

МЕХАНИЗМ ОБРАЗОВАНИЯ ДЕФЕКТОВ В МОНОКРИСТАЛЛАХ КРЕМНИЯ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Аннотация. *Актуальность и цели.* Во многих современных технологиях обработки (модификации поверхности) материалов используется лазерное излучение (лазерное легирование, отжиг, термообработка, нанесение покрытий и т.д.). Известно, что при воздействии внешних потоков энергии (лазерного излучения или пучков частиц) на поверхность твердых тел в них происходят структурные и морфологические перестройки. Изучение этих структурных трансформаций и результирующей модификации свойств твердых тел является одной из актуальных задач современной физики. Результаты этих исследований важны для прикладных проблем лучевой стойкости материалов и деградации оптоэлектронных приборов в процессе их эксплуатации и под действием лазерного излучения и т.д. Поэтому целью данной работы является исследование кинетики образования дислокаций при лазерном отжиге, а также моделирование термоупругих напряжений в монокристаллах кремния. *Материалы и методы.* Сравнение полученных теоретических результатов проведено с экспериментальными данными по зависимости термоупругих напряжений по поверхности *p*- и *n*-кремния от диаметра кратера. Для решения задачи распределения температуры по поверхности образца использовалась нестационарная модель теплопереноса. Решение данной модели было получено численным моделированием в программе «ELCUT 5.8». Плоские термонапряжения в монокристаллическом кремнии, возникающие при лазерном воздействии, получены при помощи термоупругой модели, связанной с задачей температурного распределения. При моделировании рассчитывались только плоские температурные деформации для изотропного материала. *Результаты.* Исследовано образование и поведение дислокаций в монокристаллах кремния *n*- и *p*-типа при лазерном воздействии. Представлена зависимость температуры и термоупругих напряжений по поверхности *p*- и *n*-кремния от величины диаметра кратера. В результате сопоставления экспериментальных данных с построенной моделью были получены значения теплового потока для разных мощностей лазера. Значения мощностей для двух типов кремния совпадают, следовательно, можно делать вывод о том, что примесь фосфора и бора не оказывает влияния на тепловые свойства исследуемых материалов. Обнаружено, что разбег дислокаций увеличивается до определенного значения с возрастанием энергии лазерного излучения, после чего происходит снижение разбега, связанное со сквозным пробоем образца. *Выводы.* Воздействие лазерного излучения на монокристаллы *p*- и *n*-кремния приводит к значительному повышению температуры в области облучения, вызывая образование термоупругих напряжений в зоне действия лазера. Расстояние образовавшихся около кратера дислокаций увеличивается в зависимости от количества лазерных импульсов. Последующий изотермический отжиг образцов выявляет наличие остаточных напряжений в кремнии по окончании лазерного воздействия.

Ключевые слова: лазерное излучение, дислокации, полупроводники, напряжения.

S. V. Filaretov, E. A. Kashtanova, E. G. Zubkov, A. A. Polyakov

MECHANISMS OF DEFECT FORMATION IN SILICON MONOCRYSTALS EXPOSED TO LASER RADIATION

Abstract. *Background.* Laser radiation (laser doping, annealing, heat treating, plating, etc.) is used in many modern technologies of material processing (surface modification). It is known that under the influence of external flows of energy (laser radiation or particle beams) on the surface of solids there occurs structural and morphological reconstruction in them. The study of these structural transformations and the resulting modification of the properties of solids is one of the urgent problems of modern physics. The results of these studies are important for investigating applied problems of material radiation resistance and the degradation of optoelectronic devices during their operation and under the influence of laser radiation, etc. The aim of this paper is to study the kinetics of dislocation formation by laser annealing, as well as simulation of thermoelastic stress in silicon monocrystals. *Materials and methods.* The comparison of the obtained theoretical results with experimental data on the dependency of thermoelastic stress on the surface of the p- and n-silicon on the crater diameter is carried out. Transitional heat transfer model is used to solve the problem of temperature distribution on the sample surface. The solution of the model was obtained by numerical simulation in the program «ELCUT 5.8». Flat thermal stresses in monocrystal silicon arising under laser radiation are obtained with the help of the thermoelastic model associated with the problem of temperature distribution. Only flat temperature deformations for an isotropic material are calculated while simulating. *Results.* The formation and behavior of dislocations in silicon monocrystals of n- and p- type under laser exposure was studied. The dependence of temperature and thermoelastic stress on the surface of the p- and n- silicon on the diameter of the crater is shown. As a result of the comparison of experimental data with the constructed model the heat flow values for different laser powers were obtained. The values of capacities for the both types of silicon coincide, therefore it can be inferred that the boron and phosphorus impurities have no effect on the thermal properties of the materials under study. It was found out that the dislocation run increases to a certain value with an increase in the laser radiation energy, whereupon there is a run decrease associated with the sample breakthrough. *Conclusions.* The exposure of monocrystals of p- and n- silicon to laser radiation leads to a significant temperature rise in the irradiated region, causing the formation of thermoelastic stress in the zone of the laser activity. The distance of the dislocations formed near the crater increases depending on the number of laser pulses. Subsequent isothermal annealing of the samples reveals the presence of residual stresses in silicon in the absence of laser irradiation.

