

# ФІЗИКА

УДК 620.3

Надточій В.О., Уколов О.І., Нечволод М.К., Бугаєвська Д.О.

<sup>1</sup> доктор фізико-математичних наук, завідувач кафедри фізики, ДДПУ

<sup>2</sup> кандидат фізико-математичних наук, асистент кафедри вищої математики і фізики,  
Керченський державний морський технологічний університет

<sup>3</sup> доктор фізико-математичних наук, радник ректора, ДДПУ

<sup>4</sup> студентка 5 курсу фізико-математичного факультету, ДДПУ

e-mail: fiziksgpu@ya.ru

## РОЗРАХУНКИ ПОЛІВ ТЕМПЕРАТУР І ТЕРМІЧНИХ НАПРУЖЕНЬ У ПРИПОВЕРХНЕВИХ ШАРАХ GaAs, ІНІЦІЙОВАНИХ ІМПУЛЬСНИМ ЛАЗЕРНИМ ОПРОМІНЕННЯМ

Досліджено вплив імпульсного лазерного опромінення поверхні *GaAs* з гауссовим і дифракційним розподілом інтенсивності на процеси дефектоутворення. Розраховано розподіл полів температур і термічних напружень протягом дії лазерних імпульсів. Вперше показана можливість створення впорядкованих атомних структур у вигляді атомних кластерів лазерним опроміненням низького рівня, які можуть бути використані в мікроелектронних приладах.

**Ключові слова:** *лазер, дефекти, модуляція, дифракція, випромінювання.*

### Вступ

Серед способів формування напівпровідникових наноструктур найбільше поширення знайшли методи, які ґрунтуються на різноманітних процесах самоорганізації, що діють під час релаксації напружених гетероструктур. Природні механізми, які при цьому використовуються, базуються на спонтанному зародженні та росту структур, що дозволяють керувати геометричними розмірами і місцезнаходженням нанооб'єктів лише у певних межах.

---

© Надточій В.О., Уколов О.І., Нечволод М.К., Бугаєвська Д.О., 2015

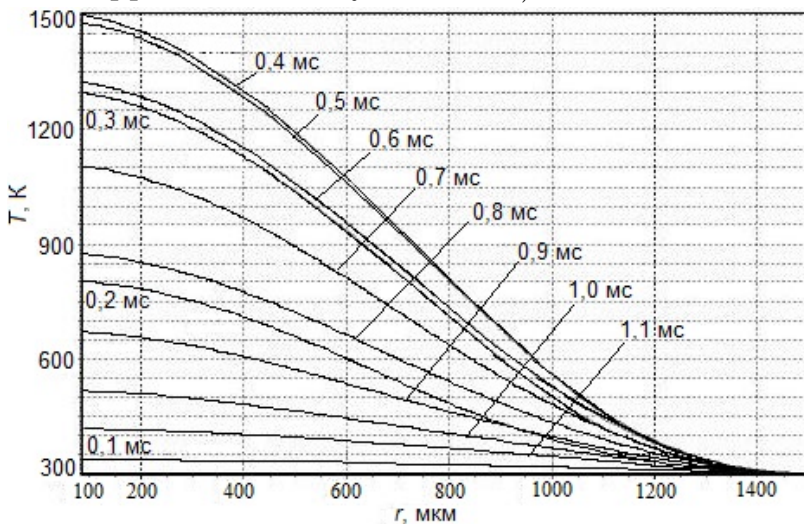
У даній роботі основна увага приділяється новому принципу адресної модифікації морфології приповерхневих шарів арсенію гелію, при якій розподіл окремих елементів масиву наноструктур є керованим процесом. Основою методу є дія на кристал просторово-модульованого лазерного опромінення з низькою інтенсивністю, що не призводить до виникнення розплаву, але стимулює активацію важливих для дефектоутворення ефектів: нагрівання, деформації поверхні та електронного збудження центрів.

