

Массоперенос индия в структуре In—CdTe при наносекундном лазерном облучении

© В.П. Велешук, А. Байдуллаева, А.И. Власенко, В.А. Гнатюк, Б.К. Даулетмуратов, С.Н. Левицкий, О.В. Ляшенко*, Т. Аоки**

Институт физики полупроводников им. В.Е. Лашкарева НАН Украины, Киев, Украина

* Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко, Киев, Украина

** Research Institute of Electronics, Shizuoka University, Hamamatsu, Japan

E-mail: vvvit@ukr.net

(Поступила в Редакцию 8 июля 2009 г.)

Исследованы и проанализированы особенности массопереноса индия в высокоомных кристаллах CdTe при наносекундном облучении структуры In—CdTe импульсами лазера. Определены коэффициенты массопереноса и оценена средняя скорость перемещения атомов In в CdTe при облучении. Предполагается, что концентрационная диффузия In в CdTe и перенос атомов примеси фронтом лазерно-индуцированной ударной волны не являются доминирующими механизмами массопереноса при динамическом легировании. Наиболее вероятным процессом, обеспечивающим образование инверсного слоя в поверхностной области кристалла CdTe при наносекундном лазерном облучении со стороны пленки In, является перемещение междоузельных атомов In вследствие термофлуктуационных перескоков под действием движущей силы термоупругих напряжений и градиента температуры.

Работа выполнена при финансовой поддержке 7-й Рамочной программы ЕС (грант N 218000 „COCAE“).

1. Введение

Явление быстрого массопереноса, или высокой подвижности атомов в кристаллах при импульсном лазерном облучении (ИЛО), в настоящее время имеет огромное прикладное значение [1–14]. Например, так называемое динамическое легирование теллурида кадмия в твердой фазе при облучении наносекундными лазерными импульсами структуры In—CdTe все больше привлекает внимание технологов и исследователей в связи с технологичностью, воспроизводимостью и простотой в управлении необходимыми параметрами при изготовлении омических и выпрямляющих контактов для детекторов рентгеновского и гамма-излучения с резким *p*–*n*-переходом на малой глубине [1–3].

В то же время особенности процессов и механизмов массопереноса в твердых телах, в частности в структурах пленка металла—полупроводник, при воздействии на них наносекундного ИЛО, несмотря на обширные экспериментальные [1–8] и теоретические [7–12] исследования, выяснены недостаточно [13,14]. В первую очередь это касается прогнозирования и контролируемого изменения электрофизических свойств полупроводниковых структур и приборов различного назначения на их основе в процессе изготовления. Сложность механизмов массопереноса при наносекундном ИЛО обусловлена нестационарностью, неравновесностью, нелинейностью, высокой скоростью и одновременным протеканием различных физических процессов; в частности, это фазовые превращения, генерация упругих и ударных волн (УВ) [1,10,11,16–20], значительных градиентов темпера-

тур и напряжений [1,5,7,8,10–14], дефектообразование, диффузия и т.д.

Поэтому цель работы состоит в изучении механизма твердофазного легирования в CdTe, которое находит применение при формировании диодных структур для рентгеновских и гамма-детекторов [1–3]. Особое внимание уделено выявлению и анализу особенностей массопереноса при наносекундном ИЛО структуры In—CdTe, в частности выяснению роли в массопереносе одновременно действующих процессов формирования и движения лазерно-индуцированной УВ, нарастания температуры и концентрационной диффузии индия в поверхностном слое CdTe при его динамическом легировании.

2. Коэффициент массопереноса в структуре In—CdTe. Экспериментальные данные

Проведем анализ концентрационного профиля из работы [1] для атомов индия в монокристалле CdTe ориентации (111) после однократного облучения структуры In—CdTe со стороны пленки индия толщиной 30 nm импульсом эксимерного KrF ($\lambda = 0.248 \mu\text{m}$) лазера длительностью $\tau = 20 \text{ ns}$ при $E = 100 \text{ mJ/cm}^2$ (рис. 1, *a*). Профиль получен с помощью Оже-электронной спектроскопии после послойного травливания пучком ионов аргона [1].

Из рис. 1, *a* видно, что глубина проникновения атомов индия l_{In} достигает 60 nm от поверхности CdTe, при этом наблюдается характерный пик на глубине $x = 6 \text{ nm}$,

что объясняется направленным потоком атомов вдоль x со средней скоростью $\langle v_x \rangle$. Наличие максимума носит пороговый характер [8]; он формируется при условии

$$\langle v_x \rangle^2 t > 2D, \quad (1)$$

где D — коэффициент массопереноса, а t — время воздействия лазерного излучения, испарения части пленки и релаксации градиента температуры в диффузионной зоне и термоупругих напряжений (~ 100 ns). Фактически это время движения диффундирующего атома в области действия фронта температурной и упругой волн.

С учетом кинетики процесса проникновения атомов In в CdTe при их нулевой начальной концентрации $C(x, 0) = 0$ концентрационный профиль по глубине может быть описан следующим выражением [8]:

$$C(x, t) = \frac{C_0 h}{2\sqrt{\pi D t}} \left[\exp\left(-\frac{(x - \langle v_x \rangle t)^2}{4Dt}\right) + \exp\left(-\frac{(x + \langle v_x \rangle t)^2}{4Dt}\right) \right], \quad (2)$$

где C_0 — начальная концентрация атомов In в слое толщиной h .

