

文章编号: 0258-7025(2003)08-0755-04

# 脉冲激光诱导 Zn/InP 掺杂过程中温度分布的解析计算

田洪涛, 陈 朝

(厦门大学物理系, 福建 厦门 361005)

**摘要** 在实验的基础上, 分析脉冲激光诱导半导体 InP 掺杂 Zn 过程, 利用简化的一维模型, 在第三类边界条件下, 给出一种较直观的脉冲激光辐照有限厚双层材料 Zn/InP 的温度分布解析形式。

**关键词** 激光物理; 温度分布; 脉冲激光; 诱导掺杂; Zn/InP

**中图分类号** TN 249 **文献标识码** A

## Analytical Calculation of Temperature Distribution in the Process of Doping of Zn into InP Induced by Pulsed Laser

TIAN Hong-tao, CHEN Chao

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

**Abstract** Based on the experiment, the process of doping of Zn into InP induced by pulsed laser was analysed, and the temperature distribution analytical expression across the finite double layer Zn/InP irradiated by pulsed laser is presented.

**Key words** laser physics; temperature distribution; pulsed laser; doping induced by laser; Zn/InP

### 1 引 言

激光表面处理最重要的应用之一是激光诱导掺杂, 将适当的杂质源置于激光退火过程, 在退火的同时还可以实现掺杂。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<sup>[1]</sup>。有文献<sup>[2]</sup>报道在 GaAs 上进行固态源激光诱导扩散研究工作。III-V 族化合物半导体对集成光学、光电子学等领域有重要应用价值, 在 III-V 族化合物半导体上进行激光诱导掺杂有可能解决闭管扩 Zn 成结过程中遇到的工艺复杂、成本高、时间长等问题。我们用 Nd:YAG 激光(1.06  $\mu\text{m}$ )辐照在表面蒸发沉积 Zn 薄膜的 *n*-InP 片上, 已经实现 Zn 在 InP 中掺杂, 形成平整的 *P-N* 结, 在 *n*-InP 片表面得到受主浓度分布均匀、高掺杂( $\sim 8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ )、浅

的( $\sim 1 \mu\text{m}$ ) *p*-InP 层。用电化学 C-V 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。

激光与材料相互作用导致材料温度升高, 由于激光加热在空间上和时间上的局域性, 所产生的热量以一定方式在材料中传导, 材料在加热过程和冷却过程中的温度分布形式, 对详细研究激光表面处理及掺杂机理等非常重要。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, 给出的模型大都是前面一层为有限厚, 后面一层为无限厚的情况。关于有限厚双层材料的温度分布解析形式, 通常考虑的都是第一类边界条件。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<sup>[3,4]</sup>, 通常采用数值方

收稿日期: 2002-04-09; 收到修改稿日期: 2002-06-10

基金项目: 国家自然科学基金高科技探索项目(批准号: 69887002)和教育部与莫斯科大学合作项目资助课题。

作者简介: 田洪涛(1970—), 男, 湖北洪湖人, 厦门大学物理系凝聚态物理专业集成光电子方向博士研究生, 主要从事 III-V 化合物半导体材料改性和欧姆接触方面的研究。E-mail: httian@yanan.xmu.edu.cn

法求解。根据我们的实验工作,本文在第三类边界条件下,给出一种比较直观简洁的温度分布解析表达式。

## 2 理论分析

### 2.1 物理模型

激光诱导掺杂的原理如图 1 所示。激光束照在材料表面,一部分反射,其余部分被材料吸收,为了得到平整、均匀的掺杂,要求激光束能量分布均匀。激光功率密度为  $Q$ , Zn 表面的反射系数为  $R(\lambda)$ , 实验过程中调节激光器的功率和脉冲宽度使金属 Zn 表面温度不超过熔点,表面温度过高会导致样品在空气中氧化,甚至燃烧。另外,InP 衬底温度过高会导致 InP 分解( $\sim 700^\circ\text{C}$ ),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相比拟且远比样品的厚度大,忽略样品的边缘效应,按一维问题处理。