## Основна частина

В основу теплової задачі було покладено розв'язання диференціального рівняння другого порядку

$$c\rho\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left( \kappa \frac{\partial T}{\partial t} \right) + g, \quad (1)$$

де  $c$  – теплоємність,  $\rho$  – густина досліджуваної речовини,  $t$  – час від початку дії імпульсу лазерного опромінення,  $z$  – координата углиб кристала,  $\kappa$  – коефіцієнт теплопровідності,  $g$  – тепла потужність, яка вводиться у кристал опроміненням. Миттєве значення визначається з урахуванням використаного режиму випромінювання (імпульс вільної генерації чи модульованої добротності) та просторовим розподілом інтенсивності по лазерній плямі (гауссовий чи дифракційно-модульований).



**Рис. 1.** Розподіл температури взовж радіуса лазерної плями на поверхні  $GaAs$  в різні моменти часу від початку дії лазерного імпульсу ( $E = 1$  Дж,  $\lambda = 694$  нм,  $\tau_p = 1$  мс)

Особливість розв'язування рівняння (1) полягала у необхідності врахування температурної залежності  $c$ ,  $\kappa$  і коефіцієнта поглинання, який неявно входить до значення  $g$ . У даній роботі рівняння (1) розв'язувалось як для гауссового так і для дифракційно-модульованого опромінення кристалів  $GaAs$ . Для комп'ютерних обчислень початкові умови були введені до програми «STRESS» і рівняння (1) розв'язувалось за методом сіток. Результати розрахунків розміщувались у тривимірному масиві даних, які визначають розподіл

температури кристала у різні моменти часу від початку дії лазерного імпульсу. Одержані результати про зміну температури в опроміненій зоні наведені на рис. 1. Вони були використані у подальшому для розрахунку деформації поверхні і встановлення граничних параметрів лазерного опромінення. Розподіл деформацій на опроміненій поверхні в залежності від координат і часу дії лазерного імпульсу знаходився з урахуванням температурної залежності коефіцієнту теплового розширення за формулою

$$\varepsilon = [3,5652(\ln T - 1) - 1,312]T \cdot 10^{-6} - [3,5652(\ln T_0 - 1) - 14,312]T_0 \cdot 10^{-6}, \quad (2)$$

де  $\varepsilon$  – ступінь відносної деформації,  $T_0$  – початкова температура кристалу. Наступним етапом розв’язання було визначення термічних напружень в залежності від температури та координат для різних кристалографічних площин. З урахуванням температурної залежності модуля Юнга і анізотропії кристалу кінцеві формули мають такий вигляд:

$$\sigma = \frac{[3,5652(\ln T - 1) - 1,312]T \cdot 10^{-6} - [3,5652(\ln T_0 - 1) - 14,312]T_0 \cdot 10^{-6}}{S_{11} - 2 \left( S_{11} - S_{12} - \frac{1}{2}S_{44} \right) (\cos^2 \theta_0 \cdot \sin^2 \theta_0)}, \quad (3)$$

$$\sigma = \frac{[3,5652(\ln T - 1) - 1,312]T \cdot 10^{-6} - [3,5652(\ln T_0 - 1) - 14,312]T_0 \cdot 10^{-6}}{S_{11} - \left( S_{11} - S_{12} - \frac{1}{2}S_{44} \right) \sin^2 \theta_0 (1 + 2 \cos^2 \theta_0)}, \quad (4)$$

$$\sigma = \varepsilon / \left( \left( S_{11} - 2 \left( S_{11} - S_{12} - \frac{1}{2}S_{44} \right) \cdot \left( \frac{\sin^2 \theta_0}{6} - \cos^2 \theta_0 \right) + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{2}{3} \left( \frac{\sin^2 \theta_0}{6} - \cos^2 \theta_0 \right)^2 \cdot \sin^2 \theta_0 + \frac{4}{3} \left( \frac{\sin^2 \theta_0}{6} - \cos^2 \theta_0 \right)^2 \right), \quad (5)$$

де формули (3), (4) і (5) можна застосовувати до розрахунків для площин (100), (110) та (111) відповідно. У формулах  $S_{11}$ ,  $S_{12}$ ,  $S_{44}$  – компоненти тензора піддатливості,  $\theta_0$  – кут між вибраним і кристалографічним напрямками, які належать до однієї із вказаних площин.

