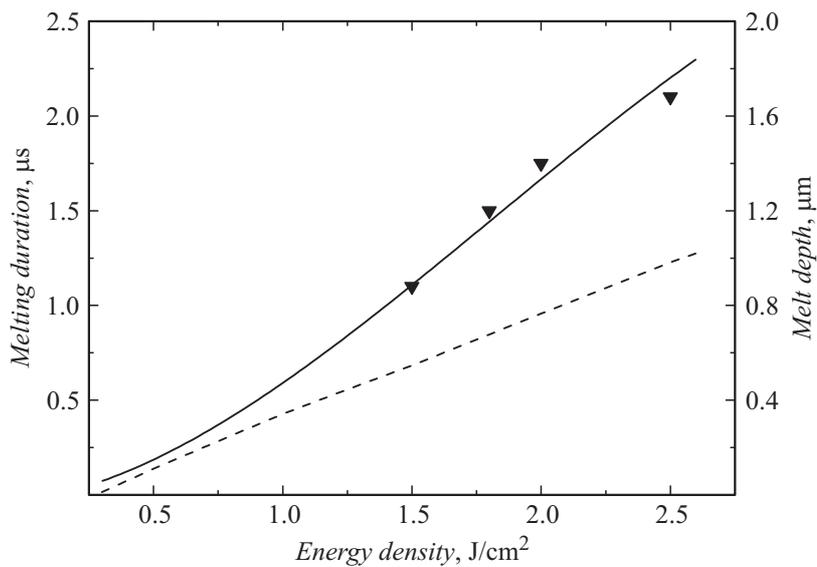
Проведено численное моделирование процессов нагрева, плавления и кристаллизации твердого раствора SiGe на кремниевой подложке, происходящих под действием наносекундного лазерного излучения, и проанализирован механизм формирования ячеистых структур из-за сегрегационного разделения элементов на стадии 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  $\mu\text{m}$ .

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  $80 \text{ ns}$  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  $0.3 \text{ J/cm}^2$ , соответствующей порогу плавления поверхности SiGe-слоя, ее пиковая



**Рис. 1.** Рассчитанные зависимости времени существования расплава (сплошная кривая) и максимальной глубины проплавления (штриховая 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/cm<sup>2</sup> пиковая температура изменяется от 1540 до 2340 К.

Существенной особенностью бинарного сплава Si<sub>0.5</sub>Ge<sub>0.5</sub> 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,  $\rho$  — плотность кристаллизующего слоя при температуре плавления и  $L$  — удельная скрытая теплота плавления.

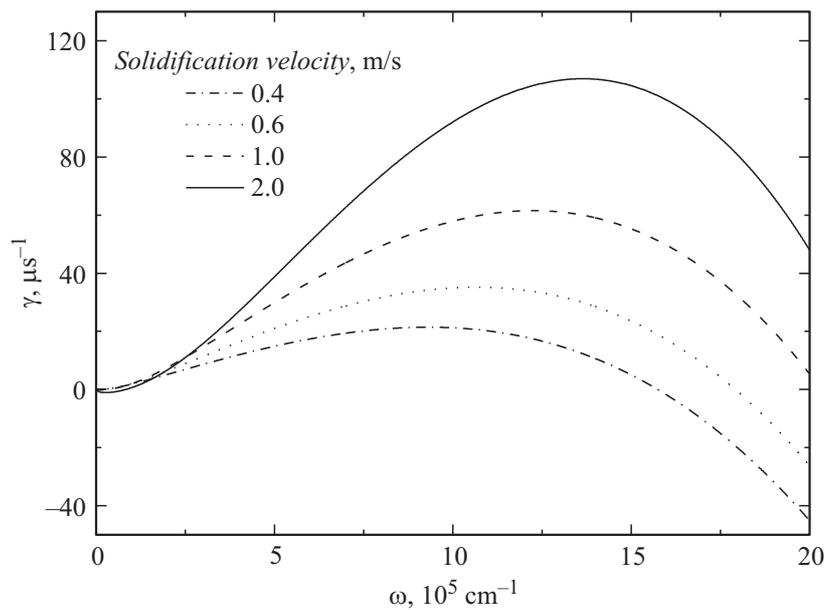
Выражение для инкремента нарастания неустойчивости плоского фронта кристаллизации в линейном приближении было впервые получено в работе [12]. В рассматриваемой нами ситуации, возникающей непосредственно с прекращением действия наносекундного лазерного импульса, отводом скрытой теплоты кристаллизации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

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

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

Здесь  $\omega$  — 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,  $\Gamma$  — 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  $\omega^*$  — волновое число, при котором достигается максимум инкремента неустойчивости [12].

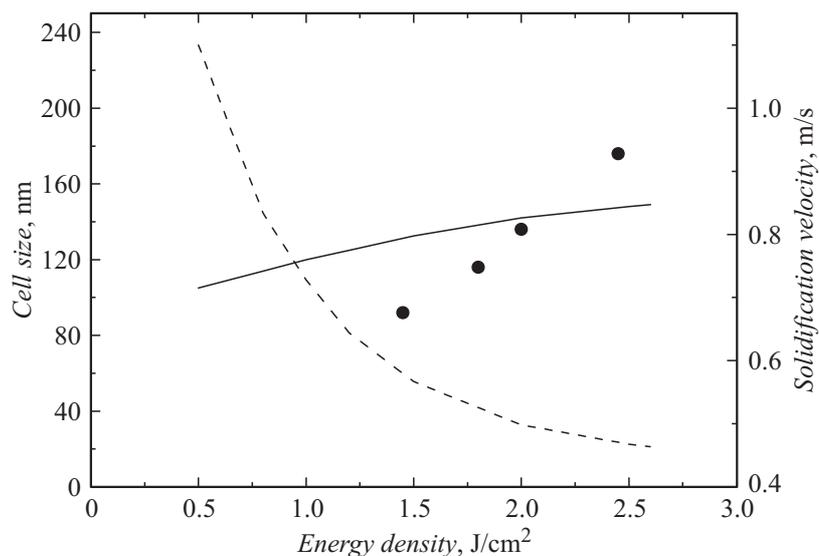
При малых скоростях движения фронта кристаллизации ( $< 10$  мкм/с), когда характерный размер ячеек составляет несколько десятков микрон, первое отрицательное слагаемое в числителе выражения (1), описывающее влияние эффекта капиллярности, мало, и пороговое значение скорости движения фронта кристаллизации 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  $\gamma$ .



**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 ps (время плавления) меньше длительности существования расплава. Из расчетов следует, что при увеличении плотности энергии от 0.5 до 2.5 J/cm<sup>2</sup> 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<sup>2</sup> 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., Høglund 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.