Key words: laser radiation, dislocation, semiconductors, stress.

Введение

Во многих современных технологиях обработки материалов используется лазерное излучение (лазерное легирование, отжиг, термообработка, нанесение покрытий и т.д.). Возможность локально воздействовать на участки поверхности размером до долей микрона, высокая скорость нагрева и мобильность в управлении лазерным лучом делают методы лазерной модификации материалов все более привлекательными. Известно, что при воздействии внешних потоков энергии (лазерного излучения или пучков частиц) на поверхность твердых тел в них происходят структурные и морфологические перестройки. Изучение этих структурных трансформаций и результирующей

модификации свойств твердых тел является одной из актуальных задач современной физики. Результаты этих исследований важны для прикладных проблем лучевой стойкости материалов и деградации оптоэлектронных приборов в процессе их эксплуатации и под действием лазерного излучения и т.д.

При разработке методов направленной модификации материалов особый интерес представляет детальное изучение процессов взаимодействия лазерного излучения с веществом и свойств поверхности материалов, модифицированных этим взаимодействием. Особое внимание уделяется дефектообразованию при лазерном воздействии.

Методика проведения исследований

Источником образцов для исследования служили легированные бором с концентрацией носителей $1,5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ стандартные 100 mm бездислокационные пластины кремния дырочного типа проводимости с удельным сопротивлением $\rho = 1,0 \text{ }\Omega \cdot \text{см}$ и легированные фосфором бесдислокационные пластины электронного типа проводимости с концентрацией носителей $5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, диаметром 76 mm, удельным сопротивлением $\rho = 0,01 \text{ }\Omega \cdot \text{см}$. Пластины готовились по стандартной технологии из монокристаллического слитка, выращенного по методу Чохральского. Кристаллографическая ориентация пластин, легированных бором – [100], для пластин, легированных фосфором – [111].

Процессы образования дислокаций исследовались при импульсном и импульсно-периодическом лазерном воздействии на установке «Квант-15» с энергией лазерного излучения $E = 416,7/1083,3 \text{ мДж/см}^2$ и частотой следования импульсов 0,5/35 Hz.

Часть образцов после лазерной обработки подвергалась высокотемпературному отжигу при $T = 650 \text{ }^\circ\text{C}$ в течение 180 мин.

Изучение динамики дислокаций в образцах кремния, подвергавшихся различным типам воздействия, осуществлялось по ямкам травления на поверхности кристалла, выявленным в процессе селективного травления в растворе CP-4 по стандартной методике [1, 2]. Визуальный контроль за плотностью и поведением дислокаций осуществлялся с помощью микроскопа МИИ-4 при увеличении $\times 330$.

Результаты и их обсуждение

Известно, что воздействие лазерного излучения на поглощающие материалы может приводить к значительному повышению температуры в зоне облучения. Это в свою очередь приводит к возникновению градиента температур и росту механических напряжений. Вводимые в образец термонапряжения были рассчитаны с помощью моделирования процесса нестационарной модели теплопереноса в программе «ELCUT 5.8».

Расчет тепловой задачи опирается на дифференциальное уравнение теплопроводности:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_x \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) = -q - c\rho \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (1)$$

где T – температура; t – время; $\lambda(T)$ – теплопроводность как функция температуры; q – удельная мощность тепловыделения; $c(T)$ – удельная теплоем-

кость, теплопроводность образца $\lambda = 149 \frac{\text{W}}{\text{K} \cdot \text{m}}$, удельная теплоемкость $c = 705 \frac{\text{J}}{\text{kg} \cdot \text{K}}$, плотность $\rho = 2330 \text{ kg/m}^3$.