Дифракційний розподіл інтенсивності при дифракції від екранів з різною товщиною і профілем розраховували за формулами Френеля та Кірхгофа. Визначено коефіцієнт інтенсивності  $k$  при дифракції від напівплощини

(рис. 2)

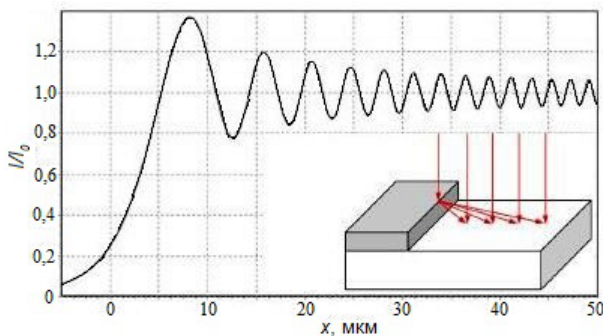
$$\kappa = \frac{I}{I_0} = \frac{\left[ \frac{1}{2} + \xi(\vartheta) \right]^2 + \left[ \frac{1}{2} + \eta(\vartheta) \right]^2}{2} \quad (6)$$

де  $I_0$  – інтенсивність не дифрагованого випромінювання,  $\xi(\vartheta)$  і  $\eta(\vartheta)$  – інтеграли Френеля, що описують спіраль Корню.

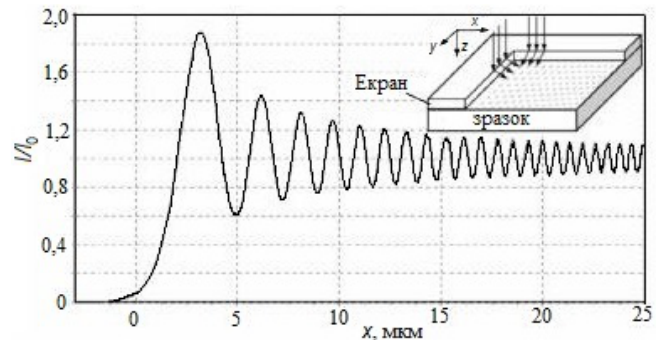
При дифракції від прямокутного вирізу (рис. 3) коефіцієнт розподілу інтенсивності опромінення  $\kappa_I$  знаходиться як добуток розподілу інтенсивності дифрагованого променя від кожної із сторін екрану

$$\kappa_I = \prod_{i=1}^2 \frac{I}{I_0} = \frac{1}{4} \prod_{i=1}^2 \left\{ \left[ \frac{1}{2} + \xi(\vartheta) \right]^2 + \left[ \frac{1}{2} + \eta(\vartheta) \right]^2 \right\}. \quad (7)$$

При такій дифракції майже удвічі збільшуються перепади між мінімальними і максимальними значеннями інтенсивності порівняно із такими ж значеннями для екрану у вигляді напівплощини.



**Рис. 2.** Розподіл інтенсивності опромінення при дифракції від напівплощини ( $\lambda = 694$  нм,  $b = 130$  мкм)



**Рис. 3.** Розподіл інтенсивності опромінення при дифракції від прямокутного вирізу ( $\lambda = 694$  нм,  $b = 10$  мкм)

Наведемо формулу, яка дозволяє чисельно розраховувати амплітуду дифракційно-модульованої електромагнітної хвилі для довільного профілю екрана

