

连续激光诱导 Zn/InP 掺杂过程中 温度分布的解析计算*

田洪涛[†] 陈 朝

(厦门大学物理学系, 厦门 361005)

(2002 年 4 月 7 日收到, 2002 年 6 月 15 日收到修改稿)

在实验的基础上, 分析表面蒸发 Zn 的 InP 样品在连续激光诱导下掺杂 Zn 过程. 在一维热传导问题的第三类边界条件下, 给出激光辐照有限厚双层材料 Zn/InP 温度分布的一种直观简洁的解析形式.

关键词: 激光诱导掺杂, Zn/InP, 温度分布

PACC: 4260, 6170T, 4430, 0420J

1. 引 言

激光与材料相互作用加热时, 功率和加热时间容易控制, 加热方向性好, 能量集中, 工艺条件要求低且与常规的半导体光刻工艺兼容, 因而引起人们的关注. III-V 族化合物半导体在集成光学、光电子学等领域有重要应用, 对 III-V 族化合物半导体进行激光诱导掺杂研究有可能解决 III-V 族化合物半导体在闭管扩 Zn 成结过程中遇到的工艺复杂、成本高、时间长等问题. 20 世纪 90 年代以来, 日本的一些公司开展了在硅衬底上进行固态源激光诱导掺杂^[1]. 文献 [2] 报道在 GaAs 上进行固态源激光诱导扩散研究工作. 我们用 Nd:YAG 连续激光(1.06 μm)辐照在表面蒸发沉积 Zn 薄膜的 n-InP 片上, 用激光诱导的方法实现 Zn 在 InP 中掺杂, 形成平整的 pn 结. 在 n-InP 片表面得到受主浓度分布均匀、高掺杂(约 $8 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$)、浅的(约 $1 \mu\text{m}$)的 p-InP 层. 用电化学 C-V 测量方法和扫描电子显微镜对辐照后的样品进行分析研究, 结果表明激光辐照功率、辐照时间等工艺参数对结深、浓度分布都有影响.

激光诱导半导体掺杂是一个与温度密切相关的复杂过程. 在理论上模拟和计算分析这类复杂过程对研究连续激光诱导 Zn/InP 掺杂工艺有指导作用,

由于实验过程中金属-半导体分界面的温度很难直接测量, 计算不同的工艺条件下分界面附近的温度分布对于分析掺杂机理有重要意义. 处理固态源激光诱导掺杂会遇到激光对双层材料加热的问题, 已有大量文献对这类问题进行过研究, 考虑的模型大都是前面一层有限厚, 后面一层为无限厚的情况. 关于有限厚双层材料结构的温度分布解析形式, 通常考虑的都是第一类边界条件^[3,4]. 一般认为第三类边界条件下热场分布的解析形式非常复杂^[4], 通常采用数值方法求解. 基于我们的实验工作^[5], 本文提出更符合实际情况的边界条件, 给出温度分布的一种直观简洁解析表达形式. 确定温度分布有助于优化激光功率、辐照时间等工艺参数. 类似的问题在用激光加热形成金属/半导体欧姆接触过程中也存在.

2. 物理模型

激光诱导掺杂的示意图如图 1 所示. Zn 膜厚度为 b_1 , 衬底 InP 厚度为 $b_2 - b_1$, 激光入射方向为 x 轴. 激光束辐照材料表面, 一部分反射, 其余部分被材料吸收. 入射光子只对金属中自由电子起作用, 由于金属中自由电子的密度较大, 入射光在金属表面附近约 10nm 的表层内被吸收. 自由电子吸光子能量后, 通过碰撞在极短的时间内将能量传递给晶格,

* 国家自然科学基金(批准号 69887002)资助的课题.

[†]E-mail: htian@yanan.xmu.edu.cn

使金属表面层温度迅速升高. 由于 Zn 是热的良导体, 热量迅速向薄膜内扩散, 热量继续传递给 InP, Zn/InP 界面处温度升高, 实现 Zn 掺入 InP. 为了得到平整、均匀的掺杂, 要求激光束能量分布. 设激光功率密度为 Q , Zn 表面的反射系数为 $R(\lambda)$. 反射系数与波长 λ 有关, 所选用的激光波长通常在红外区. 例如, 我们采用 Nd:YAG 连续激光, 激光波长为 $1.06\mu\text{m}$. 实验过程中调节激光器的功率和辐照时间, 使金属 Zn 表面温度不超过熔点. 化合物半导体材料高温下易分解, InP 衬底不允许过高的温度 ($\leq 700^\circ\text{C}$) 在实验温度变化范围内可以不考虑 Zn 和 InP 的比热、热传导系数、密度随温度变化. 由于激光辐照区域与样品的横向尺寸可相比拟且远比样品的厚度大, 忽略样品的边缘效应, 所以按一维处理.