Варьируя значения теплового потока от нарушенной области, получили значения теплового потока для разных диаметров кратера нарушенной области при температуре, приблизительно равной температуре плавления кремния (рис. 1).

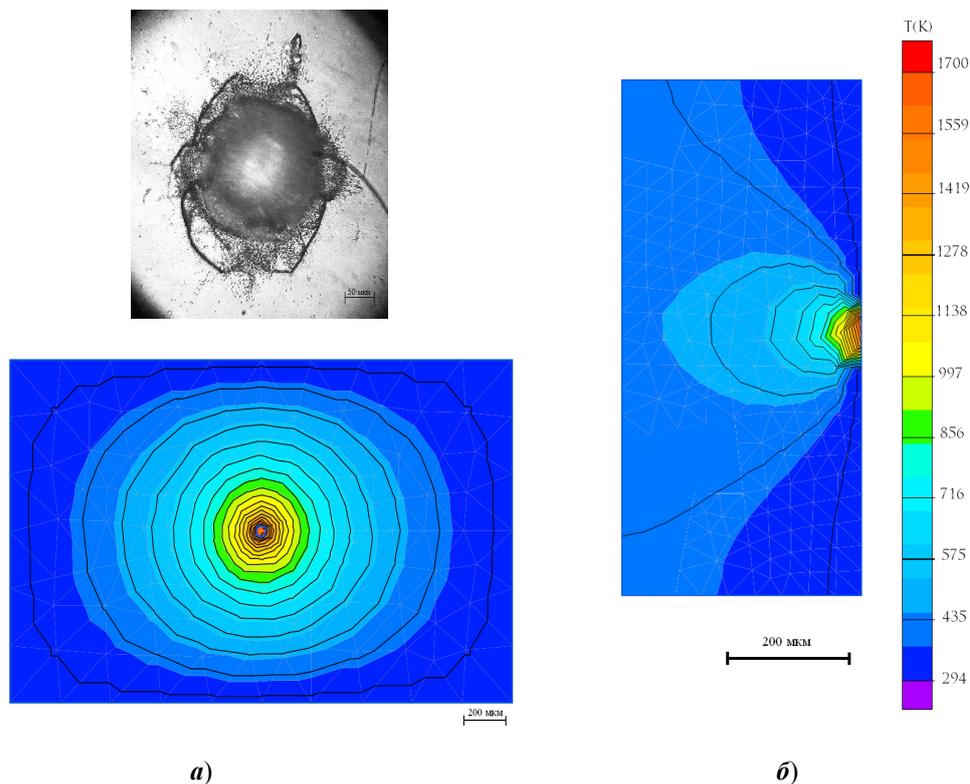
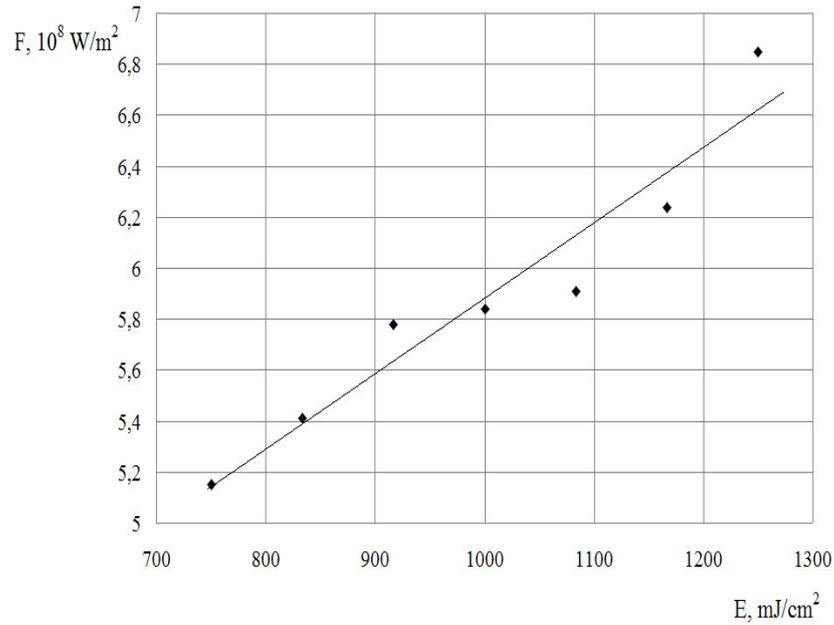


