

PACS: 71.10.-W

Д.С. Москаль, В.А. Надточий

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕРМОУПРУГИХ НАПРЯЖЕНИЙ
ПО ПОВЕРХНОСТИ МОНОКРИСТАЛЛОВ GaAs,
ОБЛУЧАЕМОЙ ЛАЗЕРНЫМ ИМПУЛЬСОМ

Славянский государственный педагогический университет
ул. Г. Батюка, 19, г. Славянск, 84116, Украина
E-mail: slavgpi@slav.dn.ua, dsmosk@mail.ru

Статья поступила в редакцию 27 июня 2007 года

Исследовано воздействие лазерного импульса с длиной волны $\tau_p = 1$ ns, $\lambda = 0.694$ μ m и энергией ≤ 1 J на поверхность (111) монокристаллического GaAs. Установлено, что минимальные сдвиговые напряжения, при которых активируются процессы точечного дефектообразования, составляют ~ 100 МПа. Численным решением уравнения теплопроводности найдено распределение температур и механических напряжений на поверхности полупроводника для случая импульсного лазерного облучения.

Знание основных физических закономерностей микропластической деформации поверхностных слоев полупроводников при температуре выше и ниже температурного порога хрупкости важно для понимания процессов структурной релаксации в гетеросистемах [1,2]. Одна из характерных особенностей полупроводниковых приборных структур – присутствие внутренних механических напряжений. Эти напряжения могут менять зонный спектр кристалла, подвижность носителей, но наиболее важной является их способность к релаксации, в процессе которой происходит генерация дефектов. Высокого уровня термоупругие напряжения в приповерхностных слоях могут возникать и при мощном лазерном облучении полупроводника, вследствие чего существенно изменяется его кристаллическая структура и практически все физические свойства [3].

В данной работе исследуются механизмы микродеформации приповерхностных слоев GaAs при облучении кристалла миллисекундным лазерным импульсом с гауссовым распределением интенсивности. При таком воздействии вдоль радиуса лазерного пятна на поверхности создаются термоупругие напряжения, которые можно оценить теоретически. Учитывая инерционность тепловых процессов, при кратковременном импульсном лазерном воздействии можно рассматривать термоупругие напряжения, возникающие

лишь в тонком поверхностном слое кристалла [4,5]. При расчетах использовали зависимости величин компонент тензора податливости от температуры T [6], а распределение модуля Юнга для различных направлений в плоскости кристалла определяли по формуле [7]:

$$E = \left(S_{11} - 2(S_{11} - S_{12} - \frac{1}{2}S_{44})(l_1^2 l_2^2 + l_2^2 l_3^2 + l_3^2 l_1^2) \right)^{-1}, \quad (1)$$

где l_1, l_2, l_3 – координаты единичного вектора направления; S_{11}, S_{12}, S_{44} – компоненты тензора упругой податливости, величины которых изменяются с ростом температуры. Используя аналитическую зависимость коэффициента теплового расширения [8], можно определить величину квазиупругой деформации как

$$\varepsilon = \left[3.56(T \ln T - T) \Big|_{T_0}^T - 14.31T \Big|_{T_0}^T \right] \cdot 10^{-6} \quad (2)$$

без учета ее анизотропии в решетке GaAs, имеющей кубическую симметрию. Здесь T_0 – начальная температура поверхности.

С помощью специально разработанной компьютерной программы по найденным значениям E и ε было получено анизотропное распределение напряжений σ на плоскостях (100), (111) и (110) от точечного участка, нагретого до предплавильной температуры (рис. 1). Как видим, максимальные значения термоупругих напряжений действуют в направлениях $\langle 110 \rangle$ (рис. 1,а) и $\langle 111 \rangle$ (рис. 1,б,в). При возрастании температуры поверхности до температуры плавления T_m термоупругие напряжения вдоль указанных направлений достигают значений в пределах 1.2–1.5 GPa. Наибольший интерес представляют расчеты максимальных напряжений, действующих на плоскости (111) вдоль направлений $\langle 111 \rangle$, поскольку они дают возможность оценить предельный уровень лазерного воздействия, не допускающий разрушения кристалла ни в одной из указанных выше плоскостей. В противном случае трещинообразование будет сопровождаться релаксацией напряжений, и расчетные значения σ окажутся недействительными.