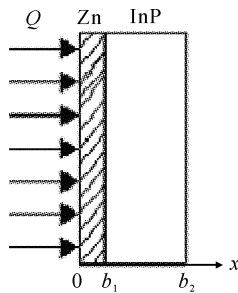


图 1 激光诱导示意图

Fig. 1 Scheme of laser inducing

### 2.2 激光束加热固体的微分方程

作温度坐标平移  $\tilde{u}(x,t) = u(x,t) + T_0$ , 其中  $T_0$  为室温,  $t$  为时间,  $x$  为深度。对于波长为  $1.06 \mu\text{m}$  激光金属 Zn 的吸收系数高达  $10^5 \sim 10^6 \text{ cm}^{-1}$ , 进入材料内部的激光能量在 Zn 表面极小的深度内 ( $\sim 10 \text{ nm}$ ) 被吸收,而 Zn 的厚度在微米量级,可近似认为只有表面热源。作为一种近似,假定激光脉冲是宽度为  $\theta$  的矩形脉冲。视 Zn 膜/InP 衬底为一个整体,描述固体热传导的微分方程为

$$C(x)\rho(x) \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ k(x) \frac{\partial u(x,t)}{\partial x} \right] + [1 - R(\lambda)] Q \delta(x) H(t) \quad 0 < x < b_2 \quad (1)$$

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

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

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

$$H(t) = \begin{cases} 1 & 0 < t < \theta \\ 0 & t < 0, t > \theta \end{cases} \quad (2)$$

$C_1, \rho_1, k_1$  和  $C_2, \rho_2, k_2$  分别是 Zn 和 InP 的比热、密度、热传导系数。 $R(\lambda)$  为激光在材料表面的反射率,与激光波长及表面状况有关。 $Q$  为激光功率密度,  $H(t)$  为矩形脉冲函数,  $\theta$  为激光脉冲宽度。

### 2.3 边界条件与初始条件

金属 Zn 表面的热辐射、对流所造成的热损失功率密度与辐照功率密度相比很小,均可忽略不计。InP 衬底背面(即  $x = b_2$ ) 处按牛顿冷却定律与环境交换热量

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

$h$  为热交换系数。

Zn/InP 界面 ( $x = b_1$ ) 处温度连续,热流连续,记  $b_1$  的左邻域为  $b_1 - 0, b_1$  的右邻域为  $b_1 + 0$ (以下同)

$$u(b_1 - 0, t) = u(b_1 + 0, t)$$

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

Zn 膜/InP 衬底的初始温度与室温相同

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

## 3 计算方法

(4)式表明温度分布连续,温度的一阶导数不连续。这类问题可分段构造满足方程和边界条件的解<sup>[5]</sup>。方程(1)是非齐次方程,用冲量定理法<sup>[6]</sup>求解(1)~(5)。

先求解齐次方程

$$C(x)\rho(x) \frac{\partial v(x,t)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ k(x) \frac{\partial v(x,t)}{\partial x} \right]$$

$$0 < x < b_2, \quad 0 < t < \theta \quad (6)$$

$$\frac{\partial v(x,t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial v(b_2,t)}{\partial x} + \frac{h}{k_2} v(b_2,t) = 0 \quad (7)$$

$$v(b_1 - 0, t) = v(b_1 + 0, t),$$

$$k_1 \frac{\partial v(b_1 - 0, t)}{\partial x} = k_2 \frac{\partial v(b_1 + 0, t)}{\partial x} \quad (8)$$

$$v(x, t = \tau + 0) = \frac{[1 - R(\lambda)] Q \delta(x)}{C(x)\rho(x)} \quad (9)$$

假设  $v(x,t)$  有形如  $v(x,t) = X(x)T(t)$  的解,代入式(6)~(8),分离变量后得

$$T'(t) + \omega^2 T(t) = 0 \quad 0 < t < \theta \quad (10)$$

$$[k(x)X'(x)]' + \omega^2 C(x)\rho(x)X(x) = 0 \quad 0 < x < b_2 \quad (11)$$

$$X'(0) = 0, \quad X'(b_2) + \frac{h}{k_2}X(b_2) = 0 \quad (12)$$

$$X(b_1 - 0) = X(b_1 + 0) \quad (13)$$

$$k_1 X'(b_1 - 0) = k_2 X'(b_1 + 0) \quad (14)$$

由 Sturm-Liouville 本征值理论<sup>[7]</sup>可知:边界条件(12)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  $C(x)\rho(x)$  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(11)满足式(12),(13)的解具有形式