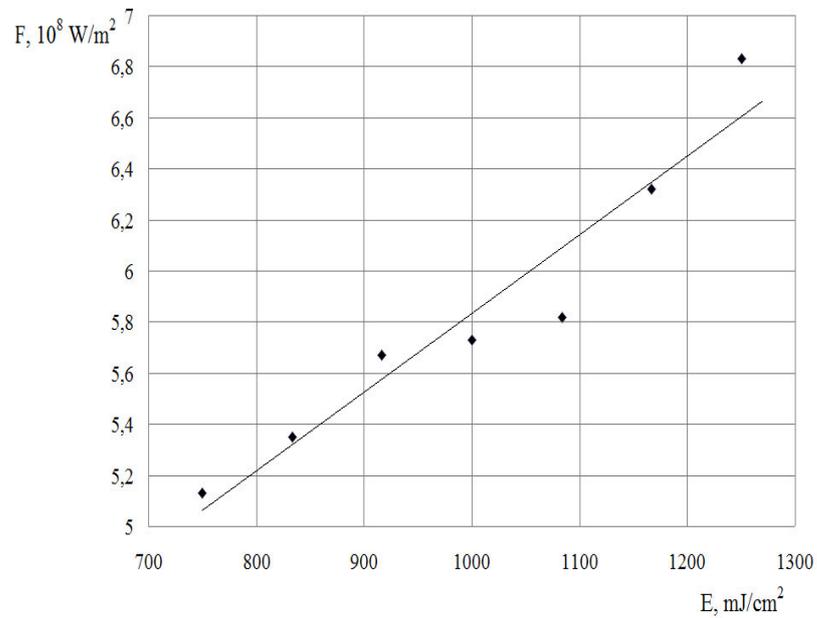
Рис. 1. Сопоставление картины распределения температуры на поверхности образца с разрушенной областью, наблюдаемой с помощью микроскопа (а); распределение температуры по объему образца (б) (материал образца – кремний *n*-типа, энергия лазерного воздействия $E = 1000 \text{ mJ/cm}^2$)

В результате сопоставления экспериментальных данных с результатами компьютерного моделирования была получена зависимость теплового потока от напряжения накачки лазерного воздействия на образец (рис. 2). Из полученных данных видно, что тепловой поток линейно возрастает с энергией лазерного излучения для двух типов кремния.

Из зависимости теплового потока от энергии лазерной накачки можно утверждать, что примеси фосфора и бора (*n*-Si и *p*-Si соответственно), которыми легирован кремний, не вносят большого влияния на тепловые свойства кремния.



a)



b)

Рис. 2. Зависимость теплового потока от энергии лазерного воздействия: *a* – n-Si; *b* – p-Si

Известно [3], что температура поверхности и вводимые термонапряжения при воздействии коротких лазерных импульсах связаны линейным соотношением.

Таким образом, с увеличением энергии лазерного излучения деформация, обусловленная температурным расширением облучаемого участка, возрастает и приводит к генерации линейных дефектов.

Если осуществлять равномерный нагрев образца, то его свободное расширение будет происходить без возникновения напряжений. При неравномерном нагреве тела связи между нагретыми и ненагретыми участками препятствуют свободному расширению тела. Вследствие этого в нем возникают собственные температурные напряжения, действующие при отсутствии внешних сил. При лазерной обработке на стадиях нагрева, выравнивания температур и охлаждения имеют место временные напряжения. Чтобы сдвинуть дислокацию по ее плоскости скольжения, необходимо пройти через конфигурацию с более высокой энергией, это требует силы, отвечающей напряжением сдвига на ее плоскости скольжения [4].

Минимальные напряжения для скольжения дислокаций – напряжения Пайерлса. При термоупругом воздействии на образец, большем чем напряжения Пайерлса ($\tau > \tau_p$), дислокации начинают движение по кристаллу, пока термонапряжения не станут меньше напряжения Пайерлса ($\tau < \tau_p$) [5].

Напряжение Пайерлса может быть рассчитано по формуле

$$\tau_p = \frac{2G}{1-\nu} \exp\left(\frac{2\pi d}{1-\nu b}\right), \quad (2)$$

где $G = 1,5 \cdot 10^{11}$ Па – модуль сдвига; $b = 1,1$ nm – вектор Бюргерса; $\nu = 0,3$ – коэффициент Пуассона; $d = 0,3$ nm – межплоскостное расстояние.

