

# 离子注入硅片的 CW CO<sub>2</sub> 激光退火 固相外延模型

沈金萱 屈逢源

(复旦大学物理系)

1981年11月12日收到

## 提 要

本文把部份线性化和隐格式方法运用于数值求解非线性非齐次热传导方程,得到相应的差分方程,从而把数值求解热传导方程从目前所能计算的 ns 级 Q 开关脉冲激光退火过程推广到 ms 级以上的 CW CO<sub>2</sub> 激光退火过程。在计算中,提出了近似计算径向热传导散热的准静态模型,并考虑了硅的热传导率和吸收系数随温度的变化。计算获得了各退火参数间的一系列关系。对于再结晶厚度和激光扫描速度间的关系,理论计算和实验结果基本相符。

## 一、引 言

近几年来,国外对离子注入半导体的激光退火进行了大量研究工作,脉冲激光退火<sup>[1]</sup>和 CW 激光退火<sup>[2,3]</sup>多有报道。其中大多数是关于实验工作的论文,也有若干篇报道了对激光退火过程的理论计算,其中以 P. Baeri<sup>[4]</sup> 和 M. Lax<sup>[4,5]</sup> 为代表。前者计算了 ns 级的 Q 开关红宝石脉冲激光的退火过程,此法由于受条件  $K\Delta t/c\rho(\Delta z)^2 < \frac{1}{2}$  的制约(K、c、ρ分别为材料的热导率、比热和密度,Δt、Δz为时间和空间步长),并且也没有提出径向传导散热的问题,所以不能推广到 CW 激光退火领域。后者考虑热传导方程在半无穷大样品中的稳态解析解,此法不了解激光退火的过程,也很难处理材料的光吸收系数随温度剧烈变化的退火过程。

本文讨论离子注入硅片的 CW CO<sub>2</sub> 激光退火固相外延模型,理论计算主要有三个特点:

1. 用部份线性化和隐格式方法处理描述激光退火过程的非线性非齐次抛物型偏微分方程,获得相应的差分方程作为数值解法的基础。从而可以在保证空间分辨率的前提下,不受条件  $K\Delta t/c\rho(\Delta z)^2 < \frac{1}{2}$  的限制,选择合适的时间步长,用较少计算时间实现对 ms 级以上激光退火过程的数值计算。

2. CW CO<sub>2</sub> 激光退火,辐照样品的时间约在 ms 以上,为此,在计算中必须考虑样品的辐照区向无辐照区的传导散热。本文提出准静态近似,作为该散热修正的物理模型。

3. 在计算中同时考虑了样品的热传导率和吸收系数随温度的剧烈变化。

作者把理论计算的结果用于指导 CW CO<sub>2</sub> 激光对硼、磷离子注入硅片的退火。采用电学、光学等测量手段,把 CW CO<sub>2</sub> 激光退火的离子注入硅样品和炉子热退火样品作比较,实验数据和理论计算结果基本相符。

## 二、CW CO<sub>2</sub> 激光退火的理论计算

### 1. 计算的物理模型

当 CW CO<sub>2</sub> 激光辐照样品时,样品中的自由载流子吸收 10.6 μm 的红外光能,然后通过碰撞把能量传给晶格,使样品温度升高。通常, CW CO<sub>2</sub> 激光束直径  $2a \gg$  样品厚度  $l$ , 激光束相对样品的移动速度  $\ll$  热在样品中的传播速度,若讨论束斑中心部份,可考虑为一维近似,此时热量在样品中传导遵守的热传导方程为

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left[ K(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right] = Q_{in} - Q_{out}. \quad (1)$$

式中  $Q_{in}$  和  $Q_{out}$  分别是样品吸收和耗散的功率密度。方程(1)是个非线性非齐次的偏微分方程,一般不存在解析解。但是如果用数值计算获得  $T(z, t)$ , 则  $t$  时刻样品注入层的再结晶厚度  $d$  为<sup>[6]</sup>,

$$d = d_0 \int_0^t \exp \left[ -\frac{E_a}{k_B T(t')} \right] dt'. \quad (2)$$

其中  $k_B$  为 Boltzmann 常数,  $E_a$  为激活能,对纯硅沿  $\langle 100 \rangle$  方向,  $E_a = 2.35 \text{ eV}$ ,  $d_0 = 3.2 \times 10^{14} \text{ \AA/sec}$ .