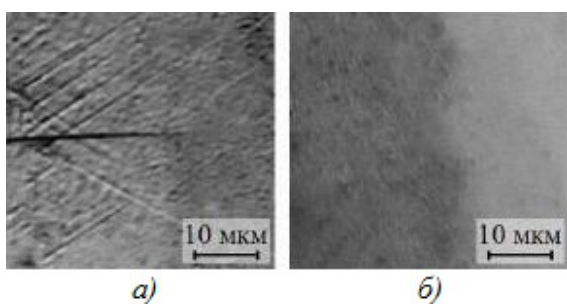
$$E(P) = -\frac{i}{2\lambda} E_0 \sqrt{\left( \sum_{j=0}^N \cos(ks_j)(1 + \cos \varphi_j) \right)^2 + \left( \sum_{j=0}^N \sin(ks_j)(1 + \cos \varphi_j) \right)^2}. \quad (8)$$

У формулі (8)  $s_j$  – відстань від обраної точки на опроміненій поверхні до елементарної площини з номером  $j$  хвильового фронту у площині екрану,

$\varphi_j$  – кут між нормаллю до елемента хвильового фронту і напрямком  $s_j$ ,  $k$  – хвильове число. За формулою (8) був розрахований розподіл інтенсивності опромінення на поверхні кристала при дифракції від екранів нестандартного профілю (квадратного отвору і клиновидного екрану з різною висотою сторін). Теоретично розв'язана зворотна задача синтезу мікроголограми для заданого розподілу інтенсивності на опроміненій поверхні. У такий спосіб можна задавати необхідний розподіл лазерно-індукованих структурних утворень, які можуть мати особливі фізичні властивості.

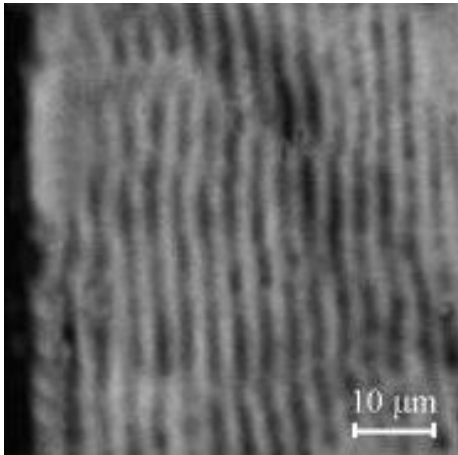
*Утворення дефектів під дією лазерних імпульсів з  $\tau_p = 1$  мс*

1. *Опромінення з гауссовим розподілом інтенсивності.* Експериментально визначена гранична доза  $W_b = 25$  Дж/см<sup>2</sup> опромінення *GaAs* для імпульсу з  $\tau_p = 1$  мс. При  $W > W_b$  на поверхні утворюються лінійні дефекти (рис. 4, а), а при менших значеннях, коли  $W < W_b$ , структурними методами виявляється дефектний шар з підвищеною концентрацією лише точкових дефектів (рис. 4, б). Із порівняння теоретичних розрахунків (рис. 1) та результатів експериментальних досліджень (рис. 4, а і рис. 4, б) встановлено також, що температура на межі між а і б зонами у процесі опромінення сягає 850 К. При ще меншій густині енергії лазерного опромінення, на межі дефектної і не модифікованої поверхні кристала (рис. 4, б), максимальна температура становить  $T \approx 400$  К, а термічне напруження  $\sigma \approx 100$  МПа. Знання граничних температур і напружень, у межах яких створюються лише точкові дефекти у приповерхневих шарах, дозволяє розвивати новий підхід до керування властивостями напівпровідника, який ґрунтується на формуванні поблизу його поверхні нанорозмірних кластерів.