Рассчитанное значение барьера Пайерлса для образца n -типа проводимости имеет вид

$$\tau_p = 3,6868 \cdot 10^{10} \frac{\text{Н}}{\text{м}^2}.$$

В программе «ELCUT 5.8» были рассчитаны плоские термонапряжения в монокристаллическом кремнии, возникающие при лазерном воздействии. Для этого была построена термоупругая модель, которая связана с задачей температурного распределения. При моделировании рассчитывались только плоские температурные деформации. Решение модели происходит с опорой на плоские деформации изотропного материала:

$$\{\varepsilon_0\} = (1+\nu) \begin{Bmatrix} \alpha \\ \alpha \\ 0 \end{Bmatrix} \Delta T, \quad (3)$$

где ΔT – перепад температуры между деформированным и недеформированным состоянием.

Рассмотрим частное решение уравнений теории упругости, в котором перемещения u, v предполагаются не зависящими от координаты $x_3 = z$.

Для расчета принимались следующие параметры: модуль Юнга $E = 1,5 \cdot 10^{11}$ Н/м², модуль сдвига $G = 6,02 \cdot 10^{10}$ Па, коэффициент Пуассона $\mu = 0,3$, коэффициент теплового расширения $\alpha = 1 \cdot 10^{-6}$ 1/К [6]. Распределения напряжений при разных режимах лазерного воздействия на поверхности образца от центра разрушенной области представлены на рис. 3, 4.

Из полученных результатов видно, что при воздействии на кремний n -типа лазерного излучения с энергией $E = 1000$ мДж/см² образуется кратер

с радиусом в 153,6 μm , а разбег дислокаций составляет 34,86 μm . Следовательно, дислокации перемещаются от центра воздействия не более чем на 188,46 μm . Варьируя тепловые значения в построенной модели, выбирали значения, при которых термоупругие напряжения для данного напряжения накачки лазера не превышали барьер Пайерлса для кремния ($\tau_p = 3,6868 \cdot 10^{10} \text{ Н/м}^2$).

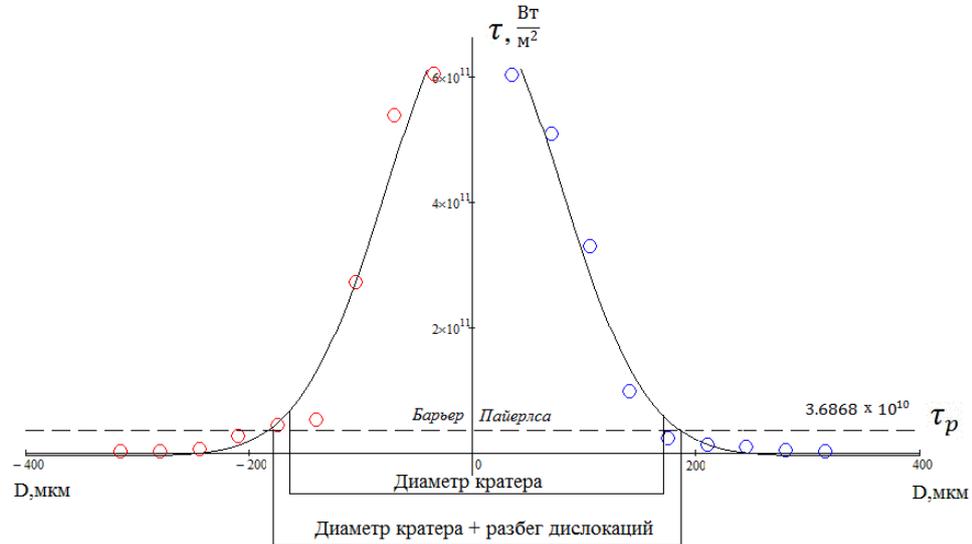


Рис. 3. Зависимость термоупругих напряжений по поверхности кремния *n*-типа (КЭФ) ($E = 1000 \text{ мДж/см}^2$)