对于硅的热导率  $K$ , 温度在室温到 1700K 范围,有以下解析式<sup>[6]</sup>,

$$K(T) = \frac{A}{T - T_K}. \quad (3)$$

式中  $A = 299 \text{ W/cm}$ ,  $T_K = 99 \text{ K}$

对激光退火,使硅片样品温度升高的热源项  $Q_{in}$  为,

$$Q_{in} = (1 - R)I\alpha(x) \exp \left[ -\int_0^x \alpha(z') dz' \right]. \quad (4)$$

式中,  $I$  是人射到样品表面的激光束功率密度,在一维近似下,可假设其空间分布是均匀的,对于低功率密度的 CW CO<sub>2</sub> 激光,可以忽略波形的前沿和后沿。

$R$  是样品表面对激光的反射率。它与表面处理工艺、注入情况、温度和晶格有序程度等因素有关,通常,在计算中  $R$  取平均值。

$\alpha$  是吸收系数。自由载流子吸收系数的经典公式是,

$$\alpha = \frac{N e^2 \lambda^2}{m^* 8 \pi^2 n c^3 \tau}. \quad (5)$$

其中,  $N$  是载流子浓度,  $e$  为电子电量,  $\lambda$  为被吸收的光波波长,  $n$  是材料折射率,  $\tau$  是弛豫时间,  $c$  是光速,  $m^*$  是载流子的有效质量,注意到载流子迁移率  $\mu$  和  $\tau$  间的关系,可得,

$$\alpha \sim N / \mu m^*. \quad (6)$$

对于  $\alpha$  和温度的关系,作者用最小二乘法处理实验得到的数据,对 M. R. T. Siregar<sup>[7]</sup> 发

表的  $40 \cdot \text{cm}$  N 型硅在  $10.6 \mu\text{m}$  波长的实验吸收系数曲线, 采用  $\ln \alpha = a_1 T^2 + a_2 T + a_3$  形式的函数逼近, 得到的结果为,

$$\alpha = \exp(5 \times 10^{-6} T^2 + 2.635 \times 10^{-4} T + 1.4986). \quad (7)$$

对于实验曲线温度范围以外的部份, 则由外推法得到. 然后根据(6)式获得各种不同电阻率样品吸收系数的表达式.

需要指出, 对于注入层, 没有成熟的理论和数据, 其热传导率和吸收系数不仅与温度、注入情况有关, 而且随退火过程中晶格不断有序化而变化. 但是, 通常注入层厚度仅几千  $\text{\AA}$ , 而衬底厚度约几百  $\mu\text{m}$ , 红外光能主要为衬底单晶吸收. 为此, 作者用(3)式、(6)式和(7)式近似描写注入层的  $K$  和  $\alpha$ .

CW  $\text{CO}_2$  激光退火必须考虑辐照区间无辐照区的传导散热. 作者提出准静态模型来近似估算此散热项, 这对于满足一维近似条件的情况可大大简化数学处理. 由于热扩散通过样品几千  $\text{\AA}$  距离的特征时间为  $10^{-10} \text{sec}^{[1]}$ , 因此在离激光束中心几  $\text{mm}$  的范围内建立一个平衡分布的时间估计在  $\mu\text{s}$  数量级. 假定在数值计算的每个时间步长内, 激光辐照区通过热传导在其周围建立一个稳定的温度分布, 由此物理模型估算出径向传导散热  $Q_{r, \text{out}}$ , 这就是所谓准静态近似.

