

文章编号: 0253-2239(2009)03-0752-04

绝缘衬底上硅表面载流子的超快动力学研究

刘国栋 王贵兵 李剑峰 付博 罗福

(中国工程物理研究院流体物理研究所, 四川 绵阳 621900)

摘要 利用 800 nm 波长的飞秒抽运探测技术测量了具有不同单晶硅薄膜厚度的绝缘衬底上硅(SOI)皮秒瞬态反射率变化,并通过基于受激载流子密度和温度变化过程建立的反射率模型讨论了 SOI 表面载流子的超快动力学过程。研究表明,表面复合速度(SRV)是影响载流子动力学响应的主要因素,且薄膜厚度越小表面复合速度就越大,对应的表面态密度可达到 10^{15} cm^{-2} 。对于较小的 SRV,受激载流子的超快响应决定了瞬态反射率变化;而对于较大的 SRV,晶格温升对瞬态反射率变化的贡献变得显著,使得反射率在更短的时间内恢复并超过初始值。

关键词 飞秒激光;抽运-探测;载流子动力学;绝缘衬底上的硅

中图分类号 TN247 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS20092903.0752

Ultrafast Carrier Dynamics in Surface of Silicon-on-Insulator

Liu Guodong Wang Guibing Li Jianfeng Fu Bo Luo Fu

(Institute of Fluid Physics, China Academy of Engineering Physics, Mianyang, Sichuan 621900, China)

Abstract Time-resolved reflectivity changes of silicon-on-insulator (SOI) with different crystalline silicon film thicknesses have been measured using the femtosecond ($\lambda=800 \text{ nm}$) pump-probe technique to investigate the ultrafast carrier dynamics. The underlying physics of carrier diffusion and recombination processes is discussed using the reflectivity model, which is based on the time evolution of photoexcited carrier density and temperature. The research shows that, the contribution of surface recombination velocity (SRV) dominates the response of excited carrier dynamics, and the SRV increases with thickness of silicon thin films decreasing. The corresponding active surface state density can reach 10^{15} cm^{-2} . For relatively small SRV, the transient reflectivity changes are dominated by the ultrafast response of photoexcited carriers. But the contribution of lattice temperature appears to be more significant with large SRVs, which causes the reflectivity to recover and surpass the initial value in shorter time.

Key words femtosecond laser; pump-probe; carrier dynamics; silicon-on-insulator

1 引 言

绝缘衬底上硅(SOI)技术是在顶层单晶硅和背衬底之间引入了一层氧化埋层。不同的硅薄膜厚度使 SOI 结构具有很高的灵活性,基于 SOI 结构上的器件可以减少结电容和漏电流,获得更快的开关速度^[1,2]。而在亚微米、纳米量级的半导体膜层中,电子渡越时间可以缩短至一皮秒甚至几百飞秒,这一时间尺度已是电声子散射过程,或表面复合过程主导的时间范围^[3],因而要了解高速器件的响应机制,提高其性能,就需要在超短时间尺度内研究载流子的动力学特性。

超短脉冲激光激励下,受激载流子通过散射过

程成为热载流子(载流子分布函数可用等效载流子温度来描述,并且这一温度远大于晶格温度),同时主要通过多声子参与的散射机制弛豫至导带底或价带顶,将大部分能量转移至晶格,这一能量转移过程使晶格温度升高^[3~5]。晶格温升带来的带隙能量变化、电声子碰撞等效应将导致折射系数的变化。主要的吸收机制来自于自由电子吸收和单、多光子带间吸收,从而改变了载流子的能量本征态和占有因子,进而改变了材料的介电函数,使得可测量光学特性(反射率、透过率等)发生相应的变化。本文采用 800 nm 波长飞秒激光瞬态抽运探测技术测量了具有不同厚度单晶硅薄膜的 SOI 表面反射率在皮秒