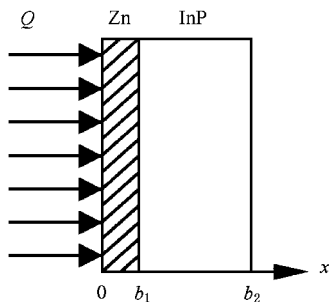


图 1 激光诱导掺杂示意图

3. 激光束加热固体的微分方程

作温度坐标平移 $\bar{u}(x, t) = u(x, t) + T_0$, 其中 T_0 为室温, t 为时间, x 为深度. 对于波长为 $1.06\mu\text{m}$ 的入射光金属 Zn 的吸收系数高达 $10^5 - 10^6 \text{cm}^{-1}$, 进入材料内部的激光能量在 Zn 表面极小的深度内(约 10nm) 被吸收, 而 Zn 的厚度在微米量级, 故可近似认为只有表面热源. 视 Zn 膜/InP 衬底为一个整体, 描述固体热传导微分方程为

$$\alpha(x)\rho(x)\frac{\partial u(x, t)}{\partial t}$$

$$= \frac{\partial}{\partial x} \left[k(x) \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right] \quad 0 < x < b_2, \quad (1)$$

$$\alpha(x) = \begin{cases} C_1 & 0 < x < b_1, \\ C_2 & b_1 < x < b_2, \end{cases}$$

$$\rho(x) = \begin{cases} \rho_1 & 0 < x < b_1, \\ \rho_2 & b_1 < x < b_2, \end{cases}$$

$$k(x) = \begin{cases} k_1 & 0 < x < b_1, \\ k_2 & b_2 < x < b_1, \end{cases} \quad (2)$$

其中 C_1, ρ_1, k_1 和 C_2, ρ_2, k_2 分别是 Zn 和 InP 的比热、密度、热传导系数.

4. 边界条件与初始条件

金属 Zn 表面的热辐射和对流所造成的热损失功率密度与激光辐照功率密度相比很小, 均忽略不计. 在 InP 的背面(即 $x = b_2$) 处按牛顿冷却定律与环境交换热量, h 为热交换系数.

$$\frac{\partial u(0, t)}{\partial x} = - \frac{[1 - R(\lambda)]Q}{k_1}, \quad (3a)$$

$$k_2 \frac{\partial u(b_2, t)}{\partial x} + hu(b_2, t) = 0. \quad (3b)$$

Zn/InP 界面 $x = b_1$ 处温度连续, 热流连续(但温度的一阶导数不连续). 记 b_1 的无限小左邻域为 $b_1 - 0$, b_1 的无限小右邻域为 $b_1 + 0$ (以下同),

$$u(b_1 - 0, t) = u(b_1 + 0, t), \quad (4a)$$

$$k_1 \frac{\partial u(b_1 - 0, t)}{\partial x} = k_2 \frac{\partial u(b_1 + 0, t)}{\partial x}. \quad (4b)$$

Zn 膜/InP 衬底的初始温度与室温相同

$$u(x, 0) = 0 \quad 0 < x < b_2. \quad (5)$$

5. 计算方法

(4b) 和 (4a) 式表明 $x = b_1$ 两侧温度的分布函数形式不同, 这类问题可分段构造满足方程和边界条件的解^[6]. 为了使边界条件(3a) 齐次化, 作如下代换:

$$u(x, t) = \begin{cases} u(x, t) - \frac{[1 - R(\lambda)]Q}{k_1} x + \frac{[1 - R(\lambda)]Q(hb_1k_2 - hb_1k_1 + k_1k_2 + hk_1b_2)}{hk_1k_2} & 0 < x < b_1, \\ u(x, t) - \frac{[1 - R(\lambda)]Q}{k_2} x + \frac{[1 - R(\lambda)]Q(k_2 + hb_2)}{hk_2} & b_1 < x < b_2. \end{cases} \quad (6)$$