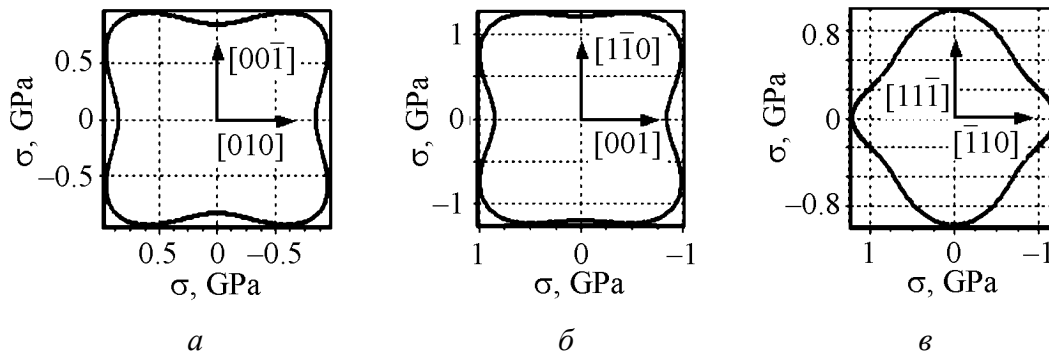


Рис. 1. Распределение максимальных термоупругих напряжений на кристаллографических поверхностях GaAs: а – (100), б – (110), в – (111)

Найдем распределение напряжений σ для разных точек на облучаемой поверхности (111) вдоль направления $[11\bar{1}]$ от центра лазерного пятна. Энергия импульсного лазерного облучения, поглощаемая поверхностью полупроводника, является функцией времени, и поэтому важно установить временные и температурные зависимости распределения возникающих термоупругих напряжений. Для гауссового распределения интенсивности по сечению лазерного луча тепловой поток через элементарную площадку поверхности определяется по формуле [9]:

$$q_r = \frac{3.363W}{\pi r_0^2} \cos^2\left(\frac{\pi r}{2r_0}\right) \text{ при } r \leq r_0, \quad (3)$$

где r – расстояние от центра в пределах лазерного пятна, r_0 – радиус луча, W – полная энергия излучения в импульсе.

Наши расчеты могут быть использованы для одномодового лазера, работающего на основной моде ТЕМ₀₀ [10]. Изменение оптической мощности лазерного излучения с течением времени t можно определить из выражения [9]:

$$P(t) = 6.023 \frac{W}{\tau_p} \exp\left(-\pi \frac{t}{\tau_p}\right) \sin\left(\pi \frac{t}{\tau_p}\right), \quad (4)$$

где τ_p – длительность импульса. Важно отметить, что для миллисекундного импульса свободной генерации максимальное значение мощности, вычисленное по формуле (4), достигается через 0.3 ms. Введение оптической мощности в кристалл приводит к повышению температуры облучаемой поверхности, а ее изменение во времени можно определить из уравнения теплопроводности [11]:

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) + g, \quad (5)$$

где c – удельная теплоемкость, ρ – плотность вещества, z – координата в направлении нормали к поверхности, k – коэффициент теплопроводности, g – тепловая мощность, выделяющаяся в единице объема вещества в результате поглощения светового излучения.

В тонком поверхностном слое толщиной h тепловая мощность $g = hq_r\alpha P$, где α – коэффициент поглощения света поверхностью. В расчетах величину h принимали равной 100 nm, поскольку на такой глубине происходит поглощение лазерного излучения с энергией кванта, превышающей ширину запрещенной зоны полупроводника [4]. Для учета температурной зависимости параметров c , k и α использовали аналитические выражения [8]:

