

УДК 539.104:537.311.33:621.315.5

П. П. Трохимчук – кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри теоретичної та математичної фізики Волинського національного університету імені Лесі Українки;

І. П. Дмитрук – аспірант кафедри теоретичної та математичної фізики Волинського національного університету імені Лесі Українки;

М. С. Пеньковський – старший лаборант кафедри теоретичної та математичної фізики Волинського національного університету імені Лесі Українки

Проблема моделювання дифузійних процесів та процесів переносу випромінювання в релаксаційній оптиці

Роботу виконано на кафедрі теоретичної та математичної фізики ВНУ ім. Лесі Українки

Наведено результати аналізу проблеми моделювання дифузійних процесів у релаксаційній оптиці. Показано суттєву різницю між дифузійними процесами та процесами, пов'язаними з переносом випромінювання (перевипромінюванням). Проаналізовано із цієї точки зору процеси лазерного легування та лазерного відпалу напівпровідників.

Ключові слова: дифузійні процеси, перенос випромінювання, перевипромінювання, релаксаційна оптика, лазерне легування, лазерний відпал, рекристалізація, випромінювальна релаксація, безвипромінювальна релаксація.

Трохимчук П. П., Дмитрук І. П., Пеньковський М. С. Проблема моделирования диффузионных процессов и процессов переноса излучения в релаксационной оптике. Приведены результаты анализа проблемы моделирования диффузионных процессов в релаксационной оптике. Показана существенная разница между диффузионными процессами и процессами, связанными с переносом излучения (переизлучением). Проанализированы с этой точки зрения процессы, лазерного легирования и лазерного отжига полупроводников.

Ключевые слова: диффузионные процессы, перенос излучения, переизлучение, релаксационная оптика, лазерное легирование, лазерный отжиг, рекристаллизация, излучательная релаксация, безызлучательная релаксация.

Trokhimchuck P. P., Dmytruk I. P., Pen'kovskiy M. S. A Problem of Modeling of Diffusive Processes and Processes of Radiative Transport in Relaxed Optics. Results of analysis of problem of modeling of diffusive processes in Relaxed Optics are represented. Considerable difference between diffusive processes and processes of radiative transport (reradiation) is shown. The processes of the laser implantation and laser annealing of semiconductors are analyzed too.

Key words: diffusive processes, radiative transport, reradiation, Relaxed Optics, laser implantation, laser annealing, recrystallization, radiate relaxation, nonradiative relaxation.

Постановка наукової проблеми та її значення. У релаксаційній оптиці дуже важливою є проблема опису дифузійних процесів і переносу випромінювання та визначення їхнього впливу на формування незворотних змін в опроміненому матеріалі. Дифузійні процеси є основними за великих інтенсивностей опромінення, як і процеси переносу випромінювання. Але для цього важливим фактором є час опромінення, який для перших процесів час опромінення має бути меншим від часу релаксації системи, для других процесів сумарний час опромінення має бути більшим від часу релаксації системи. Зазвичай обидва ці процеси роблять вклад у кінцевий результат.

Тому **метою** цієї роботи є з'ясування ролі дифузійних процесів та процесів переносу випромінювання в релаксаційній оптиці.

Виклад основного матеріалу та обґрунтування отриманих результатів дослідження. Вплив процесів фотостимульованої та теплової дифузії доволі важко відрізнити. Річ у тому, що самі методики визначення коефіцієнтів дифузії та самодифузії дають різні значення і коефіцієнтів дифузії та самодифузії різних хімічних елементів, і відповідних енергій активації [1; 11].

Робити висновок, які процеси є основними – дифузійні чи переносу випромінювання, – можна з вигляду профілів розподілу лазерно-індукованих донорних центрів. На рис. 1 наведено профілі розподілу донорних центрів в антимоніді та арсеніді індію, індукованих опроміненням одиничних імпульсів рубінового лазера (тривалість імпульсу 20 нс, довжина хвилі опромінення 0,69 мкм) [11; 6].