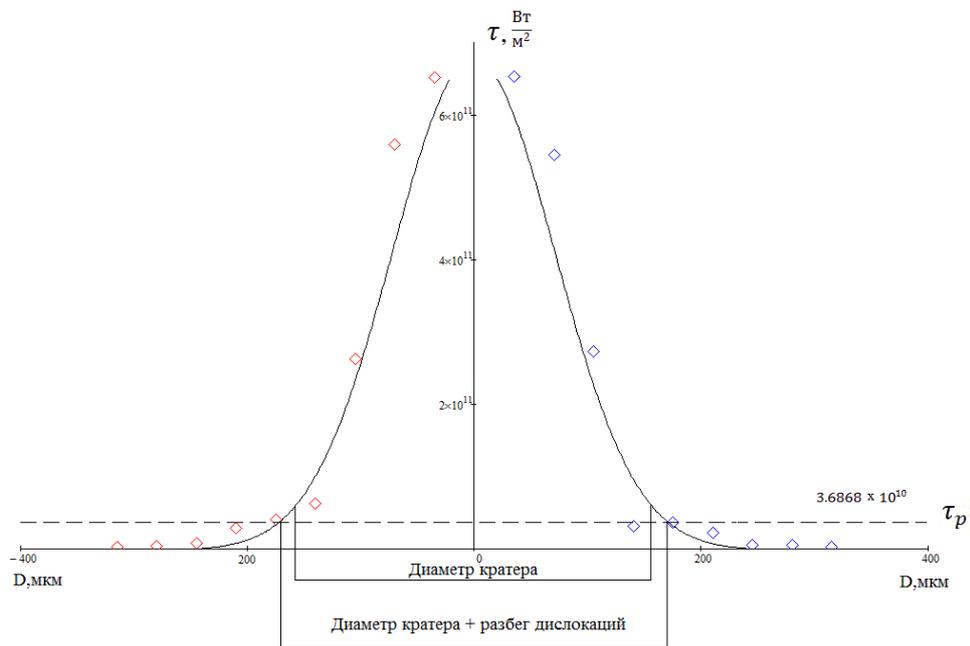


Рис. 4. Зависимость термоупругих напряжений по поверхности кремния *p*-типа (КДБ) ($E = 1000 \text{ мДж/см}^2$)

Сравнивая распределение термоупругих напряжений по поверхности кремния *n*- и *p*-типа проводимости (рис. 3, 4), установили, что основные тепловые свойства используемых в исследованиях кристаллов практически совпадают.

Результаты моделирования термоупругих напряжений и температуры в области кратера, возникающих при лазерном воздействии образца с энергией $E = 1000 \text{ мДж/см}^2$, представлены на рис. 5. Хорошо видно, что максимальные напряжения возникают на границе кратера.

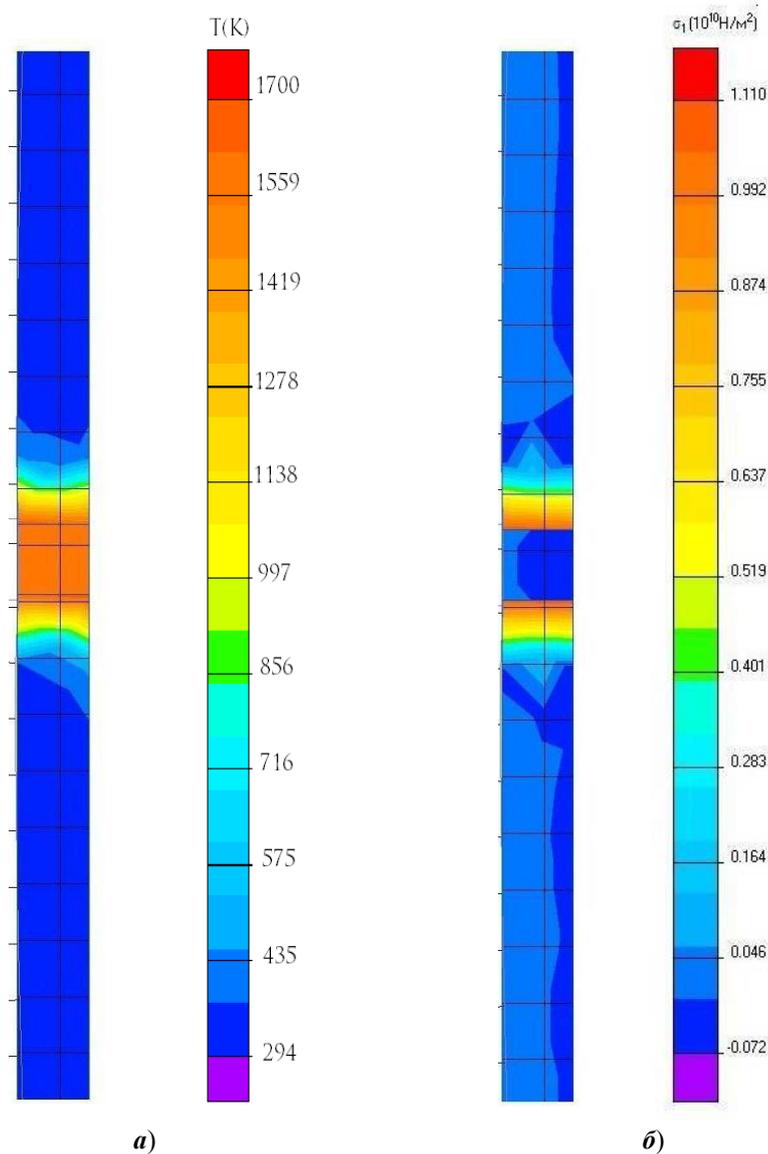


Рис. 5. Распределение термонапряжений в области кратера: *a* – распределение температуры по образцу; *b* – распределение термонапряжений по образцу