收稿日期: 2008-06-17; 收到修改稿日期: 2008-08-12

基金项目: 中国工程物理研究院科学技术基金面上项目(20060427)资助课题。

作者简介: 刘国栋(1980—),男,博士研究生,主要从事强激光效应方面的研究。E-mail:gd.liu@yahoo.com.cn

导师简介: 李剑峰(1964—),男,研究员,博士生导师,目前从事高能量密度物理研究。E-mail:jianfeng816@sohu.com

量级内的变化过程,分析了载流子激励、弛豫以及复合过程,讨论了硅薄膜厚度对其载流子超快响应过程的影响。

2 实 验

实验光源为掺钛蓝宝石飞秒激光系统^[6],中心波长800 nm,脉宽(半峰全宽,FWHM)80 fs。飞秒脉冲经分束镜分为抽运光和探测光,抽运光经透镜聚焦后垂直辐照样品表面,光斑直径为200 μm 。探测光入射角小于 10° ,通过 CCD 观测其靶面光斑完全落入抽运光斑中,直径100 μm 。探测光单脉冲能量被设置为低于抽运光三个量级(保持在约10 nJ),从而尽量减小其对材料状态的影响。飞秒脉冲重复频率为1 kHz,脉冲间能量波动的影响,主要通过相位敏感技术及每个延时测试点的多次平均来消除。实验样品为直径100 mm的硅晶圆 SOI(上海 SIMGUI 公司),根据顶层单晶硅薄膜厚度不同分别有10 μm ,1 μm 和200 nm三种规格,均为 $\langle 100 \rangle$ 晶向,对应的 SiO₂ 氧化埋层(BOX)厚度分别为0.375 μm ,0.375 μm 和0.153 μm ,基底为厚度百微米的多晶硅。样品在垂直于入射面内可二维移动,每个延时点探测一个新的位置。

入射光波长800 nm时,单晶硅的室温复折射系数为^[7] $\hat{n} = n + i\kappa = 3.697 + i0.007$,从而抽运光和探测光分别具有较大的激励深度($\delta_{\text{pump}} = \lambda/4\pi\kappa = 9.8 \mu\text{m}$)和较小的有效探测深度($\delta_{\text{probe}} = \lambda/4\pi n = 17 \text{ nm}$);此外,声子是 BOX 层内主要的能量载流子,其能量吸收及运输方式都与单晶硅层不同,因此,超快反射率变化信号只对单晶硅膜层内的载流子响应过程敏感。

3 实验结果与分析

在相同入射能量密度条件下($f_p = 16.6 \text{ mJ}/\text{cm}^2$),具有不同单晶硅薄膜厚度的 SOI 表面瞬态反射率变化过程如图1所示。其中,10 μm 厚度硅薄膜的反射率瞬态响应与单晶硅片的响应过程相近^[6]。随着薄膜厚度的减小, $\Delta R/R$ 下降至谷底的时间更短,且恢复过程更快,在实验时间内逐渐由负值变为正值。对厚度为10 μm ,1 μm 和200 nm的硅薄膜, $\Delta R/R$ 分别在35 ps内、20 ps内和10 ps内就由负值变为正值,且膜厚越小,正的 $\Delta R/R$ 就越大。

激光辐照下的反射率变化 $\Delta R/R$ 与材料折射系数($n = \text{Re}[(\hat{\epsilon})^{1/2}]$)密切相关,而自由载流子密度变化(Δn_{FC})和晶格温度变化(Δn_{LT})是影响折射系数

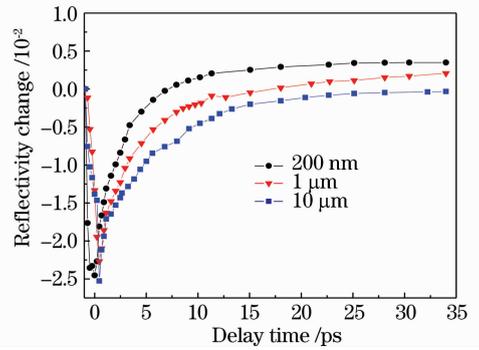


图1 同厚度硅薄膜的瞬态反射率变化

Fig. 1 Transient reflectivity changes at different silicon film thickness

的主要因素^[6,8,9]。其中,自由载流子对折射系数变化的贡献可以用 Drude 模型来描述

$$\Delta n_{\text{FC}} = \left(\frac{\partial n}{\partial N} \right) \Delta N = - \frac{Ne^2}{2n_0 \epsilon_0 \omega^2 m_{\text{ch}}^*}, \quad (1)$$

可见,自由载流子响应对 $\Delta R/R$ 的贡献始终是负的。采用经验值^[10] $\partial n/\partial T = 3.4 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$,则 $\Delta n_{\text{LT}} = (\partial n/\partial T)\Delta T \geq 0$ 。可见,晶格温升对 $\Delta R/R$ 的贡献始终是正的。定义自由载流子与晶格温升的相对贡献比

$$\chi = \frac{\Delta n_{\text{FC}}}{\Delta n_{\text{LT}}} = \frac{(\partial n/\partial N)\Delta N}{(\partial n/\partial T)\Delta T}, \quad (2)$$