Коэффициент массопереноса (коэффициент диффузии) D находили из выражения $D = (4t \operatorname{tg} \alpha)^{-1}$, где $\operatorname{tg} \alpha$ определяется по углу наклона кривой $\ln(\Delta C_n / \Delta x_n) = f(x^2)$, перестроенной из зависимости концентрационного профиля атомов In в CdTe на рис. 1, *a* графическим дифференцированием по методике [6,21].

На рис. 1, *b* представлено распределение атомов индия в CdTe в координатах $\ln(\Delta C_n / \Delta x_n) - x^2$ для линейризации кривой на рис. 1, *a* от $x = 6$ nm, поскольку концентрация индия убывает приблизительно по экспоненте согласно выражению (2). На этом распределении выделяются три характерных линейных участка, для которых коэффициент массопереноса In в CdTe при ИЛО равен $D_1 = 3.9 \cdot 10^{-6}$ cm²/s (1); $D_2 = 1.46 \cdot 10^{-5}$ cm²/s (2); $D_3 = 5.2 \cdot 10^{-5}$ cm²/s (3).

Из рис. 1, *b* видно, что коэффициент массопереноса возрастает с глубиной и в приповерхностном слое (до 14 nm) меньше, чем в объеме кристалла; это объясняется, вероятно, изменением величины и градиента деформации решетки во время диффузии атомов. Такие же участки с различными D , или изломы на линейризованном распределении диффундирующих элементов (радиоактивных изотопов металлов), наблюдались в различных металлах после их деформации импульсным механическим нагружением со скоростью относительной деформации от 1 до 100 s⁻¹ при повышенных температурах [22].

Линейные участки указывают на объемный характер процесса массопереноса в отличие от диффузии по границам зерен и субзерен. В нашем случае монокристалл CdTe был выращен по технологии низкотемпературного синтеза (поликристаллическая структура практически

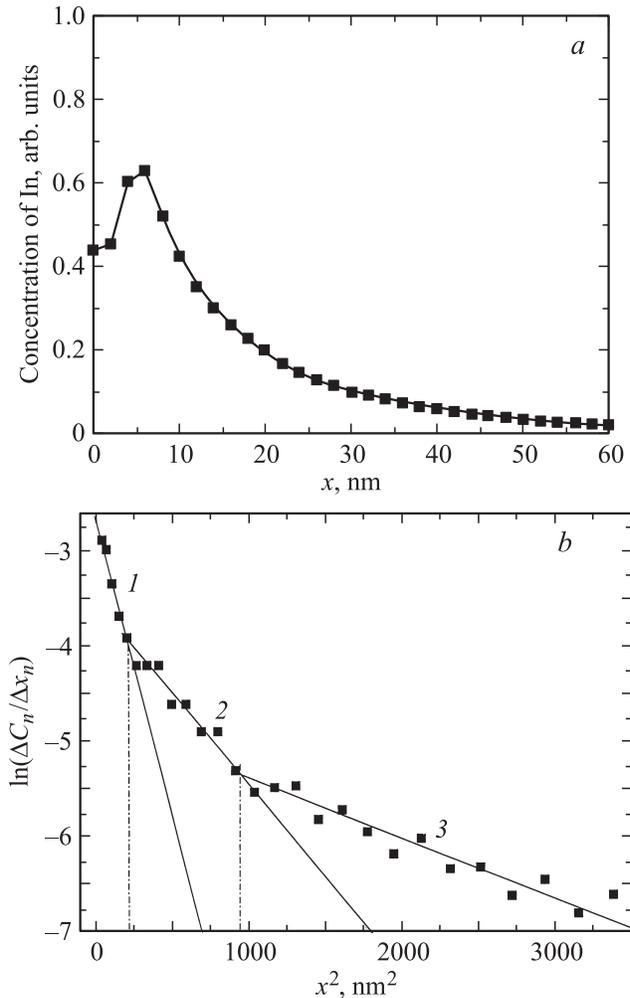


Рис. 1. Концентрационный профиль атомов индия в монокристалле CdTe [1] (а) и его линейризация (б).

отсутствовала), при этом плотность дислокаций была не более чем $\rho_{\text{disl}} \approx 10^4$ cm⁻². Образцы были вырезаны по ориентации (111).

На наличие массопереноса при ИЛО указывают также изменения вольт-амперной характеристики (ВАХ) после ИЛО In–CdTe эксимерным [1–3] или рубиновым лазером. На рис. 2 представлены ВАХ структуры In–CdTe–Au в исходном состоянии (кривая 1) и непосредственно после однократного облучения при $E = 16$ mJ/cm² со стороны индия толщиной 100 nm рубиновым ($\lambda = 0.694$ μm) лазером (кривая 2) в атмосфере аргона при давлении 2 atm. Вид ВАХ после облучения свидетельствует об усилении выпрямляющих свойств контакта In–CdTe и образовании диодной структуры, что указывает на легирование приповерхностного слоя CdTe индием и образование p – n -перехода, как и в [1–3]. Ток утечки при обратном смещении –100 V уменьшился с 233 nA (кривая 1) до 27 nA (кривая 2).