使(3a) 齐次化, 得到待定函数 $u(x, t)$ 的定解问题

$$\alpha(x)\rho(x)\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[k(x)\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} \right] \quad 0 < x < b_2, \quad (7)$$

$$\frac{\partial u(0,t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial u(b_2,t)}{\partial x} + \frac{h}{k_2} u(b_2,t) = 0, \quad (8)$$

$$u(b_1-0,t) = u(b_1+0,t), \quad k_1 \frac{\partial u(b_1-0,t)}{\partial x} = k_2 \frac{\partial u(b_1+0,t)}{\partial x}, \quad (9)$$

$$u(x,0) = \begin{cases} \frac{[1-R(\lambda)]Q}{k_1} x - \frac{[1-R(\lambda)]Q(hb_1k_2 - hb_1k_1 + k_1k_2 + hk_1b_2)}{hk_1k_2} & 0 < x < b_1, \\ \frac{[1-R(\lambda)]Q}{k_2} x - \frac{[1-R(\lambda)]Q(k_2 + hb_2)}{hk_2} & b_1 < x < b_2. \end{cases} \quad (10)$$

假设 $u(x,t)$ 有形如 $u(x,t) = X(x)T(t)$ 的解, 代入(7)–(9)式, 分离变量后得

$$T'(t) + \omega^2 T(t) = 0 \quad 0 < t < +\infty, \quad (11)$$

$$[k(x)X'(x)] + \omega^2 \alpha(x)\rho(x)X(x) = 0 \quad 0 < x < b_2, \quad (12)$$

$$X'(0) = 0, \quad X'(b_2) + \frac{h}{k_2} X(b_2) = 0, \quad (13)$$

$$X(b_1-0) = X(b_1+0), \quad (14)$$

$$k_1 X'(b_1-0) = k_2 X'(b_1+0). \quad (15)$$

由 Sturm-Liouville 本征值理论^[7]可知, 边界条件(13)具有本征值无穷序列 $0 < \omega_1 < \omega_2 < \dots < \omega_n < \dots$ 及与之相应的具有权函数 $\alpha(x)\rho(x)$ 在区间 $0 \leq x \leq b_2$ 上正交的无穷函数序列 $X_1(x), X_2(x), \dots, X_n(x), \dots$

方程(12)满足(13)–(14)式的解具有形式

$$X_n(x) = \begin{cases} \frac{\cos \frac{\omega_n}{a_1} x}{\cos \frac{\omega_n}{a_1} b_1} & 0 < x < b_1, a_1 = \sqrt{\frac{k_1}{C_1 \rho_1}}, \\ \frac{\frac{\omega_n}{a_2} \cos \frac{\omega_n}{a_2} (b_2 - x) + \frac{h}{k_2} \sin \frac{\omega_n}{a_2} (b_2 - x)}{\frac{\omega_n}{a_2} \cos \frac{\omega_n}{a_2} (b_2 - b_1) + \frac{h}{k_2} \sin \frac{\omega_n}{a_2} (b_2 - b_1)} & b_1 < x < b_2, a_2 = \sqrt{\frac{k_2}{C_2 \rho_2}}. \end{cases} \quad (16)$$

由于(16)式满足条件(15), 得到确定本征值的方程

$$-k_1 \operatorname{tg} \frac{\omega b_1}{a_1} = k_2 \frac{\frac{\omega}{a_2} \sin \frac{\omega}{a_2} (b_2 - b_1) - \frac{h}{k_2 a_2} \cos \frac{\omega}{a_2} (b_2 - b_1)}{\frac{\omega}{a_2} \cos \frac{\omega}{a_2} (b_2 - b_1) + \frac{h}{k_2} \sin \frac{\omega}{a_2} (b_2 - b_1)}. \quad (17)$$

超越方程(17)通常用数值方法求解. 容易看出(11)式的解形式为 $T(t) \sim \exp(-\omega_n^2 t)$. 这样, $u(x,t)$ 的解可写成

$$u(x,t) = \sum_{n=1}^{+\infty} \alpha_n \exp(-\omega_n^2 t) X_n(x). \quad (18)$$

将(18)式代入(10)式, 两边同乘 $\alpha(x)\rho(x)X_n(x)$ 并积分, 利用带权函数 $\alpha(x)\rho(x)$ 的无穷函数序列 $\{X_n(x)\}$ 在 $[0, b_2]$ 上的正交性确定系数

$$\alpha_n = \frac{1}{N_n} \int_0^{b_2} \alpha(x)\rho(x)u(x,0)X_n(x) dx, \quad (19)$$