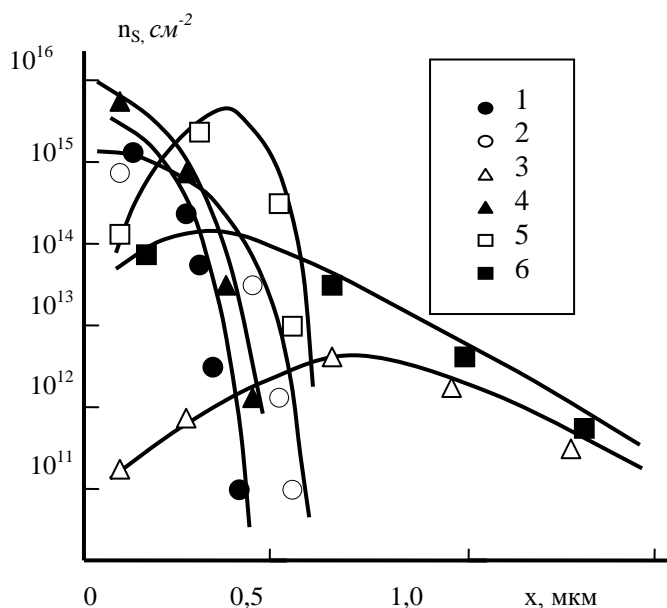


Рис. 1. Профілі розподілу шарової концентрації донорних центрів в інверсійних шарах *InSb* та *InAs*, отриманих після лазерного опромінення з різною густиною енергії в імпульсі: 0,07 (1); 0,096 (2); 0,16 (3); 0,16 (4); 0,25 (5); 0,5 Дж·см⁻² (6). 1–3 – *InSb*, 4–6 – *InAs*

Як видно з малюнка, «дифузійним» розподілам відповідають крива 3 для антимоніду індію та криві 5 і 6 для арсеніду індію.

Для антимоніду індію було побудовано одновимірну кінетично-дифузійну модель, що дало змогу задовільно описати отримані експериментальні результати [11; 6]. Розрахункові профілі, отримані згідно із цією моделлю, наведено на рис. 2. Розбіжність експериментальних результатів із теоретичними оцінками пояснюється тим, що ми вибрали відносний коефіцієнт дифузії донорних центрів, не вдаючись до їхньої природи та наближення однорідної структури, що насправді не так.

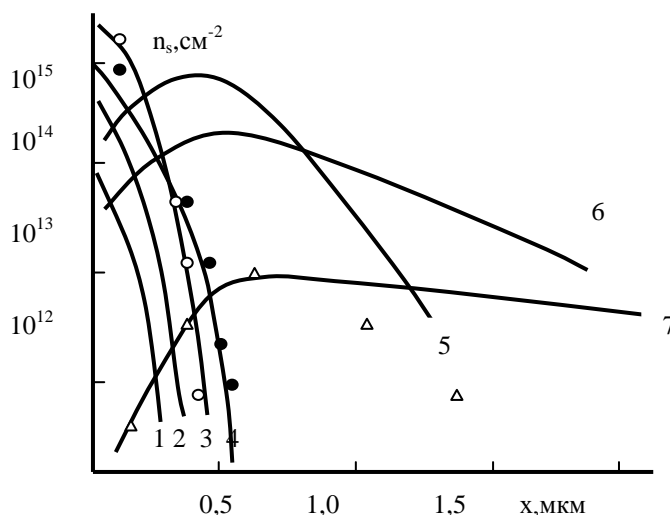


Рис. 2. Розрахункові профілі розподілу концентрації донорних центрів в *InSb* для різних режимів опромінення (Дж·см⁻²; крива 1–0,018; 2–0,04; 3–0,07; 4–0,096; 5–0,12; 6–0,14; 7–0,16)

Для більш точного розрахунку дифузійних процесів було запропоновано дводифузійну модель, яка ґрунтується на тому, що коефіцієнти самодифузії і фотостимульованої дифузії атомів індію та

сурми різні [8]. Фізичні міркування для введення такої моделі очевидні, ніяка домішка не може дати концентрації донорних центрів 10^{19} – 10^{21} см^{-3} . Отже, тут можна говорити лише про фотостимульовану зміну стехіометрії основних компонент напівпровідника. Відомо, що за донорний тип власної провідності відповідає надлишок сурми, а за акцепторний – надлишок індію. Саме фотостимульований перерозподіл стехіометрії напівпровідника й сприяє таким високим концентраціям донорних центрів. Однак, якщо для менш інтенсивних режимів опромінення дифузійна довжина «пробігу» донорних центрів складає сотні ангстрем і тому це не помітно за такої точності вимірювання, то за густини енергії опромінення $0,16$ Дж/см² ця дифузійна довжина вже рівна $0,7$ мкм. У дводифузійній моделі ця довжина дифузії відповідає атомам сурми, межа донорного шару відповідає рівності концентрацій індію та сурми. Зважаючи на це, було отримано значення довжини пробігу для атомів індію $4,2$ мкм і пояснено, чому хвости профілів кривих 3, 5, 6 більш круті, ніж отримуються в одnodифузійному наближенні. Слід підкреслити, що цей метод є суттєвим доповненням до методів визначення коефіцієнтів фотостимульованої дифузії [3; 5]. У цьому випадку час опромінення набагато менший від часу життя нерівноважних носіїв, який складає $\sim 10^{-7}$ с для InSb за довжини хвилі $0,69$ мкм, тобто процеси перевипромінювання, якщо і є, то вони одноразові, тому суттєвого впливу на форму профілів розподілу не дають.