准静态模型计算: 把辐照区看成一个半径为  $a$  厚为  $l$  的圆柱, 在  $r = a$  处的温度分布为  $f(x)$ , 在辐照区周围  $r = b$  处温度降为样品的预热温度  $T_0$  (见图 1),  $b$  称为径向传导散热的有效半径. 在  $a < r < b$ ,  $0 < z < l$  的中空圆柱内, 温度分布满足 Laplace 方程,

$$\nabla^2 T = 0. \quad (8)$$

边界条件:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=0, l} = 0, \quad T(a, z) = f(x), \quad T(b, z) = T_0. \quad (9)$$

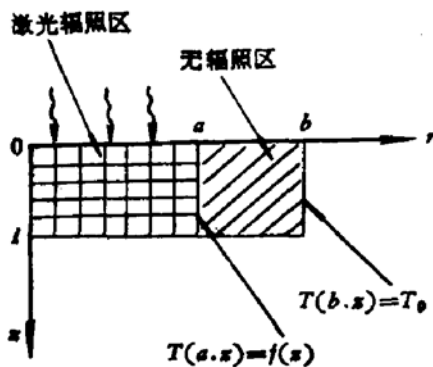


图 1 准静态模型计算示意图  
和  $K_0$  为零阶变型 Bessel 函数.

考虑  $f(x) = T_1 = \text{常数}$  的情况, (10)式可简化为,

$$T(r, z) = \frac{T_0 \ln r/a + T_1 \ln b/r}{\ln b/a}. \quad (11)$$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=0} = \frac{T_0 - T_1}{a \ln b/a}. \quad (12)$$

利用边界条件式(9), 解式(8), 可得,

$$\begin{aligned} T(r, z) = & \frac{2}{l} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{F_0(n\pi r/l, n\pi b/l)}{F_0(n\pi a/l, n\pi b/l)} \\ & \times \cos \frac{n\pi}{l} z \int_0^l f(z') \cos \frac{n\pi}{l} z' dz' \\ & + \frac{T_0 \ln r/a + \frac{1}{l} \int_0^l f(z') dz' \cdot \ln b/r}{\ln b/a}. \end{aligned} \quad (10)$$

其中  $F_0(x, y) = I_0(x)K_0(y) - K_0(x)I_0(y)$ ,  $I_0$

单位底面积的圆柱,其侧面单位长度的散热速率为,

$$Q'_{\text{out}} = -2\sqrt{\pi} \left( K \frac{dT}{dr} \right)_{r=a}. \quad (13)$$

由 S. C. Tsou (邹世昌)等发表的数据<sup>[3]</sup>,可以估计出  $\frac{b}{a}$  在 1.6 左右. 对于满足一维近似和绝热边界条件的低功率密度激光退火过程, 表面层和样品底层间的温差很小 (参见图 3), 因此, (11) 式是个良好的近似.

如要进一步考虑退火过程中, 样品表面和底面的辐射散热  $Q_{\text{rad}}$  和其周围空气的自然对流冷却散热  $Q_{\text{conv}}$ <sup>[8]</sup>, 只要在 (1) 式中令

$$Q_{\text{out}} = Q_{\text{rout}} + Q_{\text{rad}} + Q_{\text{conv}}. \quad (14)$$

实际计算表明,  $Q_{\text{rad}}$  和  $Q_{\text{conv}}$  对结果的影响与  $Q_{\text{rout}}$  相比是次要的.