В результате лазерного воздействия температура поверхности достигает значений выше температуры пластического течения кремния (согласно [7] кремний становится пластичным), поэтому действие термонапряжений должно приводить к пластическим деформациям с образованием дислокаций. Причем вводимые напряжения релаксируют не только за счет образования линейных дефектов, но и их перемещения в области действующих напряжений.

Если релаксация напряжений неполная, то может наблюдаться транспорт дислокаций при дальнейшем высокотемпературном отжиге образцов.

Для проверки наличия остаточных механических напряжений, вводимых в образец при лазерном воздействии, проводился изотермический отжиг кристаллов при высокой температуре [8]. При этом напряжения релаксируют за счет перемещения уже образовавшихся дислокаций и зарождения новых. Релаксация напряжений определялась по прекращению перемещения линейных дефектов.

Результаты исследований показали увеличение разбега дислокаций после высокотемпературного отжига более чем в два раза по сравнению с образцами, не прошедшими высокотемпературную обработку. Подобное поведение линейных дефектов связано с неполной релаксацией напряжений во время лазерного облучения. По-видимому, за время остывания кристалла до комнатной температуры напряжения не успевают релаксировать за счет перемещения дислокаций [9]. Поэтому последующий отжиг инициирует их подвижность. Подобное поведение может наблюдаться при пакетном облучении поверхности лазерными импульсами.

Заключение

Разрушающее воздействие лазерного излучения приводит к испарению материала и вводу механических напряжений, релаксация которых происходит за счет образования и перемещения линейных дефектов. В работе проведено исследование изменения картины распределения дислокаций в области кратера, моделирование процесса теплопереноса и изменение температурных напряжений в кремнии при действии на него лазерного воздействия. В результате сопоставления экспериментальных данных с построенной моделью были получены значения теплового потока для разных мощностей лазера. Значения мощностей для двух типов кремния совпадают, можно сделать вывод о том, что примесь фосфора и бора не оказывает влияния на тепловые свойства исследуемых материалов. Сопоставление экспериментальных результатов с математической моделью позволило определить распределение термоупругих напряжений в области кратера.

Было зафиксировано, что разбег дислокаций увеличивается до определенного значения с возрастанием энергии лазерного излучения $\left(666,7 \frac{\text{mJ}}{\text{cm}^2} \right)$, после чего происходит снижение разбега, связанное со сквозным пробоем образца. В этом случае тепло, идущее на нагрев образца, уходит в подложку.

Обнаружена зависимость расстояний, проходимых дислокациями от нарушенной области, с увеличением количества лазерных импульсов. После-

дующий изотермический отжиг образцов приводит к увеличению расстояний, проходимых дислокациями от нарушенной области, что свидетельствует о наличии остаточных напряжений в кремнии по окончании лазерного воздействия.

Список литературы

1. **Орлов, А. Н.** Введение в теорию дефектов в кристаллах / А. Н. Орлов. – М. : Высшая школа, 1983. – 144 с.
2. **Сангвал, К.** Травление кристаллов / К. Сангвал. – М. : Мир, 1990. – 471 с.
3. **Банишев, А. Ф.** Генерация и накопление дислокаций на поверхности кремния при воздействии импульсно-периодического излучения YAG:Nd лазера / А. Ф. Банишев, В. С. Голубев, А. Ю. Кремнев // Журнал технической физики. – 2001. – Т. 71, № 8. – С. 33–38.
4. **Винценц, С. В.** О порогах возникновения неупругих деформаций в поверхностных слоях Si и GaAs при многократном импульсном лазерном облучении / С. В. Винценц, А. В. Зотеев, Г. С. Плотников // Физика и техника полупроводников. – 2002. – Т. 36, № 8. – С. 902–906.
5. **Готтштайн, Г.** Физико-химические основы материаловедения. / Г. Готтштайн. – М. : Бинум. Лаборатория знаний, 2011. – 400 с.
6. **Кикоин, И. К.** Таблицы физических величин. Справочник. / И. К. Кикоин. – М. : Атомиздат, 1976. – 1008 с.
7. **Банишев, А. Ф.** Разрушения поверхности кремния в твердой фазе при воздействии импульсов YAG:Nd лазера / А. Ф. Банишев, В. С. Голубев, А. Ю. Кремнев // Квантовая электроника. – 1998. – Т. 25, № 10. – С. 941–944.
8. **Шевченко, С. А.** Влияние отжига на дислокационную электропроводность германия // Физика и техника полупроводников. – 2000. – Т. 34, № 5. – С. 543–549.
9. **Бункин, Ф. В.** Термохимическое действие лазерного излучения: фундаментальные проблемы, кинетика, технология / Ф. В. Бункин, Н. А. Кирченко, Б. С. Лукьянчук // Известия АН СССР. Сер. Физическая. – 1987. – Т. 51, № 6. – С. 116.