则当 $\chi = -1$ 时 $\Delta R/R = 0$, $\chi < -1$ 时 $\Delta R/R < 0$, $\chi > -1$ 时 $\Delta R/R > 0$ 。可以计算出载流子弛豫后的初始状态的 $\chi = -33.1$,与入射能量密度无关,仅与入射光子能量和材料热容有关,说明自由载流子对反射率变化的贡献占主导地位,并且 $\Delta R/R < 0$ 。因此可以预测, $\Delta R/R$ 在抽运光激励后的初始时刻或一段时间内是负的,随着复合机制对能量转化过程的加速,可能变为正值。这一预测得到了实验结果(图2)的验证。

反射率信号的恢复过程主要归因于表面电子向体内的扩散及电子空穴的复合而导致的受激载流子密度 N 的减少。由于初始受激载流子密度 $N_0 > 10^{19} \text{ cm}^{-3}$,Auger 复合是单晶硅中主要的体复合机制,其复合时间常数 $\tau_r = 1/\gamma_3 N_0^2$ (γ_3 为 Auger 复合系数,取 $3.8 \times 10^{-31} \text{ cm}^6/\text{s}$),可估算 τ_r 至少是百皮秒量级,与实验结果不符,因而 Auger 复合对 $\Delta R/R$ 的恢复影响很小。样品表面或界面处通常都含有大量的活跃的复合中心,因而需要考虑 Shockley-Reed-Hall(SRH)型的表面复合机制。这一复合过程使得每个电子-空穴对拥有的约 E_g 的能量被晶格吸收,引起晶格温升,从而影响反射率变化的恢复过程。

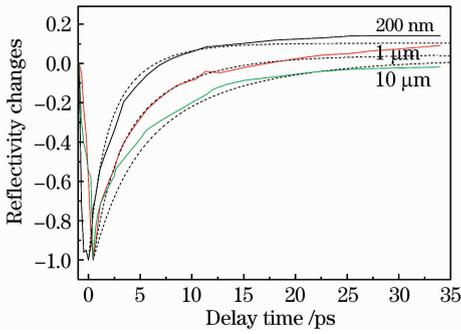


图2 对不同厚度硅薄膜表面瞬态反射率响应的数值模拟(虚线)与实验测量的比较

Fig. 2 Comparison of experimental data (solid lines) with calculated (dashed lines) transient reflectivity changes using coupled diffusion equations for three different silicon thin films

为了分析瞬态反射率变化过程,采用了包含受激载流子密度 N 和晶格温度 T_L 随时间变化的一维模型

$$\frac{\partial N(z,t)}{\partial t} = D_N \frac{\partial^2 N}{\partial z^2} - \frac{N}{\tau_r}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial T(z,t)}{\partial t} = D_T \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{E_g}{C} \frac{N}{\tau_d}, \quad (4)$$

边界条件为

$$SN(0,t) = D_N \left. \frac{\partial N}{\partial z} \right|_{z=0} = \frac{C}{E_g} D_T \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=0}, \quad (5)$$

式中 D_N 为双极扩散系数,也是 N 的函数,对应的扩散时间常数为 $\tau_d = l^2/D_N$ (l 为扩散特征长度); $D_T = 0.88 \text{ cm}^2/\text{s}$ 为硅的热扩散系数; S 为表面复合速度(SRV),直接描述了过剩载流子通过表面电子态的复合率,与有效表面态俘获密度 n_s ,载流子俘获截面 σ_s 和载流子热速度 v_{th} 成正比。

对这一耦合模型在实验测试时间范围内数值求解。由于800 nm抽运光在单晶硅内有较小的衰减系数($9.8 \mu\text{m}^{-1}$),样品表面初始载流子密度梯度很小,因而在实验时间范围内扩散对载流子密度的影响也较小。对不同厚度的单晶硅薄膜表面瞬态反射率变化实验结果的数值模拟如图2所示。随着薄膜厚度的减小, S 逐渐增大,经拟合分别得到平均表面复合速度 $S = 8.8 \times 10^6 \text{ cm/s}$, $1.5 \times 10^7 \text{ cm/s}$ 和 $2.5 \times 10^7 \text{ cm/s}$ 。数值计算与实验结果的较好吻合,进一步证明表面复合是影响表面载流子动力学过程的主要因素。与单晶硅片相比^[6],薄膜材料的表面复合速度(SRV)要大得多,即拥有更大的表面活跃电子态密度,可能归因于薄膜的制作过程(外延生长、离子注入等)更易于在表面或界面处引入缺陷

