

## ЛИТЕРАТУРА

1. Александров Л. Н., Коган А. Н., Бочкова Р. В., Тростина Н. П. Изучение методом Монте-Карло влияния несовершенств поверхности подложки на кинетику роста и испарения полупроводниковых пленок // Кристаллография.—1985.—Т. 30, вып. 2.
2. Aleksandrov L. N., Kogan A. N., Tikhonova N. P. Study of the peculiarities of films growth from molecular beams by the method of simulation // Phys. Stat. Sol. (a).—1985.—V. 92.—P. 109.
3. Коган А. Н., Бочкова Р. В. Применение методов моделирования на ЭВМ к изучению процессов роста пленок // Получение и свойства тонких пленок.—Киев: ИИМ АН УССР, 1982.
4. Гиваргизов Е. И. О механизме роста эпитаксиальных слоев германия из газовой фазы // ФТТ.—1963.—Т. 5, вып. 4.
5. Александров Л. Н., Коган А. Н., Бочкова Р. В. и др. Изучение влияния химических реакций на формирование структуры полупроводниковых пленок методом Монте-Карло // VII Конф. по процессам роста и синтеза полупроводниковых кристаллов и пленок: Тез. докл.—Новосибирск: ИНХ СО АН СССР, 1986.
6. Nishizawa J., Nihira H. Mechanisms of chemical vapor deposition of silicon // J. Cryst. Gr.—1978.—V. 45.—P. 82.
7. Аридзуми Т. Выращивание тонких пленок на поверхности полупроводника и их свойства // Киндзоку хемэн гидзюцу.—1981.—Т. 32, № 8.
8. Кузнецов Ф. А., Буждан Я. М., Федорова Г. В., Кузнецов Г. Н. Термодинамический анализ условий кристаллизации карбида кремния // Процессы роста и синтеза полупроводниковых кристаллов и пленок.—Новосибирск: Наука, 1975.—Ч. 1.
9. Карапетьянц М. X. Введение в теорию химических процессов.—М.: Наука, 1976.
10. Мюллер-Крумбхаар Х. Моделирование роста кристаллов методом Монте-Карло // Методы Монте-Карло в статистической физике.—М.: Мир, 1982.
11. Чернов А. А., Рузайкин М. А. Равновесные адсорбционные слои на поверхностях GaAs (111) и Si (111) при химической кристаллизации из газовой фазы // Рост кристаллов.—М.: Наука, 1980.—Т. XIII.
12. Classen W., Bloem J. Rate-determining reaction and surface in CVD of silicon. II. The  $\text{SiH}_2\text{Cl}_2 - \text{H}_2 - \text{N}_2 - \text{HCl}$ -system // J. Cryst. Gr.—1980.—V. 50, N 4.—P. 807.
13. Лютович А. С., Харченко В. В. Физико-химические аспекты эпитаксиального роста пленок монокристаллических полупроводников из газовой фазы // Кристаллизация тонких пленок.—Ташкент: ФАН УзССР, 1970.

Поступила в редакцию 25 апреля 1987 г.

УДК 539.213 : 536.75

Л. Н. АЛЕКСАНДРОВ, В. Ю. БАЛАНДИН, А. В. ДВУРЕЧЕНСКИЙ,  
О. А. КУЛЯСОВА  
(Новосибирск)

### ПЛАВЛЕНИЕ СТРУКТУР КРЕМНИЙ НА ИЗОЛЯТОРЕ НАНОСЕКУНДНЫМ ЛАЗЕРНЫМ НАГРЕВОМ

Формирование монокристаллических слоев кремния на неориентирующих диэлектрических подложках посредством импульсной лазерной перекристаллизации слоистых структур с кристаллическими окнами Si — одна из важных проблем микроэлектроники [1].

В связи с этим необходимо изучение условий и причин, влияющих на рост монокристаллов на  $\text{SiO}_2$ . Различие тепловых и оптических свойств кремния и диэлектрической прослойки вызывает неравномерное плавление слоистой структуры под воздействием излучения однородного по сечению импульса лазера. Благоприятные условия для латерального роста монокристалла на  $\text{SiO}_2$  реализуются в том случае, когда полностью плавится поли-Si-слой и часть монокристаллической затравки, а прослойка  $\text{SiO}_2$  остается твердой. Исследование условий для реализации такой ситуации на основе модельного расчета и является целью настоящей работы.