Впоследствии ток утечки при $U = -100$ V на протяжении суток уменьшился с 27 до 17 nA (рис. 3), что указывает на достаточно продолжительные процессы

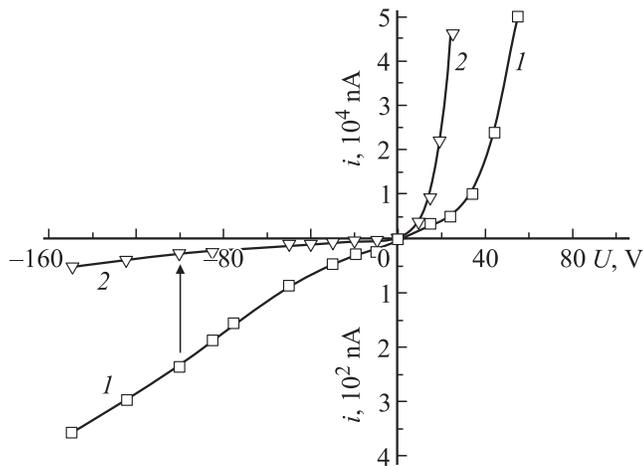


Рис. 2. ВАХ структуры In–CdTe–Au до (1) и после (2) облучения при $E = 16 \text{ мДж/см}^2$.

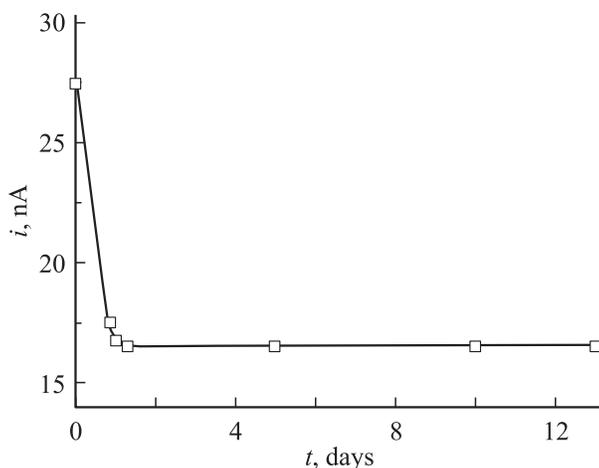


Рис. 3. Изменение тока утечки структуры In–CdTe–Au при $U = -100 \text{ В}$ со временем после облучения при $E = 16 \text{ мДж/см}^2$.

диффузии в приповерхностном слое CdTe, возможно, за счет релаксации остаточных напряжений после облучения. После этого величина тока утечки становится стабильной, что позволяет оценить время этих процессов. Уменьшение тока утечки в течение суток в структурах In–CdTe–Au после динамического легирования наблюдалось в [2].

Поскольку для динамического легирования CdTe используется диапазон толщин пленки In 30–400 нм [1–3], дальнейшие расчеты будем производить для этого диапазона.

3. Анализ механизмов быстрого переноса атомов In в CdTe при ИЛО

3.1. Ударная волна. Одним из возможных механизмов переноса атомов индия в глубь кристалла CdTe при ИЛО может быть многократное индивидуальное столкновение атомов на фронте ударной волны. При этом

через фронт УВ как через поверхность разрыва непрерывности термодинамических величин (нормальный гидродинамический разрыв) течет поток вещества [18]. Под ударной волной будем понимать волну с „опрокинутым“ профилем (фронтом) [18,20], который является движущейся в веществе поверхностью разрыва непрерывности давления, плотности, температуры и других величин.

Действительно, кроме зоны термического воздействия наиболее интенсивная генерация дефектов происходит именно в области фронта УВ в момент ее формирования и движения. Там наблюдается максимум концентрации точечных и структурных дефектов [17], а также максимум микротвердости [19], что указывает на локальный массоперенос. Характерная длина затухания УВ при $E \approx 10\text{--}16 \text{ Дж/см}^2$ равна приблизительно 60–100 $\mu\text{м}$ [17,19].

Глубина образования УВ в индии и CdTe при воздействии на их поверхность лазерного импульса может быть рассчитана по выражению из работы [18]

$$I_{sw} = \frac{2c_l^2\tau}{\xi(m+1)} \left[\frac{2\rho}{\bar{\chi}(\gamma-1)(1-R)E\alpha_\lambda} \right]^{1/2}, \quad (3)$$

где c_l — скорость продольной акустической волны, τ — длительность лазерного импульса, ρ — плотность, ξ — параметр величины ускорения поверхностного слоя [18], m — показатель изэнтропии, $\bar{\chi}$ — эффективное значение коэффициента искажения фронта импульса, γ — показатель адиабаты, R — коэффициент отражения, E — плотность энергии лазерного импульса, α_λ — коэффициент оптического поглощения. Как и в [18], принимаем $\bar{\chi} = 1$, $\xi = 1$, $m = 3$, $\gamma = 5/3$. Учтем, что, согласно [23], в металлах значение скорости распространения импульсов давления при наносекундном ИЛО на 15–30% выше продольной скорости звука.