Зовсім інша справа режими опромінення із часами, значно більшими від часу життя нерівноважних носіїв. На рис. 3 наведено профілі розподілу донорних центрів в антимоніді індію, отримані при опроміненні одиничними імпульсами рубінового лазера тривалістю 5 нс (криві 1 та 2) та серіями імпульсів неодимового лазера (тривалість імпульсу 10 нс, частота слідування імпульсів $12,5$ Гц) [2].

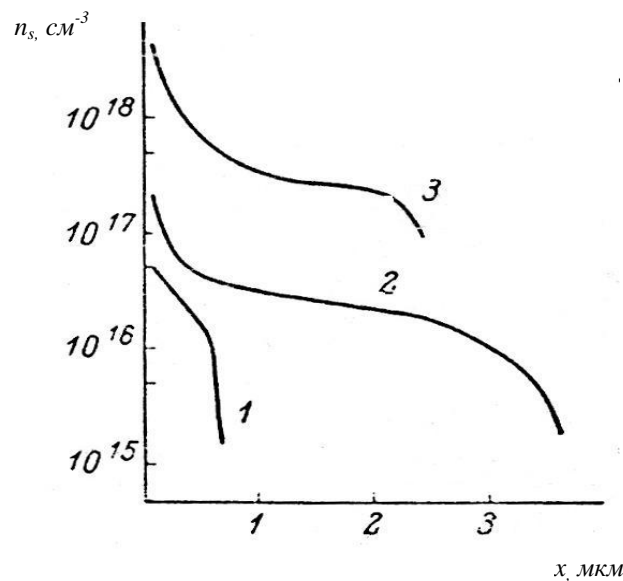


Рис 3. Профілі об'ємного розподілу електронів після лазерного опромінення. 1, 2 – рубіновий лазер; 3 – YAG:Nd лазер. Густина енергії густини в імпульсі, Дж/см²: 1–5; 2–40.

Як видно, порівняно з кривими, які наведено на рис. 1, у цьому разі густина енергії опромінення в 50 – 200 разів більша, форма профілів інша, а концентрація індукованих змін на 2 – 3 рівні менша. Пояснення цих кривих таке [9]. Очевидно, що тут великий вклад у кінцевий результат дають ефекти вторинного перевипромінювання та тісно пов'язані з ними процеси переопромінення опромінюваного матеріалу з довжиною хвилі, що дорівнює ширині забороненої зони кристалу, тобто $\sim 6,9$ мкм. Форма кривої 1 указує на те, що процеси переопромінення порівняно малоінтенсивні, в основному збуджується (розривається) чистий ковалентний зв'язок у представленні двовимірної кристалічної ґратки, ймовірність розриву двох зв'язків, що й приводить власне до утворення стійких донорних

центрів та зв'язаних із ними структурних змін опроміненого матеріалу, зовсім мала, а ймовірність розриву всіх трьох зв'язків – майже нульова [11]. Тобто в цьому випадку цей режим далекий від режиму насиченого збудження двох зв'язків. Означений процес нагадує ті процеси перевипромінювання та переносу випромінювання, що проходять у зорях [10; 7; 4]. У цьому випадку визначальним є оптичний *Urca*-процес, тобто більша частина поглинутої енергії перетворюється у випромінювання і на незворотні зміни мало впливає [9; 4].

Пояснення кривих 2 та 3 на рис. 3 подібне до попереднього. Однак, на відміну від кривої 1, процеси, пов'язані з розривом двох із трьох зв'язків за рахунок багатофотонного поглинання, є вже досить значними. Про те, що саме переопромінювання відіграє вирішальну роль у формуванні профілів кривих 2 та 3, свідчить нахил хвостових частин профілів, за його нахилом на згині можна визначити коефіцієнт поглинання випромінювання $\sim 50\text{--}100\text{ см}^{-1}$, що відповідає коефіцієнту поглинання на краю забороненої зони напівпровідника, тобто з довжиною хвилі 6,9 мкм. Кількість переопроміненнь можна оцінити так: під час опромінення серією імпульсів із частотою 12,5 Гц (крива 3) протягом 6–10 секунд ми маємо 75–125 переопроміненнь. Для розриву 2-го зв'язку з енергією 1,95 еВ потрібно 11 квантів з енергією 0,18 еВ. Про жодну гідродинамізацію (тобто розрив третього зв'язку з енергією 2,15 еВ) тут не йдеться, оскільки профілі обриваються різко. Схожа картина відбувається і під час опромінення імпульсом рубінового лазера з густиною енергії 40 Дж/см². Тут кількість опроміненнь значно більша та дорівнює відношенню тривалості імпульсу до часу життя нерівноважних носіїв тобто $\sim 5 \cdot 10^4$. Те, що кількість переопроміненнь значно більша, ніж для випадку неодимового лазера, свідчить і більш глибоке утворення донорних центрів, і більша «полиця» між початковою та хвостовою частиною профілів.