## 2. 计算方法

在  $z-t$  平面上取差分网格, 设  $\Delta z$  和  $\Delta t$  分别为自变量  $z$ 、 $t$  的改变量.

$$z_k = K\Delta z, \quad k = 0, 1, \dots, m+1. \quad (15.1)$$

$$t_j = j\Delta t, \quad j = 0, 1, \dots. \quad (15.2)$$

隐格式差分格式在时间坐标上取向后差商, 在空间坐标上取中心差商, 即:

$$(\Delta_t T)_{k,j} = (T_{k,j} - T_{k,j-1})/\Delta t. \quad (15.3)$$

$$(\delta_z^2 T)_{k,j} = (T_{k+1,j} - 2T_{k,j} + T_{k-1,j})/(\Delta z)^2. \quad (15.4)$$

部份线性化方法假设在每个空间层次上  $K$  可视为常数, 从而提出偏微分号, 在差分网格点  $(k, j)$  上, (1) 式可写成差分形式,

$$\begin{aligned} (1 + 2P_{k,j-1})T_{k,j} - P_{k,j-1}T_{k-1,j} - P_{k,j-1}T_{k+1,j} \\ = T_{k,j-1} + \frac{\Delta t}{c\rho} [(Q_{\text{in}})_{k,j-1} - (Q_{\text{out}})_{k,j-1}]. \end{aligned} \quad (16)$$

其中

$$P_{k,j} = K(T_{k,j})\Delta t/c\rho(\Delta z)^2. \quad (17)$$

当取绝热边界条件时,

$$\left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=0,j} = 0. \quad (18.1)$$

相应的差分近似为,

$$T_{0,j} = T_{1,j}, \quad T_{m,j} = T_{m+1,j}. \quad (18.2)$$

当样品底面处于恒温源上时,

$$T_{m+1,j} = T_0. \quad (18.3)$$

初始条件为

$$T_{k,0} = T_0. \quad (18.4)$$

式(16—18.4)组成了非线性热传导方程的完整差分方程组, 可由此方程组求得  $T(z, t)$ .

## 3. 计算结果

作者在 719 计算机上计算了不同条件下 CW CO<sub>2</sub> 激光对离子注入硅片的退火过程.

基本参数是, 硅片厚度  $l = 300\mu\text{m}$ , 红外反射率  $R = 0.43$ , 空间分辨率  $\Delta x = 10^3 \text{ \AA}$ , 时间步长  $\Delta t = 10^{-2} - 10^{-3} \text{ sec}$ .