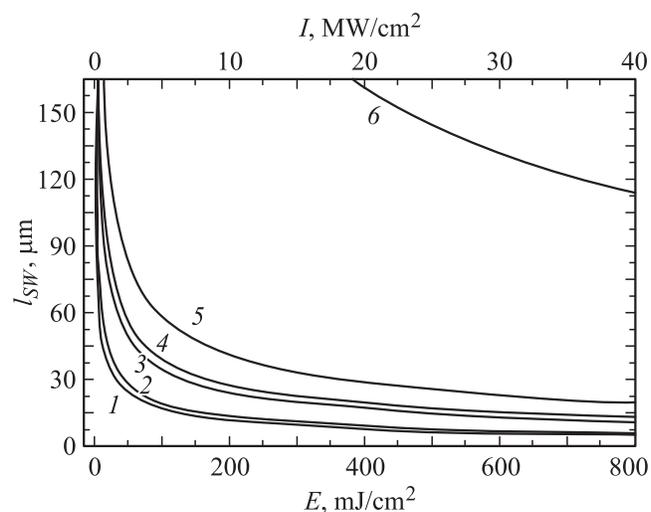


Рис. 4. Глубина образования УВ в In (1–4) и CdTe (5, 6) в зависимости от плотности энергии импульса эксимерного (1, 3, 5) и рубинового (2, 4, 6) лазеров. Для индия $R = 0.6$ (1, 2) и 0.9 (3, 4), для CdTe $R = 0.43$ (5, 6).

На рис. 4 приведен результат расчета глубины образования УВ в индия и CdTe в зависимости от плотности энергии лазерного импульса.

Отметим, что при облучении In–CdTe с учетом большей величины c_1 в CdTe, чем в In, и наличия отражения энергии акустической волны на границе за счет различия акустических импедансов ρc_1 для In и CdTe глубина l_{SW} в CdTe будет большей, чем в индии.

Расчет глубины образования УВ l_{SW} по формуле (3) указывает на то, что такая волна при технологических режимах облучения $E = 10\text{--}500 \text{ мДж/см}^2$ не возникает в пленке индия толщиной до 7 мкм (рис. 4), при толщине In $30\text{--}400 \text{ нм}$ формируется уже в объеме кристалла CdTe на расстоянии, которое намного превышает глубину проникновения индия l_{In} (рис. 1, а), а поэтому процесс формирования и распространения УВ не может являться непосредственным механизмом массопереноса индия в теллуриде кадмия.

3.2. Концентрационная диффузия. При температурах ИЛО значительно активируются процессы диффузии. В одной из пионерских работ по вопросу концентрационной диффузии при ИЛО [9] показано, что на границе пленка–подложка вблизи достижения максимальной температуры металлической пленки активируются на короткое время диффузионные процессы, поскольку коэффициент диффузии D экспоненциально возрастает с повышением температуры.

Для оценки вклада концентрационной диффузии индия в CdTe в процесс массопереноса при температуре ИЛО оценим глубину проникновения l_D атомов индия в глубь CdTe согласно формуле [9]

$$l_D = \sqrt{\int_0^t \frac{2T(t)}{T_D} D(t) dt}, \quad (4)$$

где $D(t) = D_0 \exp(-\frac{T_D}{T(t)})$ — текущее значение коэффициента диффузии, $T_D = E_{act}/k \sim 19000 \text{ К}$ — эффективная температура диффузии, которая соответствует ее энергии активации $E_{act} = 1.6 \text{ эВ}$ [9,24]. Коэффициент диффузии индия в CdTe при температуре от 450 до 1000°C определяется соотношением $D(\text{см}^2/\text{с}) = 4.1 \cdot 10^{-2} \exp(-1.6/kT)$, и при 1000°C $D = 2 \cdot 10^{-8} \text{ см}^2/\text{с}$ [24].

Но даже при таком большом коэффициенте диффузии индия в CdTe при 1000°C и при длительности воздействия $\tau = 20 \text{ нс}$ или за время интенсивной релаксации термонапряжений и градиента температуры ($\sim 100 \text{ нс}$) значение l_D , кратное межатомному расстоянию кристалла, не превышает или равно одной постоянной решетки (для In $a = 3.25 \text{ \AA}$, $c = 4.95 \text{ \AA}$, для CdTe $a = 6.47 \text{ \AA}$) и соответственно намного меньше реальной глубины проникновения атомов индия в CdTe.

Таким образом, механизм концентрационной диффузии также не является доминирующим в процессе массопереноса индия в CdTe при наносекундном ИЛО.

3.3. Тепловой нагрев: плавление и испарение. Для дальнейшего анализа механизма и особенностей массопереноса при ИЛО In–CdTe рассчитаем температуру поверхности металла и соответственно интерфейса In–CdTe согласно [15], где теоретически проанализирован процесс взаимодействия мощного светового потока с тонкой пленкой поглощающего материала (металла) на подложке.