**Рис. 4.** Структури на опроміненій поверхні кристалу *GaAs* лазерним імпульсом з гауссовим розподілом інтенсивності: а – зона пластичності, б – периферійна зона з границею розподілу дефектної (зліва) і не модифікованої частини кристалу ( $\lambda = 694$  нм,  $\tau_p = 1$  мс)

2. *Опромінення з дифракційним розподілом інтенсивності.* Опромінення кристалів дифракційно-модульованими лазерними імпульсами виконувалось при рівнях інтенсивності  $W < W_b$ . При дифракції від екрану у вигляді напівплощини інтенсивність лазерного опромінення на поверхні мала розподіл, який вказано на рис. 2, і не перевищувала 25 Дж/см<sup>2</sup>.

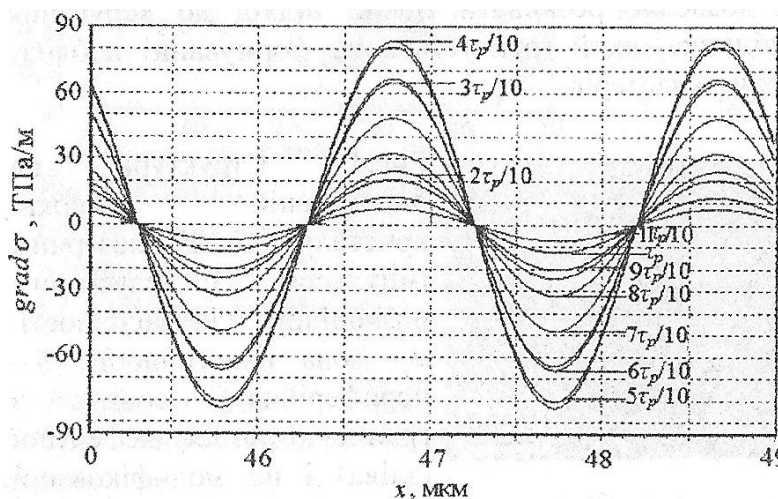


**Рис. 5.** Оптичне зображення періодичного рельєфу на поверхні *GaAs* ( $\lambda = 694$  нм,  $\tau_p = 1$  мс,  $b = 130$  мкм)

Після хімічного травлення опроміненних монокристалів *GaAs* була виявлена лінійно-періодична структура (рис. 5), яка адекватно відображала заданий розподіл енергії. У тому разі, якщо зразки не піддавались хімічному травленню, подібні структури оптичним методом не виявлялись. Цей факт свідчить про те, що при низькому рівні інтенсивності опромінення дефектна структура утворилась у приповерхневому шарі.

На ділянках поверхні з високим рівнем лазерного опромінення  $W > W_b$ , де зароджувались тріщини, лінійно-періодичні структури вказаного вище типу не виявлялись. Це вказує на важливу роль термічних напружень в утворенні періодичних структур, значення яких зменшились внаслідок релаксації.

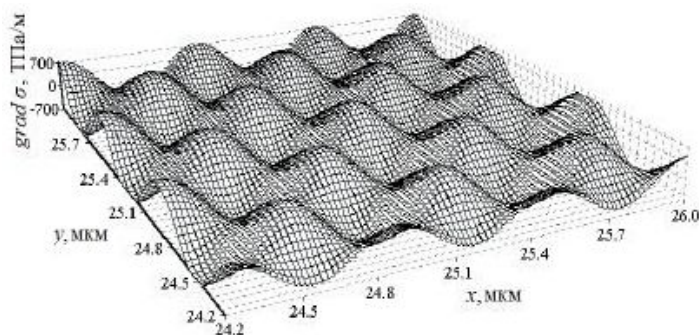
Порівняння експериментальних результатів і чисельних розрахунків приводять до висновку, що максимальні значення термічних напружень утворюються у зонах з максимальною температурою і саме на цих ділянках витравлюються канавки періодичного рельєфу. У віддаленій від екрану зоні на поверхні, де значення періоду дифракційної картини прямує до постійного значення, градієнт термічних напружень сягає величини  $\approx 85$  МПа/мкм (рис. 6).