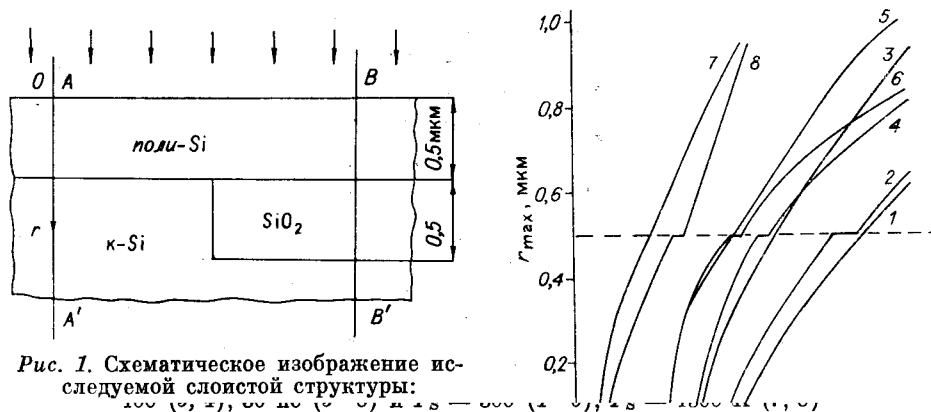


Рис. 1. Схематическое изображение исследуемой слоистой структуры:

**Постановка задачи и метод решения.** Объектом исследования выбрана структура, схематически изображенная на рис. 1. Нагрев осуществлялся рубиновым лазером в наносекундном диапазоне длительности. Расчет проводился для слоистой структуры по сечениям  $AA'$  и  $BB'$ , достаточно удаленным друг от друга, так что боковым теплопереносом можно пренебречь. Для каждого из этих сечений задача одномерна и описывается системой уравнений, включающей уравнение теплопроводности и обобщенную логическую функцию фазовых переходов [2]:

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial r} \left( k \frac{\partial T}{\partial r} \right) + P(r, t) + Q(S);$$

$$S = S(T, \Phi),$$

здесь  $Q(S)$  — функция теплот фазовых переходов;  $S(T, \Phi)$  показывает, в каком месте образца идет фазовый переход, между какими фазами (параметр  $\Phi$ ) и по каким кинетическим законам;  $c$ ,  $\rho$ ,  $k$  — теплоемкость, плотность и теплопроводность (Si и  $SiO_2$ ), зависящие от температуры и фазы;  $P(r, t)$  — функция источников тепла, производимых лучом лазера:

$$P(r, t) = \frac{E \sqrt{\beta}}{\sqrt{\pi}} (1 - R) \alpha \exp(-\alpha r) \exp(-\beta(t - t_0)^2),$$

где  $E$  — плотность энергии пучка;  $r$  — расстояние, отсчитываемое от поверхности в глубь образца;  $\alpha = \alpha(\Phi)$ ;  $R = R(\Phi)$  — коэффициенты поглощения и отражения света рубинового лазера;  $\beta = 4 \ln 2 / \Gamma^2$  и  $t_0 = 1,2\Gamma$  характеризуют начало и длительность импульса;  $\Gamma$  — длительность импульса.

Граничные условия:

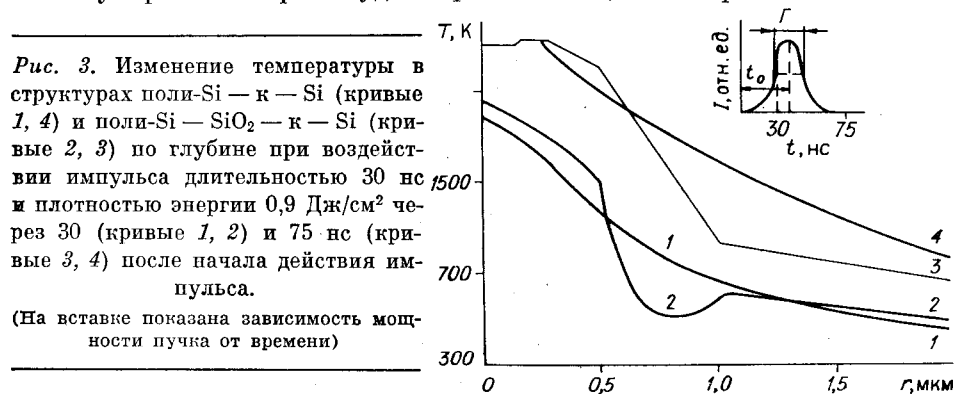
$$\left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=0} = 0; \quad T|_{r=d} = T_s,$$

где  $d = 10$  мкм — толщина рассматриваемого слоя;  $T_s$  — температура окружающей среды. Начальные условия:  $T|_{t=0} = 0$ .

В расчетах коэффициенты отражения и поглощения для кристаллического Si брались:  $R = 0,54$ ,  $\alpha = 2 \cdot 10^4$  см<sup>-1</sup>, соответственно для жидкого Si:  $R = 0,72$ ,  $\alpha = 10^6$  см<sup>-1</sup> [3]. Слой  $SiO_2$  считался абсолютно прозрачным ( $\alpha = 0$ ,  $R = 0$ ). Энергией, идущей на испарение кремния с поверхности и на тепловое излучение, пренебрегали вследствие ее малости по

нового лазера с длительностью импульса 10—500 нс и плотностью энергии пучка 0,1—3 Дж/см<sup>2</sup> при  $T_s = 300—1300$  К.

**Полученные результаты.** Зависимость максимальной глубины плавления каждой из структур поли-Si — к — Si, поли-Si — SiO<sub>2</sub> — к — Si по сечениям AA' и BB' от плотности энергии при различных  $T_s$  и  $\Gamma$  показана на рис. 2. Видно, что при больших длительностях импульса (кривые 1 и 2) глубина плавления неодинакова по образцу. В то время как в сечении BB' фронт плавления достиг прослойки SiO<sub>2</sub> и вызвал ее плавление, в сечении AA' слой поли-Si еще полностью не расплавился. В этих условиях невозможно равномерное плавление к — Si-слоя и рост монокристалла над SiO<sub>2</sub> без плавления диэлектрического слоя. Слой SiO<sub>2</sub>, имеющий коэффициент теплопроводности в 5 раз меньше, чем у к — Si, служит теплоизолирующей прослойкой, препятствующей оттоку тепла в подложку. С уменьшением длительности импульса разность между потоками тепла в подложку по сечениям AA' и BB' за время процесса плавления становится меньше, вследствие чего неравномерность проплавления структуры уменьшается (см. рис. 2, кривые 3, 4). При  $\Gamma = 30$  нс (см. рис. 2, кривые 5, 6) появляется узкий интервал плотностей энергий  $\Delta E$  (шириной  $\sim 0,05$  Дж/см<sup>2</sup>), в котором плавится часть монокристаллического слоя, а прослойка SiO<sub>2</sub> остается твердой. Таким образом, выполняется условие для роста к — Si на SiO<sub>2</sub>. Однако в этом случае  $\Delta E$  мало по сравнению с точностью задания плотности энергии в луче лазера. Как показывают расчеты, дальнейшее уменьшение не приводит к существенному возрастанию  $\Delta E$ . Уменьшить поток тепла в подложку позволяет увеличение температуры окружающей среды. Для  $T_s = 1300$  К при полном плавлении поли-Si-слоя над SiO<sub>2</sub> в сечении AA' к — Si плавится на глубину  $\sim 0,1$  мкм (см. рис. 2, кривые 7, 8), что позволяет эффективно использовать затравку для роста слоя к — Si. В этом случае  $\Delta E$  определяется температурой плавления SiO<sub>2</sub> и к — Si. Сравнительный анализ изменения температуры по сечениям AA' и BB' (рис. 3) позволяет объяснить этот результат. Локальный минимум на кривой 2 образуется за счет прозрачности слоя SiO<sub>2</sub>, который пропускает энергию пучка света в более глубокие слои кремния, а сам SiO<sub>2</sub> нагревается только за счет теплопроводности. В результате профили поглощения энергии в структурах поли-Si — к — Si и поли-Si — SiO<sub>2</sub> — к — Si существенно отличаются. Этим и объясняется возможность более глубокого плавления структуры по AA', чем по BB', при уменьшении длительности импульса и увеличении температуры подложки образца, так как с уменьшением различия между потоками энергии в подложку основную роль в нагреве будет играть поглощение энергии света.