Температура нагрева поверхности тонкой пленки толщиной h ($h \geq \delta$ — глубина скин-слоя) при импульсном лазерном облучении в видимом и ближнем ИК-диапазоне света при $E/\tau < 10^8 \text{ Дж/с} \cdot \text{см}^2$ (когда справедлив тепловой механизм разрушения) определяется выражением [15]

$$\Delta T(t) = \frac{E}{\tau} \frac{A\sqrt{a_2 t}}{\chi_2} \times \left\{ \frac{2}{\sqrt{\pi}} + \gamma\nu \left[\exp\left(\frac{1}{\gamma^2 \nu^2}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{1}{\gamma\nu}\right) - 1 \right] \right\}, \quad (5)$$

где $A = 1 - R$, a — коэффициент температуропроводности, χ — коэффициент теплопроводности, при этом $\nu = \frac{\chi_1 \sqrt{a_2}}{\chi_2 \sqrt{a_1}}$, а $\gamma = \frac{h}{\sqrt{a_1 t}}$. В нашем случае индекс 1 относится к пленке индия, 2 — к CdTe. Здесь $t \leq \tau$.

Величина $\gamma\nu$ фактически является отношением объемных теплоемкостей пленки и прогретого слоя подложки и определяет темп нагрева пленки; глубина диффузии тепла $\sqrt{a_1 t}$ (или прогретого за счет теплопроводности слоя) равна 1 мкм для индия при $t = 20 \text{ нс}$. Глубины скин-слоя $\delta = \lambda/2\pi\kappa$ для индия при показателе поглощения $\kappa = 6$ ($\lambda = 0.694 \text{ мкм}$) и $\kappa = 2.8$ ($\lambda = 0.248 \text{ мкм}$) равны 18.4 и 14 нм соответственно.

Температуру пленки по толщине можно считать примерно одинаковой (с точностью $\sim 10.0\%$) уже через время $t_0 \approx 10h^2/a_1$ от начала импульса [15]. Для пленки индия с толщиной $300\text{--}400 \text{ нм}$ $t_0 \approx 90\text{--}160 \text{ нс}$. По выражению (5) максимальная температура пленки индия с $h = 300 \text{ нм}$ при $E = 100 \text{ мДж/см}^2$ равна 130°C ($R = 0.9$) и 522°C (для $R = 0.6$); соответственно для $h = 30 \text{ нм}$ $T = 254^\circ\text{C}$ ($R = 0.9$) и 1010°C ($R = 0.6$). Это меньше температуры плавления T_{mel} CdTe — 1067°C ; отсюда следует что диффузионные процессы в CdTe происходят в твердой фазе. T_{mel} индия — 157°C . Отметим, что при $R = 0.6$ и $E = 16 \text{ мДж/см}^2$ плавление индия отсутствует, но изменения ВАХ (рис. 2) указывают на массоперенос.

Величина испаренного слоя индия при 100 мДж/см^2 , рассчитанная по приведенным в [15,25] теоретическим выражениям, составляет $\sim 50\text{--}120 \text{ нм}$. В случае $h = 30 \text{ нм}$ пленка полностью испаряется [1], но плавления приповерхностного слоя CdTe не происходит, поскольку с учетом охлаждения за счет интенсивного испарения [25] индия температура будет ниже T_{mel} CdTe. С увеличением энергии ИЛО при некотором E приповерхностный слой CdTe будет плавиться и может включиться механизм перемешивания фаз [4], который в зоне расплава повлияет на механизмы массопереноса In в CdTe в твердом состоянии. Наблюдавшаяся

нами плазма возникает за счет лавинной ионизации образующегося пара при оптическом пробое во время абляции — быстрого испарения атомов индия с поверхности. В то же время нужно отметить, что при образовании плазмы с учетом таких дополнительных каналов распределения энергии лазерного импульса, как скрытая теплота испарения, тепловая энергия испаренных частиц, поглощение плазмой в момент и после пробоя [26], реальная температура пленки и соответственно приповерхностного слоя CdTe будут несколько меньше.

Несмотря на полное испарение пленки In толщиной 30 нм, до момента ее исчезновения часть атомов проникает далеко в глубь CdTe в твердой фазе, что косвенно указывает на значительную скорость процесса массопереноса.

3.4. Особенности массопереноса. Баро- и термодиффузия. Как показано выше, $l_D < l_{in} < l_{sw}$ и поэтому лазерная УВ и механизм чисто концентрационной диффузии индия не являются основными механизмами массопереноса в структуре In–CdTe при данных условиях ИЛО.

В [7] показано, что в металлах массоперенос при наносекундном ИЛО связан с процессами термопластического течения в условиях высокоскоростной (ударной) деформации; при этом количество переносимого вещества определяется числом генерируемых дислокаций, а решающий вклад в лазерно-стимулированный массоперенос имеет кинетическая энергия атомов поверхностного слоя.

В металлах при ИЛО кроме термопластического течения посредством дислокаций переносчиками массы за времена воздействия и релаксации термонапряжений (50–400 нс) являются междоузельные атомы (МА) [6,10,11,13], которые имеют в десятки раз меньшую энергию активации миграции [6,13]. Например, для меди E активации перемещения МА 0.05–0.1 эВ, а вакансии — 1.5–2 эВ; при этом МА более подвижны, чем вакансии [13]. Время жизни МА $\approx 10^{-13}$ с [13].