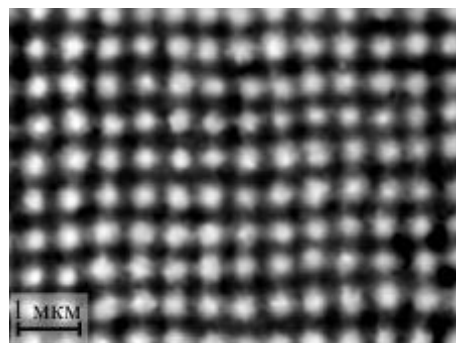
**Рис. 6.** Утворення градієнту термічних напружень на поверхні *GaAs* дією дифракційно-модульованого лазерного опромінення ( $\lambda = 694$  нм,  $\tau_p = 1$  мс,  $b = 130$  мкм)

Для отримання двовимірного розподілу інтенсивності на поверхні опромінення кристалів *GaAs* здійснювалось через непрозорий екран з прямокутним вирізом (рис. 3). При цьому збільшувалась максимальна

температура розігріву поверхні, а тому і градієнт термічних напружень. Окрім цього, градієнт термічних напружень став промодульованим у двох напрямках у площині поверхневого шару (рис. 7). Під дією такого розподілу температури і термічних напружень у приповерхневому шарі монокристала *GaAs* утворилася відповідна дефектна структура (рис. 8) з наведеним на рис. 7 періодом розподілу. Знімок зроблений після хімічного травлення поверхні.



**Рис. 7.** Утворення градієнту термічних напружень на площині (111) монокристалу *GaAs* ( $\lambda = 694$  нм,  $\tau_p = 1$  мс,  $b = 10$  мкмс)



**Рис. 8.** Оптичний знімок опроміненої поверхні *GaAs*. Білі плями-горбки після хімічного травлення ( $\lambda = 694$  нм,  $\tau_p = 1$  мс,  $b = 10$  мкмс)

## Висновки

1. Виконані розрахунки розподілу полів температур, деформацій і термічних напружень, створених дифракційно-модульованим лазерним опроміненням. Запропоновано два варіанти рішення задачі про розподіл термічного напруження – через визначення компонент тензора деформації, або з урахуванням орієнтаційної залежності модуля Юнга.
2. Експериментально знайдено значення граничної щільності енергії  $W_b = 25$  Дж/см<sup>2</sup> опромінення лазерними імпульсами мілісекундної тривалості, нижче якої домінують процеси точкового дефектоутворення.
3. Уперше показана можливість створення періодичних дефектних структур у вигляді атомних кластерів шляхом дифракційно-модульованого імпульсного опромінення ( $\tau_p = 1$  мс) низького рівня. Позиціонування таких структур задається законом модуляції лазерного випромінювання і таким чином вирішується завдання їх адресного і періодичного розподілу.

## Література

1. *Надточий В.А.* Микропластичность алмазоподобных кристаллов (Si, Ge, GaAs, InAs): Дис. . . . доктора физ.-мат. наук: 01.04.07 / Харьковский национальный университет. — Харьков, 2006. — 467 с.
2. *Надточий В.А., Алехин В.П.* Микропластичность монокристаллов Ge при воздействии лазерного облучения и деформации сжатия // Физ. и хим. обраб. материалов. — 2004. — №4. — С. 27–32.
3. *Кашкаров П.К., Тимошенко В.Ю.* Образование дефектов в полупроводниках при импульсном лазерном облучении // Поверхность: физика, химия, механика. — 1995. — №2. — С. 5–34.
4. *Александров Л.Н., Нидаев Е.В., Васильев А.Л.* Дефекты в приповерхностном слое кремния, образующиеся при импульсном лазерном облучении // Письма в ЖТФ. — 1988. — Т.14, №9. — С. 838–841.
5. *Надточій В.О.* Структурні зміни у приповерхневому шарі Ge під дією лазерного імпульсу / М.М. Голоденко, А.З. Калімбет, Д.С. Москаль // Фіз. і хім. твердого тіла. — 2003. — Т.4, №3. — С. 556–559.