$$c = 350(1 - \exp(-0.00755T)), \quad (6)$$

$$k = 10 + 1300\exp(-0.011T), \quad (7)$$

$$\alpha = 0.7173 - 0.009015\ln T. \quad (8)$$

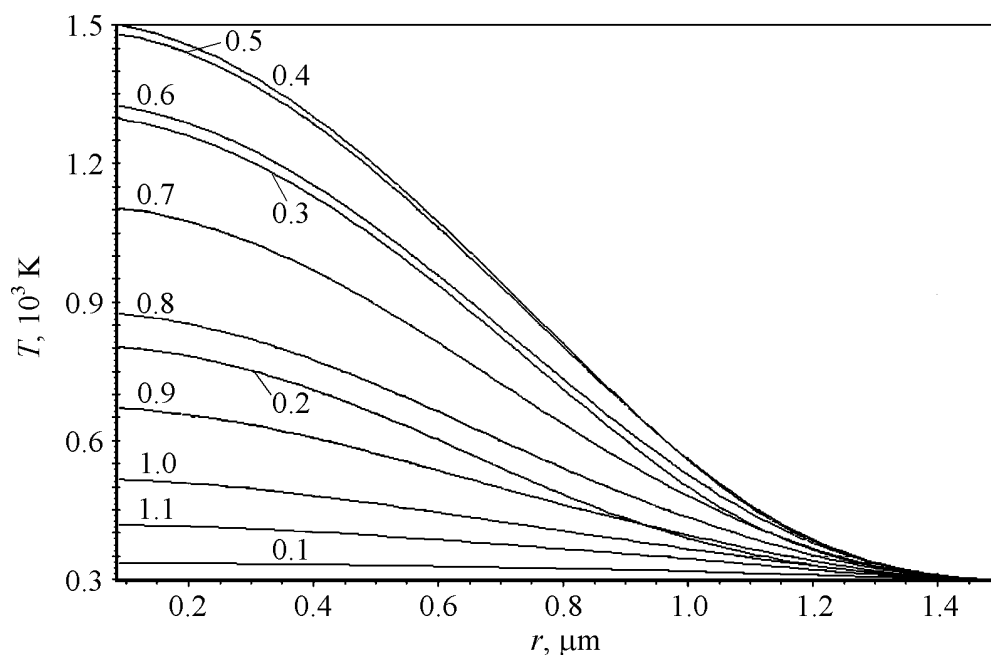


Рис. 2. Распределение температуры вдоль радиуса лазерного пятна в разные моменты времени (числа на прямых, ms) от начала действия импульса

Температуру тыльной поверхности кристалла принимали постоянной и равной T_0 . Решение уравнения (5) методом сеток [11] позволило установить, что пороговое значение плотности энергии q_m при облучении поверхности GaAs миллисекундным лазерным импульсом составляет 50 J/cm^2 , а максимум температуры (рис. 2), как и максимум деформации (2), достигается через 0.4 ms от начала действия импульса. Для исследования структурных изменений, происходящих на поверхности GaAs в результате допорогового лазерного воздействия, мощность лазерных импульсов выбирали меньше q_m .

Методика эксперимента

В эксперименте использовали образцы монокристаллического GaAs марки АГЧТ-1-25-а1. Для получения плоскопараллельных поверхностей образцы шлифовали порошками АСМ-3, АСМ-1 и затем полировали на полировальном круге. После механической обработки образцы промывали в хлороформе, спирте и дистиллированной воде. Нарушенный дефектный слой удаляли химической полировкой в растворе $3 \text{ H}_2\text{SO}_4 : 1 \text{ H}_2\text{O}_2 : 1 \text{ H}_2\text{O}$ [12]. Подготовленные поверхности подвергали лазерному облучению на установке УИГ-1М с рубиновым оптическим квантовым генератором ($\lambda = 0.694 \text{ }\mu\text{m}$). Облучение создавали одиночными импульсами свободной генерации миллисекундной длительности ($\tau_p = 1 \text{ ms}$) при нормальном падении лазерного луча. Энергия в импульсе не превышала 1 J , диаметр облучаемой зоны был порядка 3 mm . Максимальная плотность энергии при гауссовом распределении интенсивности (см. (3)) достигалась в центре лазерного пятна и составляла 50 J/cm^2 . Указанная величина q_m соответствует литературным данным

[13] о пороговом значении плотности энергии миллисекундного импульсного лазерного облучения. Структурные изменения на поверхности и по глубине облучаемой зоны кристалла выявляли путем кратковременного травления в растворе АВ ($2 \text{ H}_2\text{O} : 0.008 \text{ AgNO}_3 : 1 \text{ CrO}_3 : 1 \text{ HF}$) [12].