В то же время в CdTe в исходном состоянии плотность дислокаций $\sim 10^4$ см⁻², а предел его пластичности σ_{pl} приблизительно в 25 раз выше, чем у индия. Микротвердость индия $H_{V\,in} = 10$ –15 МПа меньше, чем у CdTe ($H_{V\,CdTe} = 400$ –600 МПа). Можно предположить, что в отличие от механизма пластичности для индия в CdTe доминирует другой механизм массопереноса.

В [12] предложена модель ускоренного массопереноса в твердых телах под влиянием импульсных нагрузок на основе выполнения принципа пропорциональности между величиной прироста объема и соответствующим увеличением потенциальной энергии при упругом деформировании, при этом коэффициент диффузии

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E_{act}}{k(T + T_\sigma)}\right), \quad T_\sigma = \varepsilon/\alpha_T,$$

где ε — деформация, α_T — коэффициент линейного термического расширения. Созданные локально-поверхностные возмущения (разрыв упругих напряжений)

фронтом (поверхностью) бегущей акустической волны конечной амплитуды в твердом теле из-за наличия в каждый последовательный момент времени значительного градиента механических напряжений в локальных областях (размером порядка $\lambda/2$) вдоль волнового вектора могут приводить к изменению D за счет временного изменения эффективной температуры $T_{eff} = T + T_\sigma$ и соответственно к направленному переносу атомов In фронтом упругой волны.

Согласно нашим расчетам, при ИЛО структуры с $E = 50$ –400 мДж/см² и $R = 0.8$ скорости нарастания и градиенты температуры и давления по глубине достигают значений: $dT/dt = 6 \cdot 10^9$ – $5 \cdot 10^{10}$ К/с, $dT/dx = 10^8$ – 10^9 К/м, $dP/dt = 4 \cdot 10^{15}$ – 10^{16} Па/с, $dP/dx = 3 \cdot 10^{13}$ – $3.6 \cdot 10^{14}$ Па/м.

Продольный градиент давления в твердой фазе при ИЛО $dP/dx = \alpha_T E dT/dx$ рассчитывался с учетом температурных профилей для вычисления dT/dx и давления P на поверхности. Здесь E — модуль Юнга. Такие значительные градиенты T и P обуславливают интенсивную структурную релаксацию преимущественно за счет процессов термопластичности (в индии), баро- и термодиффузии, которые стимулируют глубокое проникновение атомов индия в CdTe.

Следует отметить, что рассчитанный нами коэффициент массопереноса In в CdTe по порядку величины намного превышает коэффициенты диффузии примесей в полупроводниках и сравним с коэффициентом самодиффузии в большинстве жидких металлов ($\sim 10^{-4}$ – 10^{-6} см²/с), но меньше коэффициента массопереноса в железе при наносекундном ИЛО — $1.6 \cdot 10^{-2}$ см²/с [6], что объясняется, возможно, меньшей по сравнению с металлами пластичностью CdTe.

Оценим скорость направленного перемещения атомов индия до области пика на рис. 1, *a* в поле термоупругих напряжений в CdTe. Учтем одновременность процессов испарения поверхности пленки и массопереноса — приблизительную длину переноса атомов индия возьмем $15 + 6$ нм, это сумма половины толщины пленки индия и расстояния до пика на рис. 1, *a*, где концентрация атомов In максимальна. Тогда $\langle v_x \rangle = 21$ нм/100 нс = 21 см/с, при этом критерий (1) с учетом коэффициента массопереноса индия в CdTe в области пика (область I на рис. 1, *b*) выполняется. Данная величина скорости атомов индия является усредненной величиной, поскольку скорость атомов In различается в зависимости от расстояния от поверхности CdTe. В то же время она по порядку величины совпадает со скоростью ионов цинка в *p*–*n*-переходе структур GaAsP (14 см/с) при их перемещении за счет градиента термоупругих напряжений при наносекундном ИЛО [5], а также совпадает со средней скоростью движения атомов $\langle v_x \rangle \approx 13$ см/с в приповерхностном слое металлов при их наносекундном ИЛО [8].

В рамках механизмов обычной (классической) диффузии объяснить значительное ускорение диффузионных процессов при ИЛО только высоким давлением сжатия не удастся, поскольку при сжатии, несмотря на

значительное увеличение концентрации МА, происходит уменьшение концентрации вакансий, а следовательно, и некоторое снижение скорости диффузии. Тем не менее в [13] показано, что, несмотря на высокую подвижность вакансий, стимулированную ИЛО, и на их генерацию при сдвиговой пластической деформации за счет дислокаций, их вклад в процесс массопереноса будет малым и станет существенным лишь при $T \approx T_{mel}$.

Кроме этого, если энергия диффундирующего атома превысит высоту потенциальных барьеров атомов решетки или если энергия ΔE , приобретаемая МА In под действием внешней силы при ИЛО, превысит энергию активации движения Q ($\Delta E > Q$), МА будет „безактивационно“ двигаться по кристаллу — происходит его безактивационный перенос в поле упругой волны, или фактически „туннелирование“ МА мимо атомов решетки [10,11,13].