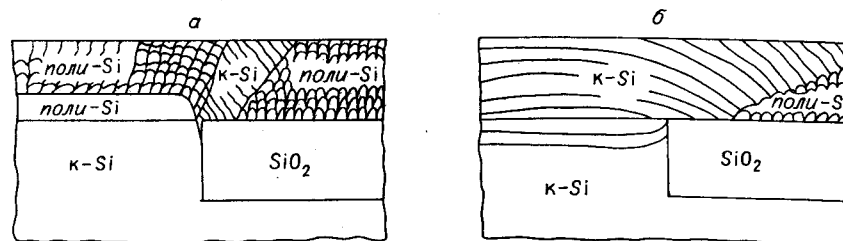


Рис. 4. Схематическое изображение структуры, реализующейся после импульсной перекристаллизации при  $T_s = 300$  (а) и  $T_s = 1300$  К (б)

При комнатной температуре подложки и энергии пучка, вызывающей только плавление поли-Si-слоя, лежащего на прослойке  $\text{SiO}_2$ , температура на глубине 0,5 мкм в сечении  $AA'$  (поли-Si — к — Si) меньше, чем в  $BB'$  (расплав  $\text{SiO}_2$ ), что вызывает латеральные потоки тепла. В результате этого у боковой границы к — Si —  $\text{SiO}_2$  возможно плавление к — Si-слоя и частичное разрастание монокристалла Si (рис. 4, а). При повышении  $T_s$  глубина плавления к — Si-слоя увеличивается и температура расплава на этой глубине больше, чем в  $\text{SiO}_2$ -прослойке, поэтому плавление Si на боковой границе к — Si —  $\text{SiO}_2$  меньше, чем по сечению  $AA'$  (рис. 4, б).

В процессе импульсного воздействия ( $\Gamma = 30$  нс) температура на нижней стороне слоя  $\text{SiO}_2$  не превышает 900 К при  $T_s = 300$  К и при  $T_s = 1300$  К не превышает 1500 К, что позволяет применять импульсный наносекундный нагрев для создания многослойных полупроводниковых структур.

В экспериментах по лазерной перекристаллизации слоистых структур с затравкой [5] было обнаружено увеличение размера выросших кристаллитов кремния на  $\text{SiO}_2$  при стационарном подогреве КНИ-структур до 1300 К и длительности импульса рубинового лазера 30 нс, что согласуется с проведенными расчетами.

## ВЫВОДЫ

Сравнительный анализ процессов структурных превращений и изменения температуры в слоистых структурах поли-Si —  $\text{SiO}_2$  — к — Si и поли-Si — к — Si при импульсном нагреве показал, что при больших длительностях импульса ( $\sim 300$  нс) поток тепла в подложку в структуре поли-Si — к — Si больше, чем в поли-Si —  $\text{SiO}_2$  — к — Si, и поэтому невозможно равномерно расплавить к — Si-слой без частичного плавления  $\text{SiO}_2$ -прослойки. С уменьшением длительности импульса и увеличением начальной температуры образца разница между потоком тепла в подложку за время существования расплава в структуре поли-Si — к — Si и поли-Si —  $\text{SiO}_2$  — к — Si становится мала по сравнению с различием в профилях энергий поглощения, вносимых прозрачностью прослойки  $\text{SiO}_2$ . В результате этого плавление к — Si-слоя возможно без плавления  $\text{SiO}_2$ -прослойки.

Таким образом, условие для равномерного плавления кристаллической затравки без плавления прослойки  $\text{SiO}_2$ , необходимое для увеличения размера реализующихся монокристаллитов, достигается путем стационарного подогрева КНИ-структуры до высоких температур ( $\sim 1300$  К) с использованием коротких длительностей импульса ( $\sim 30$  нс).