Результаты и обсуждение

Структуры, полученные в результате облучения GaAs лазерным импульсом с максимальной плотностью энергии q_m , представлены на рис. 3. По характеру структурных нарушений на облученной поверхности можно выделить три зоны: I – область трещинообразования (рис. 3,а), выявленную вблизи центра лазерного пятна; II – зону, в которой преимущественно наблюдаются линии скольжения (рис. 3,б), и периферийную зону III с характерным структурным фоном (рис. 3,в). Вследствие кратковременного химического травления выявилась граница (рис. 3,в), разделяющая дефектную область (слева) и совершенную часть кристалла. Путем теоретических расчетов и графических построений установлено, что возникновение трещин на поверхности происходит при $T > 800 \text{ K}$. При более низких температурах образуются линии скольжения (рис. 3,б) из 60° -ных дислокаций, ориентированных в системе плоскостей типа $\{111\}$ [14].

Особый интерес представляет исследование периферийных областей лазерного пятна (рис. 3,в), так как здесь модификация поверхности не связана с его разрушением и дислокационным скольжением, а обусловлена только структурной перестройкой в системе точечных дефектов. Знание пороговых температур и напряжений, в пределах которых образуются лишь точечные дефекты в приповерхностных слоях, позволяет развивать новый подход к управлению свойствами полупроводников, основанный на формировании в полупроводниковой матрице наноразмерных кластеров [15–17]. В их состав могут входить атомы собственных компонентов, а также собственные точечные дефекты кристаллической решетки.

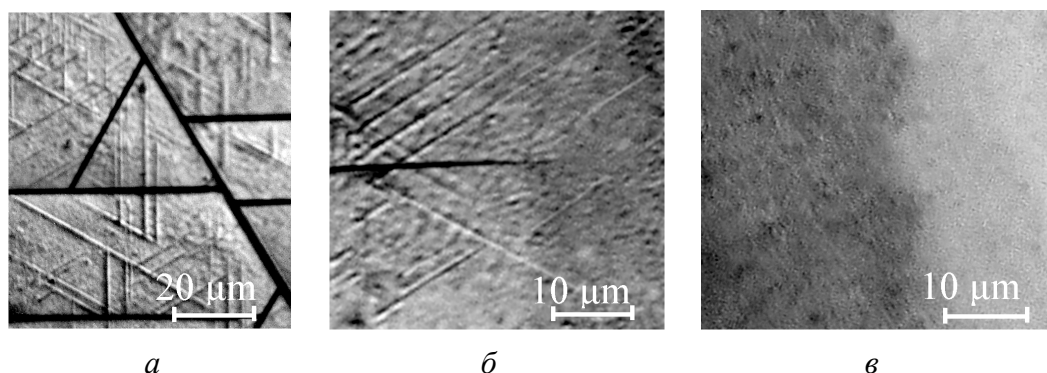


Рис. 3. Характерные структурные области на облученной поверхности GaAs, выявленные на различных расстояниях от центра лазерного пятна: а – область трещинообразования, наблюдаемая в центре облученной поверхности; б – зона с преимущественным скольжением дислокаций; в – периферийная область с границей раздела дефектной и совершенной частей кристалла, левый участок содержит повышенную концентрацию точечных дефектов

Из сопоставления результатов теоретических расчетов (см. рис. 2) и прямых структурных данных (рис. 3) найдено, что температура на границе между II и III зонами в процессе облучения достигает 850 К. Для указанной температуры по формуле (3) была определена граничная плотность энергии лазерного луча $q_b = 25 \text{ J/cm}^2$. При облучении кристаллов GaAs с уровнем флюенса $\leq q_b$ разрушения поверхности не происходит, структурную же перестройку в зоне облучения можно связать с формированием дефектов исключительно точечного типа. Нижней границе начала генерации точечных дефектов соответствует $T \cong 400 \text{ K}$, а найденное по формулам (1) и (2) значение термонапряжения составляет $\sigma \sim 100 \text{ МПа}$, что близко к известным литературным данным [4,18–20].

Выводы

1. В работе установлено, что для модификации поверхности GaAs путем создания лишь точечных дефектов плотность энергии падающего лазерного излучения миллисекундной длительности не должна превышать $q_b \leq 25 \text{ J/cm}^2$.