图 2 表示在各种激光功率密度辐照下, 样品表面层温度随时间的变化, 平衡温度随功

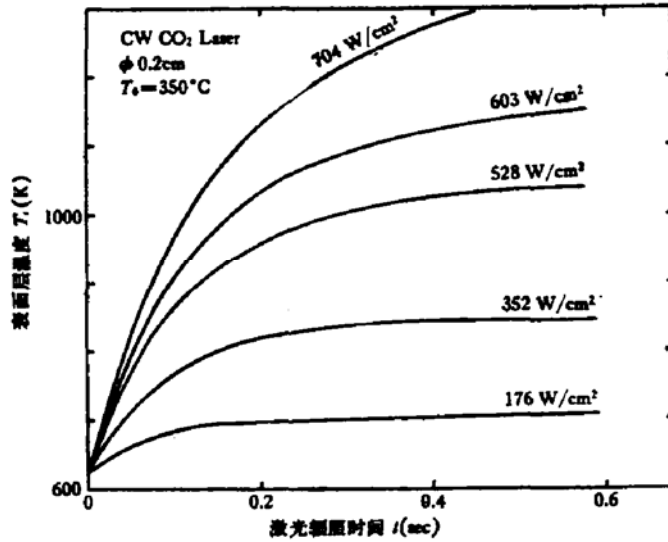


图 2 CW CO<sub>2</sub> 激光退火过程中, 样品表面层温度和辐照时间的关系

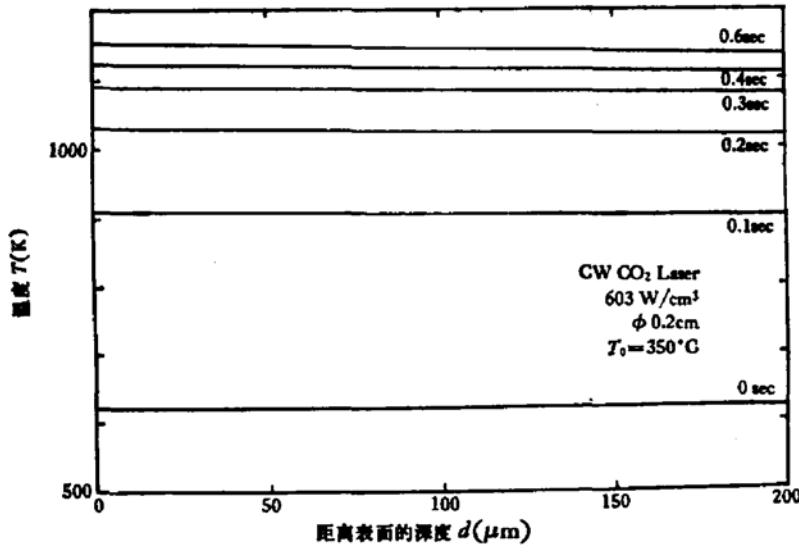


图 3 CW CO<sub>2</sub> 激光退火(绝热边界条件)过程中, 样品体内的温度分布

率密度的增加而相应提高。

图 3 描绘了用  $603\text{W}/\text{cm}^2$  的激光辐照样时, 样品体内温度随深度的变化关系。由图可见, 在低功率密度激光辐照和绝热退火条件下, 样品体内温度梯度很小。

如果样品置于恒温源上激光辐照, 在忽略径向热传导散热项时, 样品体内温度分布如图 4 所示。与图 2 和图 3 比较可见, 相同的激光功率密度, 恒温辐射下表面的平衡温度要低得多。计算表明, 要达到同样的表面平衡温度, 恒温辐照所需激光功率密度比绝热辐照要大一到二个数量级。

图 5 示出激光束斑直径大小对温升的影响。对  $131\text{W}/\text{cm}^2$  的激光束, 当直径从  $0.2\text{cm}$

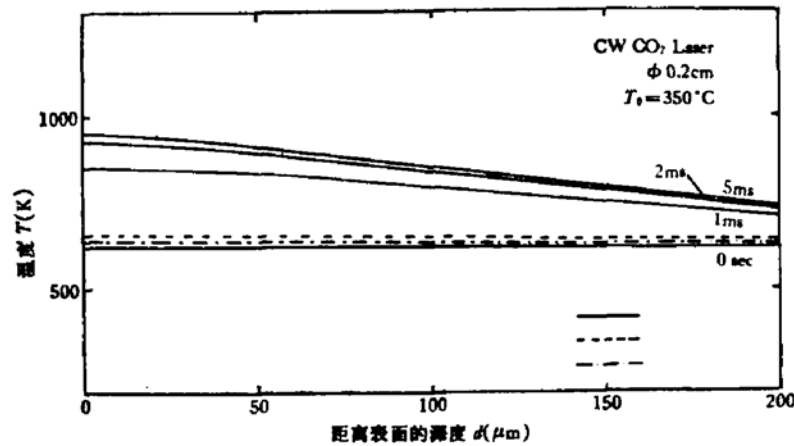


图 4 样品置于恒温源上时,体内的温度分布

—— 7368 W/cm<sup>2</sup>    - - - 1953 W/cm<sup>2</sup>    - · - · 1065 W/cm<sup>2</sup>

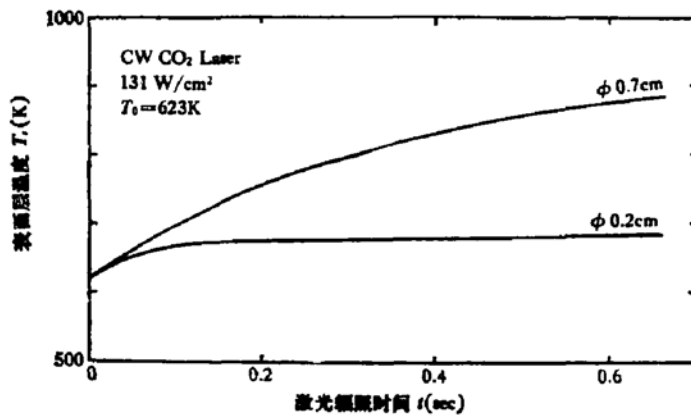


图 5 CW CO<sub>2</sub> 激光束直径对退火升温过程的影响

增大到 0.7cm<sup>2</sup> 时,表面层平衡温度从 680K 增加到 900K。原因是径向传导散热在样品总的吸收能量中所占的比例随束斑直径增大而下降。