Но в этом случае давление в упругом импульсе должно превышать 50 GPa при его полуширине 10^{-5} м [10] или должна быть меньшая ширина импульса для достаточного для безактивационного переноса градиента dP/dx . В частности, в [10,11] показано, что ускорение междоузельного атома до скорости, равной скорости распространения нелинейной упругой волны, что приводит к полному „захвату“ МА, возможно при ширине фронта волны в виде солитона $\sim 10^{-8}$ м. Поэтому рассчитанные выше градиенты напряжений недостаточны для осуществления полностью безактивационного движения МА In. Но все же они очень велики и достаточны для быстрого термоактивируемого движения МА в направлении действия силового поля со значительной дрейфовой скоростью $v = D(F_P + F_T)/kT$ под действием внешней движущей силы за счет упругих напряжений (F_P) и градиента температуры (F_T) [5]. Поэтому в нашем случае МА In перемещаются по CdTe путем термофлуктуационных перескоков под действием движущей силы $F = F_P + F_T$.

4. Обсуждение

Глубокое проникновение атомов индия в CdTe качественно можно объяснить следующим образом. При наносекундном ИЛО за счет быстрого (фактически ударного — $\dot{\epsilon} \geq 10^5 \text{ s}^{-1}$) воздействия скорость нарастания температуры и давления в индии настолько велики, что появляется импульс сжатия со значительным градиентом напряжения, который распространяется вглубь и стимулирует интенсивную бародиффузию In в CdTe. Деформация и фазовые переход в In с ударной скоростью, а также давление отдачи паров и плазмы обуславливают кинетическую энергию атомов приповерхностного слоя и их направленный перенос, при этом экспериментально выявленное возрастание D с расстоянием согласуется с фактом увеличения подвижности МА с глубиной [11,22].

За счет градиента давления происходит изменение коэффициента диффузии в локальных областях по направлению волнового вектора — происходит модуляция

D по аналогии с модуляцией энергетических зон за счет сжатия и растяжения решетки и через изменение E_{act} упругой волной. При этом за счет уменьшения энергии образования междоузельных атомов в локальных областях в поле упругой волны возрастает их концентрация. МА к тому же имеют в десятки раз меньшую энергию активации миграции, чем узловые атомы. Атомы индия (преимущественно МА) с поверхности в областях с увеличенным D в поле упругой волны фактически могут ускоряться фронтом и градиентом волны сжатия и переноситься на расстояние, которое определяется временами ИЛО и интенсивной релаксации термонапряжений.

При интенсивном наносекундном ИЛО в структурно-неустойчивом кристалле может возникать и распространяться локализованное в пространстве коллективное возбуждение атомной решетки — солитон [27,28]. Нелинейная продольная волна в областях растяжения и сжатия значительно изменяет энергию активации образования дефектов, что приводит к их пространственному перераспределению [28]. При этом волна плотности точечных дефектов представляет собой уединенную (солитоноподобную) концентрационную волну, которая распространяется в глубь кристалла [29].

Нелинейная упругая волна, также солитоноподобная [27,28], в нашем случае коллапсирует за счет опрокидывания профиля и преобразуется в УВ. При этом глубина ее образования намного больше, чем глубина проникновения атомов индия в CdTe. При ИЛО возбуждается практически весь спектр акустических колебаний — от высокочастотных фононов до килогерцовых частот и ниже. Поэтому в нашем случае можно считать, что образованный при наносекундном ИЛО пакет волн путем бародиффузии переносит в CdTe на определенное расстояние атомы In, а позднее некоторая спектральная часть коллапсирует с образованием УВ.

Таким образом, избыток концентрации МА переносится в сильно деформированной решетке In, что фактически означает наличие пластической волны в упругой волне. При прохождении границы In–CdTe часть энергии волн отразится за счет различия акустических импедансов двух материалов, часть МА рассеется или поглотится на грани.

Отметим, что при увеличении энергии лазерного импульса глубина образования УВ l_{sw} будет уменьшаться, а максимальная глубина проникновения атомов l , как показано в [8,13,14], будет возрастать — происходит их сближение. Это, в частности, указывает на возможность контролируемой модификации электрических свойств теллурида кадмия для изготовления структур и приборов различного назначения на их основе путем изменения концентрации примесных и собственных точечных дефектов в разных частях объема CdTe при ИЛО.

Сделанные в работе расчеты могут быть применены к большинству структур пленка–полубесконечное твердое тело, в том числе пленка металла–полупроводник, для выяснения особенностей массопереноса в различных частях объема структуры при ИЛО в процессе изготовления полупроводниковых структур.

5. Заключение

Определены коэффициенты массопереноса индия в различных областях приповерхностного слоя CdTe при наносекундном облучении эксимерным KrF-лазером структуры In–CdTe с толщиной пленки In 30 nm со стороны металла при $E = 100 \text{ mJ/cm}^2$: $D_1 = 3.9 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$, $D_2 = 1.46 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$, $D_3 = 5.2 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$. При этом установлено, что подвижность диффундирующих атомов In в CdTe зависит от расстояния от поверхности CdTe и при переходе из одной области в другую возрастает.

Установлено, что средняя скорость перемещения атомов In в CdTe при наносекундном лазерном облучении структуры In–CdTe при $E = 100 \text{ mJ/cm}^2$ составляет по порядку величины десятки сантиметров за секунду.