其中 $N_n = \int_0^{b_2} \alpha(x)\rho(x)X_n^2(x) dx$,

$$\tilde{u}(x,t) = \begin{cases} T_0 - \frac{[1 - R(\lambda)]Q}{k_1}x + [1 - R(\lambda)]Q\beta_1 + \sum_{n=1}^{+\infty} a_n \exp(-\omega_n^2 t) \cos\left(\frac{\omega_n x}{a_1}\right) \gamma \cos\left(\frac{\omega_n b_1}{a_1}\right) & 0 < x < b_1, \quad (20a) \\ T_0 - \frac{[1 - R(\lambda)]Q}{k_2}x + [1 - R(\lambda)]Q\beta_2 + \sum_{n=1}^{+\infty} a_n \exp(-\omega_n^2 t) \frac{\frac{\omega_n}{a_2} \cos\left(\frac{\omega_n}{a_2}(b_2 - x)\right) + \frac{h}{k_2} \sin\left(\frac{\omega_n}{a_2}(b_2 - x)\right)}{\frac{\omega_n}{a_2} \cos\left(\frac{\omega_n}{a_2}(b_2 - b_1)\right) + \frac{h}{k_2} \sin\left(\frac{\omega_n}{a_2}(b_2 - b_1)\right)} & b_1 < x < b_2, \quad (20b) \end{cases}$$

其中

$$\beta_1 = \frac{hb_1 k_2 - hb_1 k_1 + k_1 k_2 + hk_1 b_2}{hk_1 k_2} \quad \beta_2 = \frac{k_2 + hb_2}{hk_2}$$

6. 讨 论

(16)(20a)和(20b)式表明,在 $C_1 = C_2, \rho_1 = \rho_2, k_1 = k_2$ 时(即由双层材料过渡到匀质材料时)并不能得到边值条件(3)(4)下匀质板的温度分布.这是因为构造微分方程(12)满足边值条件(14)(15)的解采用了形如(16)式的分段连续的函数形式,其一阶导数不连续,两段的函数形式不同.而由边值条件(3)(4)得到的匀质材料温度分布函数在整个板内连续可微,具有统一的表达式.由此,不能将匀质材料的问题视为本文所讨论问题的特例.

Zn 和 InP 的有关热力学数据如下:密度 $\rho_{Zn} = 7.14 \times 10^3 \text{ kg/m}^3, \rho_{InP} = 4.78 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$;比热 $C_{Zn} = 422 \text{ J/(kg} \cdot \text{K)}, C_{InP} = 153 \text{ J/(kg} \cdot \text{K)}$;热传导系数 $k_{Zn} = 89 \text{ W/(m} \cdot \text{K)}, k_{InP} = 24 \text{ W/(m} \cdot \text{K)}$.选用波长 $\lambda = 1.06 \mu\text{m}$ 的 Nd:YAG 连续激光,表面光洁的 Zn 反射率一般为 $R = 0.86$,而实验过程中蒸发沉积的 Zn 膜较为疏松,取经验值 $R = 0.68$.热交换系数 h 取空气自然对流时的数值 $h = 12 \text{ W/(m} \cdot \text{K)}$.代入实验参数 $b_1 = 1 \mu\text{m}, b_2 = 400 \mu\text{m}$ 计算结果表明(20a)和(20b)式具有很好的收敛性, t 越大,级数收敛越快.在 $t > 0.009 \text{ s}$ 时,可以取 $n = 1$ 的项而略去 $n > 1$ 的项,其误差不超过 1%.由(20a)式可得表面温度($x = 0$ 时)

$$u(0,t) = T_0 + [1 - R(\lambda)]Q\beta_1 + a_1 \exp(-\omega_1^2 t) \gamma \cos\left(\frac{\omega_1 b_1}{a_1}\right),$$

分界面处的温度($x = b_1$ 时)

$$u(b_1,t) = T_0 + [1 - R(\lambda)]Q\left(\beta_1 - \frac{b_1}{k_1}\right) + a_1 \exp(-\omega_1^2 t).$$

另外,温度梯度、加热速度也可以由(20a)和(20b)式

进一步求得.