## ЛИТЕРАТУРА

1. Celler G. K. Laser crystallization of Si films on amorphous insulating substrates // J. Cryst. Gr.— 1983.— V. 63, N 3.— P. 429.
2. Баладин В. Ю., Двуреченский А. В., Александров Л. Н. Моделирование структурных превращений в слоях аморфного кремния при импульсном нагреве // Поверхность. Физика, химия, механика.— 1986.— № 1.

3. Allmen V. Fundamentals of energy deposition // Laser Annealing of Semicon/Eds. J. M. Poate, J. W. Mayer.— N. Y.: AP, 1982.
4. Таблицы физических величин: Справочник/Под ред. И. К. Кикоина.— М.: Атомиздат, 1976.
5. Манжосов Ю. А., Качурин Г. А., Плотников А. Е. Увеличение размера кристаллитов в структурах КНИ при импульсной лазерной перекристаллизации с дополнительным нагревом подложки // I Всесоюз. конф. «Физ. и физ.-хим. основы микроэлектроники» (Вильнюс, АН ЛитССР, 1987): Тез. докл.— М.: ИОФА АН СССР, 1987.

Поступила в редакцию 30 июня 1987 г.

УДК 539.219.3

М. И. ВАСИЛЕВСКИЙ, Г. М. ГОЛЕМШТОК, В. А. ПАНТЕЛЕЕВ,  
С. М. РУДЕНКО

(Горький)

### ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВУХПОТОКОВОЙ ДИФФУЗИИ ЭЛЕМЕНТОВ V ГРУППЫ В КРЕМНИЙ

Развитие микроэлектроники на основе кремния привело к необходимости детального изучения диффузионных явлений в этом полупроводнике. Был обнаружен ряд типичных аномалий в распределении элементов III и V групп при их диффузии с высокой поверхностной концентрацией. Примером аномального поведения является (рис. 1) приповерхностное «плато» на профиле концентрации электрически активной примеси [1, 2]. Во многих случаях отмечается разница в профилях (в приповерхностной области), полученных электрическими и масс-спектрометрическими методами, фиксирующими как ионы, так и атомы, т. е. неполная электрическая активность примеси («политропия»): для фосфора [3, 4], галлия и мышьяка [5], сурьмы [6] и, возможно, бора [7]. Наконец, для фосфора [2, 8] и бора [9] наблюдаются перегиб на диффузионном профиле и так называемый «хвост» — часть профиля за перегибом, характеризующаяся высоким коэффициентом диффузии.

Моделей, претендующих на объяснение всех свойств «аномальной» диффузии в целом, сравнительно немного [10—13], и ни одна из них, на наш взгляд, не является удовлетворительной. В [14] нами описана модель диффузии фосфора, которая позволяет объяснить последовательно всю совокупность экспериментальных данных и является универсальной для элементов V группы.

Основные положения модели:

1. Диффузия происходит двумя потоками: по узлам и по междоузлиям.

2. Миграция узловой компоненты происходит в виде комплексов примесь — вакансия типа *E*-центров [15]. При этом ее коэффициент диффузии оказывается зависящим от концентрации. Расчет этой зависимости, учитывающий движение ва-

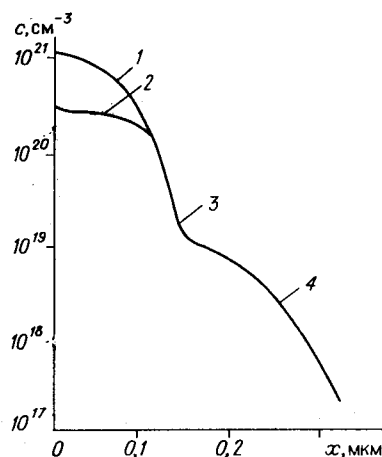


Рис. 1. Аномальный диффузионный профиль фосфора в кремний:

1 — электрически неактивная фракция, 2 — «плато»,  
3 — перегиб, 4 — «хвост»