2. Найдены предельные значения температур и радиальных напряжений, при которых активируются процессы точечного дефектообразования на облучаемой поверхности. Результаты работы могут быть полезными в технологии создания новых атомных структур методом лазерной модификации поверхностных слоев GaAs [15–17].

1. Ю.А. Тхорик, Л.С. Хазан, Пластическая деформация и дислокации несоответствия в гетероэпитаксиальных системах, Наукова думка, Киев (1983).
2. Ж.И. Алферов, УФН **172**, 1068 (2002).
3. В.П. Алехин, Ю.М. Литвинов, Н.Ф. Моисеенко, А.Н. Молоствов, ФХОМ № 2, 32 (1985).
4. П.К. Кашкаров, В.Ю. Тимошенко, Поверхность № 6, 5 (1995).
5. К. Sadra, Appl. Surface Sci. **125**, 325 (1998).
6. Ю.А. Буренков, Ю.М. Бурдуков, С.Ю. Давыдов, С.П. Никаноров, ФТТ **15**, 1757 (1973).
7. Дж. Най, Физические свойства кристаллов, Мир, Москва (1967).
8. D.S. Moskal, L.L. Fedorenko, M.M. Yusupov, M.M. Golodenko, Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics **10**, № 3, 80 (2007).
9. В.А. Надточий, В.П. Алехин, Н.К. Нечволод, Н.Н. Голоденко, Д.С. Москаль, ФХОМ № 4, 9 (2003).
10. Ф. Качмарек, Введение в физику лазеров, Мир, Москва (1981), с. 45–48.
11. В.О. Надточій, М.К. Нечволод, М.М. Голоденко, Д.С. Москаль, Вісник Харківського національного університету, серія «Фізика» № 601, в. 8, 130 (2005).
12. З.Ю. Готра, Технология микроэлектронных устройств, Радио и связь, Москва (1991).
13. С.С. Варшава, I.B. Курило, В.І. Кучма, УФЖ **36**, 1521 (1991).
14. Ю.А. Концевой, Ю.М. Литвинов, Э.А. Фаттахов, Пластичность и прочность полупроводниковых материалов и структур, Радио и связь, Москва (1982).

15. М.Г. Мильвидский, В.В. Чалдышев, ФТП **32**, 513 (1998).
16. D. Moskal, V. Nadtochiy, N. Golodenko, Functional Materials **13**, 100 (2006).
17. С.В. Винценц, А.В. Зайцева, В.Б. Зайцев, Г.С. Плотников, ФТП **38**, 257 (2004).
18. А.З. Грасюк, И.Г. Зубарев, ФТП **3**, 677 (1969).
19. M. Bertolotti, G. Vitali, Current topics in materials science, **8**, North-Holland publ. company, Amsterdam (1982).
20. К.К. Джаманбалин, А.Г. Дмитриев, Э.Н. Сокол-Номоконов, Ю.И. Уханов, ФХОМ № 2, 20 (1990).

D. Moskal, V. Nadtochiy

DISTRIBUTION OF THERMOELASTIC STRESSES IN SURFACE OF GaAs SINGLE CRYSTALS IRRADIATED BY LASER PULSE

Action of the laser pulse ($\tau_p = 1$ ms, $\lambda = 0.694$ μm and energy ≤ 1 J) on the surface (111) of GaAs single crystal has been investigated. It was established that the process of defects formation is activated at shear strain up to ~ 100 MPa. Temperature and strain fields were determined by numerical solution of heat conduction equation for the case of pulsed laser irradiation of semiconductor surface.

Fig. 1. Distribution of the maximum thermoelastic stresses in different crystallographic surfaces of GaAs: *a* – (100), *b* – (110), *c* – (111)

Fig. 2. Temperature distribution along the radius of laser spot at different time moments (numerals on the curves, ms) of pulse action

Fig. 3. Characteristic structures formed on the GaAs surface after irradiation. Image taken at different distances from the laser spot center: *a* – cracking zone in the central region; *b* – dislocation sliding zone; *c* – periphery zone with the boundary between defective and undisturbed parts, the left part includes increased concentration of point defects