(对原子周期性结构的破坏)和杂质粒子。因而在相同掺杂浓度下,SRV 随膜厚减小而增大。若假设载流子俘获截面 $\sigma_s \approx 1/n_A$,其中 $n_A \sim 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ 为硅表面原子密度,由 $S = v_{th} n_s/n_A$ 可知,硅薄膜表面态密度 n_s 可高达 10^{15} cm^{-2} 。对于较小的 SRV,受激载流子的贡献主导了反射率变化的响应过程,SRV 越大,晶格温升的贡献就越显著,如图3所示,使得反射率更快地恢复并超越初始值。

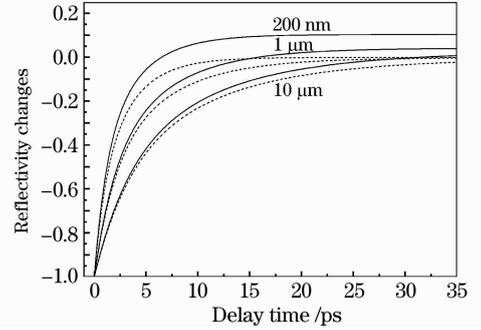


图3 受激载流子(虚线)与载流子和晶格温升共同贡献(实线)对瞬态反射率变化的影响

Fig. 3 Calculated time-dependent reflectivity changes (dashed lines for carrier contribution only, solid lines for both carrier and lattice-temperature contributions)

4 结 论

利用800 nm波长的飞秒抽运-探测技术测量了具有不同厚度单晶硅薄膜的SOI表面的超快反射率变化,并通过一维耦合扩散模型对实验结果进行了数值模拟。研究表明,表面复合速度是影响载流子动力学响应的主要因素,且薄膜厚度越小表面复合速度就越大。对于较小的SRV,受激载流子的超快响应决定了瞬态反射率变化;而对于较大的SRV,晶格温升对瞬态反射率变化的贡献变得显著,使得反射率在更短的时间内恢复并超过初始值。

参 考 文 献

- 1 G. K. Celler, Sorin Cristoloveanu. Frontiers of silicon-on-insulator [J]. *J. Appl. Phys.*, 2003, 93(9):4955~4978
- 2 F. Gamiz, J. B. Roldan, J. A. Lopez-Villanueva *et al.*. Electron transport in silicon-on-insulator devices [J]. *Solid-State Electronics*, 2001, 45:613~620
- 3 Andreas Othonos. Probing ultrafast carrier and phonon dynamics in semiconductors [J]. *J. Appl. Phys.*, 1998, 83(4):1789~1830
- 4 A. D. McConnell, K. E. Goodson. Thermal conduction in silicon micro- and nanostructures [J]. *Annual Review of Heat Transfer*, 2005, 14:129~168
- 5 Jagdeep Shah. Ultrafast Spectroscopy of Semiconductors and Semiconductor Nanostructures [M]. Berlin: Springer, 1998

- 6 Liu Guodong, Wang Guibing, Fu Bo *et al.*. Ultrafast pump-probe reflectivity study of carrier dynamics in silicon surface [J]. *Chinese J. Lasers*, 2008, **35**(9):1365~1369
刘国栋,王贵兵,付博等. 单晶硅表面载流子动力学的超快抽运探测[J]. *中国激光*, 2008, **35**(9):1365~1369
- 7 Edward D. Palik. Handbook of Optical Constants of Solids [M]. London: Academic Press Inc. LTD., 1985
- 8 Andreas Othonos, Constantinos Christofides. Ultrafast dynamics in phosphorus-implanted silicon wafers: The effects of annealing [J]. *Phys. Rev. B*, 2002, **66**(085206):1~10
- 9 Takayuki Tanaka, Akira Harata, Tsuguo Sawada. Subpicosecond surface-restricted carrier and thermal dynamics by transient reflectivity measurements [J]. *J. Appl. Phys.*, 1997, **82**(8):4033~4038
- 10 A. J. Sabbah, D. M. Riffe. Measurement of silicon surface recombination velocity using ultrafast pump-probe reflectivity in the near infrared [J]. *J. Appl. Phys.*, 2000, **88**(11):6954~6956