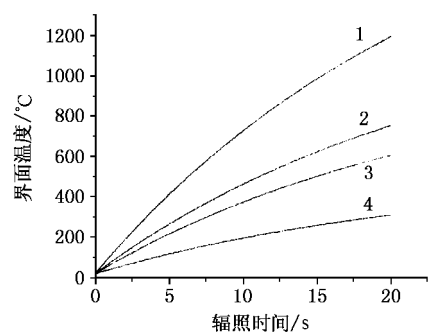


图 2 界面温度与时间的关系(曲线 1—4 的 P 分别为 8000 5000 4000 2000 W/m^2)

从图 2 可以看出 Zn/InP 界面温度随辐照功率和辐照时间而改变.当辐照功率较低时,温度随时间升高较慢;当辐照功率较高时,温度随时间升高非常快.从实验的角度看,为了很好的控制温度选择适当的辐照功率,通过延长辐照时间是合理的选择.不考虑连续激光与材料作用时反常温度涨落现象^[8],温度低于 700°C 时,本文的结果与考虑材料热力学参数随温度变化后的非线性热传导方程的数值解基本相符^[9].分界面温度低于两种材料的共熔点温度时,不发生固液相变,微分方程(1)对热传导的描述是有效的.

Zn/InP 分界面附近的温度影响掺杂机理,目前还无法确定是液相外延,固相外延,还是合金过程.掺杂过程的详细机理有待进一步研究,还需更多的实验数据支持.材料本身的性质决定了选用低功率密度的激光,故不涉及固液两相温度演化的复杂情况^[10].本文的模型在发生相变之前是良好的近似.并可外推加热至熔点所需的辐照时间、辐照功率.图 2 的高温区是由上述计算结果外推得到的,由于相变和非线性的影响,可能与实际情况存在较大的差

异.为了改善诱导过程的光吸收和可控性,在激光辐照之前,通常将衬底预热至一定温度.

7. 结 论

连续激光诱导 InP 的 Zn 掺杂实验中金属-半导体分界面附近的温度是影响掺杂浓度、掺杂深度的

一个重要因素.本文在适当的近似下给出温度分布的解析函数,可以直接在普通的 PC 机上计算任意给定时刻及任意位置的温度.也可以根据预期的温度分布选择合理激光功率、辐照时间等这些重要的实验参数.本文的结果对确定双层材料的电子束、离子束表面处理的热场分布也有参考价值.

- [1] Fokumura K S and Kaneka S 1990 *J. Appl. Phys.* **67** 2359
- [2] Ye Y T and Li Z D 1997 *China Laser* **24** 237 (in Chinese) [叶玉堂、李忠东 1997 中国激光 **24** 237]
- [3] Lu J and Ni X W 1996 *Physics of laser beam interactions with materials* (Beijing :Machine Industrial Press)p32(in Chinese) [陆建、倪晓武 1996 激光与材料相互作用物理学(北京:机械工业出版社)第 32 页]
- [4] Ozisik M N 1983 *Heat Conduction*(Beijing :Higher Education Press)p316 - 326(in Chinese) [M.N. 奥齐西克 著 1983 热传导(北京:高等教育出版社)第 316 - 326 页]
- [5] Cai Z H *et al* 2002 *Chinese Journal of Quantum Electronics* **19** 467 (in Chinese) [蔡志华等 2002 量子电子学报 **19** 467]
- [6] Zeng J Y 1997 *Quantum mechanics I* (second edition) (Beijing : Science Press)p107(in Chinese) [曾谨言著 1997 量子力学 I 第二版(北京:科学出版社)第 107 页]
- [7] Xue X H 1995 *Mathematical physics partial differential equations* (Hefei :China Science and Technology University Press)p117(in Chinese) [薛兴恒编著 1995 数学物理偏微分方程(合肥:中国科学技术大学出版社)第 117 页]
- [8] Wei X Q , Zheng Q W *et al* 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 2246(in Chinese) [魏学勤、郑启五等 1999 物理学报 **48** 2246]
- [9] Fu R W , Cai Z H , Chen C 2000 *Proceedings of SPIE* **4086** 199
- [10] Zhang D M , Li Z H *et al* 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 915(in Chinese) [张端明、李智华等 2001 物理学报 **50** 915]

The analytical calculation of temperature distribution in doping processes of Zn/InP induced by continuous wave laser^{*}

Tian Hong-Tao Chen Chao

(Department of Physics , Xiamen University , Xiamen 361005 , China)

(Received 7 April 2002 ; revised manuscript received 15 June 2002)

Abstract

Based on the experiment , the process of doping of Zn/InP Induced by continuous wave laser was analysed. A brief visual analytical form of temperature distribution on a finite double-material irradiated by a continuous wave laser is presented under the third boundary condition in one-dimensional heat conduction.

Keywords : induced doping by laser , Zn/InP , temperature distribution

PACC : 4260 , 6170T , 4430 , 0420J

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No.69887002).