$$X_n(x) = \begin{cases} \frac{\cos \frac{\omega_n x}{a_1}}{\cos \frac{\omega_n b_1}{a_1}} & \text{当 } 0 < x < b_1, a_1 = \sqrt{\frac{k_1}{C_1 \rho_1}} \\ \frac{\frac{\omega_n \cos \frac{\omega_n}{a_2}(b_2 - x) + \frac{h}{k_2} \sin \frac{\omega_n}{a_2}(b_2 - x)}{\frac{\omega_n \cos \frac{\omega_n}{a_2}(b_2 - b_1) + \frac{h}{k_2} \sin \frac{\omega_n}{a_2}(b_2 - b_1)}} & \text{当 } b_1 < x < b_2, a_2 = \sqrt{\frac{k_2}{C_2 \rho_2}} \end{cases} \quad (15)$$

式(15)满足条件式(14),确定本征值  $\omega_n$  的方程

$$-k_1 \tan \frac{\omega_n b_1}{a_1} = k_2 \frac{\frac{\omega_n \sin \frac{\omega_n}{a_2}(b_2 - b_1) - \frac{h}{k_2 a_2} \cos \frac{\omega_n}{a_2}(b_2 - b_1)}{\frac{\omega_n \cos \frac{\omega_n}{a_2}(b_2 - b_1) + \frac{h}{k_2} \sin \frac{\omega_n}{a_2}(b_2 - b_1)}} \quad (16)$$

超越方程(16)可用数值方法求解。容易看出(10)式解的形式为  $T(t) \sim \exp(-\omega_n^2 t)$ , 于是

$$v(x, t, \tau) = \sum_{n=1}^{+\infty} a_n \exp[-\omega_n^2(t - \tau)] X_n(x) \quad (17)$$

将式(17)代入式(9),利用带权函数  $C(x)\rho(x)$  的无穷函数序列  $\{X_n(x)\}$  在  $[0, b_2]$  上的正交性确定系数

$$a_n = \frac{[1 - R(\lambda)]Q \int_0^{b_2} X_n(x) \delta(x) dx}{\int_0^{b_2} C(x)\rho(x) X_n^2(x) dx} \quad (18)$$

于是  $u(x, t) = \int_0^t v(x, t, \tau) d\tau =$

$$\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{[1 - R(\lambda)]Q X_n(x)}{\omega_n^2 \cos\left(\frac{\omega_n b_1}{a_1}\right) N_n} [1 - \exp(-\omega_n^2 t)] \quad 0 < t \leq \theta \quad (19)$$

## 4 讨论

(15)式和(19)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)下匀质材料的温度分布。这是因为构造微分方程(11)满足边值条件(13),(14)的解采用了形如式(15)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,具有统一的形式。由此,不能将匀质材料视为本文所讨论问题的特例。

(19)式给出在激光脉冲宽度内温度随时间的变化,当  $t > \theta$  时样品不受激光辐照。实验上感兴趣的是一个脉冲完成后(即  $t = \theta$ ) 的温度分布

$$u(x, \theta) = \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{[1 - R(\lambda)]Q X_n(x)}{\omega_n^2 \cos\left(\frac{\omega_n b_1}{a_1}\right) N_n} [1 - \exp(-\omega_n^2 \theta)] \quad (20)$$

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  $k_{Zn} = 89 \text{ W/(m} \cdot \text{K)}, k_{InP} = 24 \text{ W/(m} \cdot \text{K)}$ 。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 膜较疏松,取  $R = 0.68$ ,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(20)式具有很好的收敛性,  $\theta$  越大,级数收敛越快。当激光功率密度  $Q = 800 \text{ W/cm}^2$ ,在  $\theta > 10^{-8} \text{ s}$  时,可以取  $n = 1$  的项而略去  $n > 1$  的项,其误差不超过  $0.01\%$ 。

由(20)式可得表面温度 ( $x = 0$ )

$$u(0, \theta) = \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{[1 - R(\lambda)]Q [1 - \exp(-\omega_n^2 \theta)]}{\omega_n^2 \cos^2\left(\frac{\omega_n b_1}{a_1}\right) N_n} \quad (21)$$

分界面处的温度 ( $x = b_1$ )

$$u(b_1, \theta) = \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{[1 - R(\lambda)]Q [1 - \exp(-\omega_n^2 \theta)]}{\omega_n^2 \cos\left(\frac{\omega_n b_1}{a_1}\right) N_n} \quad (22)$$