Пояснення того, що опромінення серіями імпульсів неодимового лазера (крива 3 на рис. 3) приводить до більш інтенсивного утворення донорних центрів, ніж опромінення рубіновим лазером, пояснюється різною густиною енергії в імпульсі: неодимовий $\sim 0,03\text{ Дж/см}^2$, рубіновий $\sim 0,008\text{ Дж/см}^2$.

Час життя нерівноважних змін за інтенсивностей опромінення неодимовим лазером може сягати $\sim 10^{-2}\text{ с}$ і більше (екситонні краплі [11]) та залежить від інтенсивності опромінення. Отже, процес накопичення донорних центрів під час опромінення неодимовим лазером більш інтенсивний, ніж під час опромінення рубіновим.

У реальних процесах релаксаційної оптики ми повинні враховувати і процеси дифузії, і процеси перевипромінювання.

Для більш точного оцінювання впливу того чи іншого процесу потрібно провести детальні дослідження спектрального складу та часового розподілу перевипромінювання, адже воно поширюється і в глибині опромінюваного матеріалу, і на поверхню.

Висновки

1. Показано, що дифузійні процеси є основними під час гідродинамізації опромінюваного матеріалу та за термінів опромінення менших від часу релаксації елементарного акту збудження для рівноважних процесів.

2. Умовою ефективного використання процесів переносу випромінювання (переопромінення) є терміни опромінення, більші за час релаксації елементарного акту збудження для рівноважних процесів та інтенсивності опромінення, що дає можливість отримати «довгоживучі» нерівноважні центри збудження.

3. За допомогою цих показників якісно пояснені експериментальні результати лазерно-індукованого утворення донорних центрів в антимоніді та арсеніді індію імпульсами різної тривалості й інтенсивності рубінового і неодимового лазерів.

Список використаної літератури

1. Атомная диффузия в полупроводниках : сб. статей / под. ред. Д. Шоу. – М. : Мир, 1975. – 686 с.
2. Богатырев В. А. Получение низкоомных n-слоев на антимониде индия после лазерного облучения / В. А. Богатырев, Г. А. Качурин // Физика и техника полупроводников. – Т. 11. – 1977. – № 1. – С. 100–102.
3. Вавилов В. С. Механизмы образования и миграции дефектов в полупроводниках / В. С. Вавилов, А. Е. Кив, О. Р. Ниязова. – М. : Наука, 1981. – 388 с.
4. Гамов Дж. Моя мировая линия: неформальная автобиография / Дж. Гамов. – М. : Наука, 1994. – 304 с.
5. Джафаров Т. Д. Фотостимулированные атомные процессы в полупроводниках / Т. Д. Джафаров. – М. : Энергоатомиздат, 1984. – 136 с.
6. Лазерный отжиг полупроводниковых соединений элементов $A_{III}B_{V}$ / Л. Н. Курбатов, И. Г. Стоянова, П. П. Трохимчук, А. С. Трохин // ДАН СССР. – 1983. – Т. 268. – Вып. 3. – С. 594–597.
7. Соболев В. В. Курс теоретической астрофизики / В. В. Соболев. – М. : Наука, 1985. – 503 с.
8. Трохимчук П. П. Проблема моделювання фотостимульованої дифузії в бінарних напівпровідниках / П. П. Трохимчук // Наук. вісн. ВНУ ім. Лесі Українки. Сер. : Фізичні науки. – 2010. – № 29. – С. 52–55.

9. Трохимчук П. П. Вплив перевипромінювання на формування ефектів релаксаційної оптики / П. П. Трохимчук // Наук. вісн. ВНУ ім. Лесі Українки. Сер. : Фізичні науки. – № 6. – 2010. – С. 54–57.
10. Чандрасекхар С. Перенос лучистой энергии / С. Чандрасекхар. – М. : Изд-во иностр. лит., 1953. – 432 с.
11. Trokhimchuck P. P. Foundations of Relaxed Optics / P. P. Trokhimchuck. – Lutsk : Vezha, 2011. – 627 p.

Стаття надійшла до редколегії
08.10.2012 р.