Показано, что процессы концентрационной диффузии индия в CdTe и переноса атомов In фронтом лазерно-индуцированной ударной волны при ее возникновении и распространении не являются доминирующими механизмами массопереноса индия в структуре In–CdTe с толщиной пленки In 30–400 nm при наносекундном лазерном облучении.

Глубокое и быстрое проникновение атомов In в CdTe при наносекундном лазерном облучении структуры In–CdTe объясняется переносом в CdTe атомов индия, стимулированным значительными градиентами давления и температуры за счет механизма баро- и термодиффузии, а также суммарным давлением отдачи при тепловой деформации, фазовым переходом в In и при образовании паров и плазмы с „ударными“ скоростями.

Список литературы

- [1] V.A. Gnatyuk, T. Aoki, Y. Hatanaka. Appl. Phys. Lett. **88**, 242 111 (2006).
- [2] V.A. Gnatyuk, T. Aoki, Y. Hatanaka, O.I. Vlasenko. Phys. Status Solidi C **3**, 4, 1221 (2006).
- [3] V.A. Gnatyuk, T. Aoki, Y. Hatanaka, O.I. Vlasenko. Appl. Surf. Sci. **244**, 1–4, 528 (2005).
- [4] Н.К. Зеленина, О.А. Матвеев. Письма в ЖТФ **24**, 1 (1998).
- [5] Г.А. Сукач. ФТП **31**, 753 (1997).
- [6] М.Е. Гуревич, Л.Н. Лариков, В.Ф. Мазанко, А.Е. Погорелов, В.М. Фальченко. Физика и химия обраб. материалов **2**, 7 (1977).
- [7] М.Е. Гуревич, А.Ф. Журавлев, Ю.В. Корнюшин, А.Е. Погорелов. Металлофизика **7**, 113 (1985).
- [8] М.Е. Гуревич, А.Ф. Журавлев, Л.Н. Лариков, В.Г. Новицкий, А.Е. Погорелов. Металлофизика **3**, 108 (1981).
- [9] М.Н. Либенсон, М.Н. Никитин. Физика и химия обраб. материалов **1**, 9 (1973).
- [10] А.Н. Бекренев, Г.Н. Эпштейн. Последеформационные процессы высокоскоростного нагружения. Металлургия, М. (1992). 159 с.
- [11] В.А. Путилин, А.М. Штеренберг, А.В. Камашев, А.И. Крестелев. Вестн. Самар. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки **9**, 190 (2000).
- [12] Ю.Я. Мешков, Д.С. Герцрикен, В.Ф. Мазанко. Металлофизика и новейшие технологии **18**, 52 (1996).

- [13] Д.С. Герцрикен, В.Ф. Мазанко, В.М. Тышкевич, В.М. Фальченко. Массоперенос в металлах при низких температурах в условиях внешних воздействий. РИО ИМФ, Киев (1999). 436 с.
- [14] В.М. Миронов, В.Ф. Мазанко, Д.С. Герцрикен, А.В. Филатов. Массоперенос и фазообразование в металлах при импульсных воздействиях. Самар. ун-т, Самара (2001). 232 с.
- [15] М.Н. Либенсон. Физика и химия обраб. материалов **2**, 3 (1968).
- [16] А. Байдуллаева, А.И. Власенко, Б.Л. Горковенко, А.В. Ломовцев, П.Е. Мозоль. ФТП **34**, 443 (2000).
- [17] Б.К. Даулетмуратов. Канд. дис. Киев (1998). 143 с.
- [18] В.А. Янушкевич. Физика и химия обраб. материалов **5**, 9 (1975).
- [19] А.Н. Валяев, А.Д. Погребняк, В.И. Лаврентьев, С.Н. Волков, С.В. Плотников. Письма в ЖТФ **24**, 47 (1998).
- [20] Г.А. Остроумов. Основные нелинейной акустики. Изд-во ЛГУ, Л. (1967). 132 с.
- [21] П.Л. Грузин, Ю.Д. Жаров, С.В. Земский, Ю.А. Поликарпов. В кн.: Диффузия в металлах и сплавах. Изд-во Тул. политехн. ин-та, Тула (1968). С. 279.
- [22] В.М. Миронов, О.А. Миронова, Л.А. Митлина, Д.С. Герцрикен, А.И. Игнатенко. Физика и химия обраб. материалов **4**, 77 (2006).
- [23] Ю.В. Судьенков, А.И. Павлишин. Письма в ЖТФ **29**, 14 (2003).
- [24] П.И. Баранский, В.П. Ключков, И.В. Потыкевич. Полупроводниковая электроника. Справочник. Наук. думка, Киев (1975). 704 с.
- [25] Г.Н. Дульнев, Н.А. Ярышев. Теплофизика высоких температур **5**, 322 (1967).
- [26] А.В. Булгаков, Н.М. Булгакова. Квантовая электрон. **27**, 154 (1999).
- [27] Е.Е. Слядников. ФТТ **47**, 469 (2005).
- [28] Ф. Мирзоев, Л.А. Шелепин. ЖТФ **71**, 23 (2001).
- [29] Ф. Мирзоев, Л.А. Шелепин. Письма в ЖТФ **25**, 90 (1999).