图 2,3 表明表面温度、分界面温度与激光的脉冲宽度呈线性关系,从(20)式不难看出当脉冲宽度  $\theta$  很小时,指数项可按级数展开取一次项,略去高次项。另外,由(19),(20)式还可求出加热速度、温度梯度。由于 Zn-InP 相图尚不完全清楚,Zn-InP 分

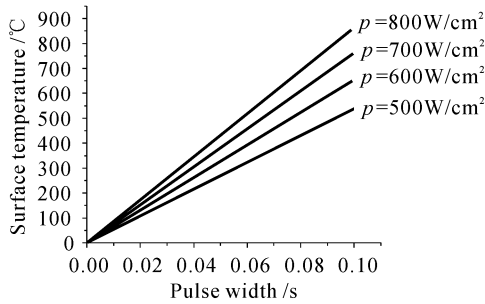


图 2 表面温度与脉冲宽度的关系

Fig. 2 Surface temperature vs pulse width

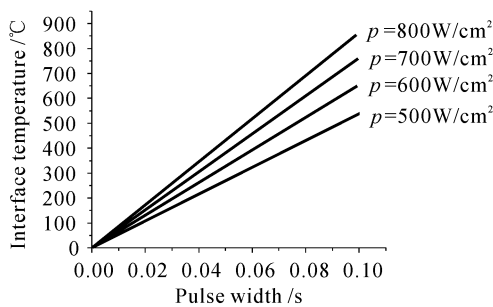


图 3 分界面温度与脉冲宽度的关系

Fig. 3 Interface temperature vs pulse width

界面处 Zn/InP 掺杂机制与温度的关系有待进一步研究,定量计算还需更多的实验数据支持。图 2 中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。温度低于 700℃ 时,实验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<sup>[8]</sup>。

另外,实验发现,激光辐照以后 Zn 进入 InP 衬底的深度约为 1 μm,在此范围内掺杂浓度不随深度变化,一直保持  $8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  的浓度,由此可以推断 Zn/InP 掺杂不可能是扩散过程,初步认为是合金过程,起主导作用的是传热过程而不是传质过程。所以本文只讨论传热过程而忽略传质过程。本模型在分界面发生相变之前是很好的近似。为了改善辐照

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。

## 5 结 论

脉冲激光诱导 InP 的 Zn 掺杂过程中金属-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。本文在适当近似下给出温度分布的一种解析形式,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。确定一般情况下双层材料的温度分布有利于合理选择激光功率、辐照时间等工艺参数使表面或界面达到预期的温度。此结果也可应用于双层材料的激光诱导退火、激光诱导合金、激光诱导沉淀、激光诱导再结晶等半导体激光处理工艺的理论预测。

## 参 考 文 献

- 1 K. Sera, F. O. Kumura, S. Kaneka *et al.*. Excimer-laser doping into Si thin films [J]. *J. Appl. Phys.*, 1990, **67**(5):2359~2363
- 2 Ye Yutang, Li Zhongdong, Hong Yonghe *et al.*. Continuous wave CO<sub>2</sub> laser induced diffusion of Zn into GaAs using a solid state diffusion source [J]. *Chinese J. Lasers* (中国激光), 1997, **A24**(3): 237 ~ 241 (in Chinese)
- 3 Lu Jian, Ni Xiaowu. *Physics of Laser Beam Interactions with Materials* [M]. Beijing: Machine Industrial Press, 1996. 32~34 (in Chinese)
- 4 M. N. Ozisik. *Heat Conduction* [M]. Beijing: Higher Education Press, 1983. 316~326 (in Chinese)
- 5 Zeng Jinyan. *Quantum Mechanics I* [M]. 2nd edition. Beijing: Science Press, 1997. 107~108 (in Chinese)
- 6 Liang Kunmiao. *Mathematical Physics Method* [M]. 2nd edition. Beijing: Higher Education Press, 1978. 233 ~ 235 (in Chinese)
- 7 Xue Xingheng. *Mathematical Physics Partial Differential Equations* [M]. Hefei: China Science and Technology University Press, 1995. 117~118 (in Chinese)
- 8 Fu Renwu, Cai Zhihua, Chen Chao. The numerical simulation of continuous Nd:YAG laser-annealing of InP [C]. *SPIE*, 2000, **4086**:199~202