References

1. Orlov A. N. *Vvedenie v teoriyu defektov v kristallakh* [Introduction into theory of crystalline imperfection]. Moscow: Vysshaya shkola, 1983, 144 p.
2. Sangval K. *Travlenie kristallov* [Etching of crystals]. Moscow: Mir, 1990, 471 p.
3. Banishev A. F., Golubev V. S., Kremnev A. Yu. *Zhurnal tekhnicheskoy fiziki* [Journal of technical physics]. 2001, vol. 71, no. 8, pp. 33–38.
4. Vintsents S. V., Zoteev A. V., Plotnikov G. S. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Semiconductor physics and technology]. 2002, vol. 36, no. 8, pp. 902–906.
5. Gottshytayn G. *Fiziko-khimicheskie osnovy materialovedeniya* [Physical and chemical fundamentals of materials science]. Moscow: Binom. Laboratoriya znaniy, 2011, 400 p.
6. Kikoin I. K. *Tablitsy fizicheskikh velichin. Spravochnik*. [Table of physical quantities. Reference book]. Moscow: Atomizdat, 1976, 1008 p.
7. Banishev A. F., Golubev V. S., Kremnev A. Yu. *Kvantovaya elektronika* [Quantum electronics]. 1998, vol. 25, no. 10, pp. 941–944.
8. Shevchenko S. A. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Semiconductor physics and technology]. 2000, vol. 34, no. 5, pp. 543–549.
9. Bunkin F. V., Kirchenko N. A., Luk"yanchuk B. S. *Izvestiya AN SSSR. Seriya: Fizicheskaya* [Proceedings of the USSR Academy of Sciences. Series: Physical]. 1987, vol. 51, no. 6, p. 116.

Филаретов Сергей Вениаминович
инженер-конструктор, ОАО «Интелтех»,
(Россия, г. Санкт-Петербург,
ул. Кантемировская, 8)

E-mail: filaretow@mail.ru

Filaretov Sergey Veniaminovich
Design Engineer, JSC "Inteltech"
(8 Kantemirovskaya street, Saint
Petersburg, Russia)

Каштанова Елена Алексеевна
аспирант, Ульяновский государственный
университет (Россия, г. Ульяновск,
ул. Льва Толстого, 42)

E-mail: kel_in@mail.ru

Kashtanova Elena Alekseevna
Postgraduate student, Ulyanovsk
State University (42 Lva Tolstogo street,
Ulyanovsk, Russia)

Зубков Евгений Геннадьевич
аспирант, Ульяновский государственный
университет (Россия, г. Ульяновск,
ул. Льва Толстого, 42)

E-mail: w12345673@yandex.ru

Zubkov Evgeniy Gennad'evich
Postgraduate student, Ulyanovsk
State University (42 Lva Tolstogo street,
Ulyanovsk, Russia)

Поляков Андрей Анатольевич
аспирант, Ульяновский государственный
университет (Россия, г. Ульяновск,
ул. Льва Толстого, 42)

E-mail: polyakovandrew@yandex.ru

Polyakov Andrey Anatol'evich
Postgraduate student, Ulyanovsk
State University (42 Lva Tolstogo street,
Ulyanovsk, Russia)

УДК 53.09, 548.4

Филаретов, С. В.

Механизм образования дефектов в монокристаллах кремния при воздействии лазерного излучения / С. В. Филаретов, Е. А. Каштанова, Е. Г. Зубков, А. А. Поляков // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2013. – № 3 (27). – С. 212–222.