图 6 示出样品预热温度对升温的影响。528 W/cm<sup>2</sup> 的激光束辐照未预热的硅片,表面温度只能达到 330K 左右,而当预热温度增加到 723K 时,表面温度可达 1200K。因为预热增加了样品中的自由载流子浓度和它对光子的俘获截面,使  $\alpha$  增大,另一方面预热减小了辐照区和无辐照区之间的温差,使径向传导散热  $Q_{\text{out}}$  下降。

### 三、理论计算和实验结果的比较

作者用 S. C. Tsou 等发表的实验数据<sup>[3]</sup>作了数值计算。计算结果示于图 7。图中曲线代表在 S. C. Tsou 等所用的实验条

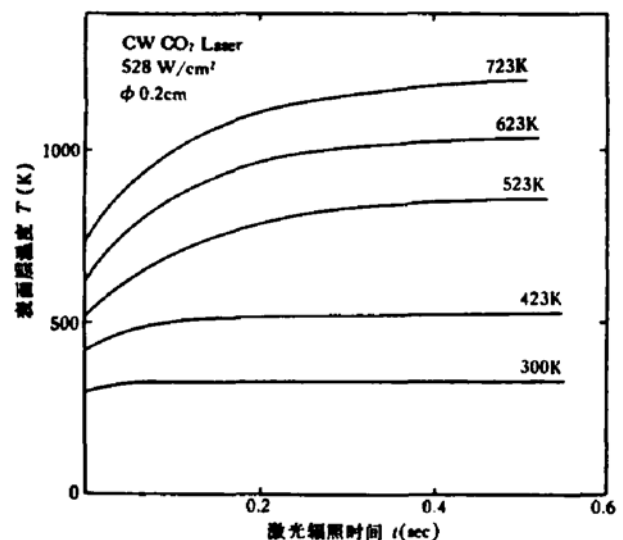


图 6 预热温度  $T_0$  对 CW CO<sub>2</sub> 激光退火升温过程的影响

件下要获得一定的再结晶厚度理论上允许的最大扫描速度(又称临界扫描速度)。符号 $\Delta$ 相应于他们测量得到的使厚度约 1800 Å 的注入层再结晶的临界值。

作者根据理论计算的结果,在自己的实验室中对注硼的硅片(能量为 40keV和 60keV,剂量为  $1.5 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$ )和注磷的硅片(能量为 80keV,剂量为  $3 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$ )用 CWCO<sub>2</sub> 激光扫描进行退火。激光器的输出功率为 36W,束斑直径 0.35cm,激光退火和热退火(900°C, 30分)的样品采用方型电阻器, Van der Pauw 图形,椭圆偏振仪等手段进行测量<sup>[9]</sup>。实验结果和理论计算曲线一并示于图 8。理论曲线把再结晶厚度  $d$  和扫描速度  $v$  组成的平面分为二部份。下面部份的退火条件可使  $d$  大于损伤深度,对应退火能形成良好的单晶;上面部份的退火条件则不能形成良好的单晶或完全不能使损伤恢复。曲线附近是临界区域。

由上可见, S. C. Tsou 等发表的实验数据和作者的实验结果均与理论计算大致相符。

#### 四、结 语

本文系统报道了对离子注入硅片的 CW CO<sub>2</sub> 激光退火过程的研究结果。CW CO<sub>2</sub> 激光退火所需的辐照时间在 ms

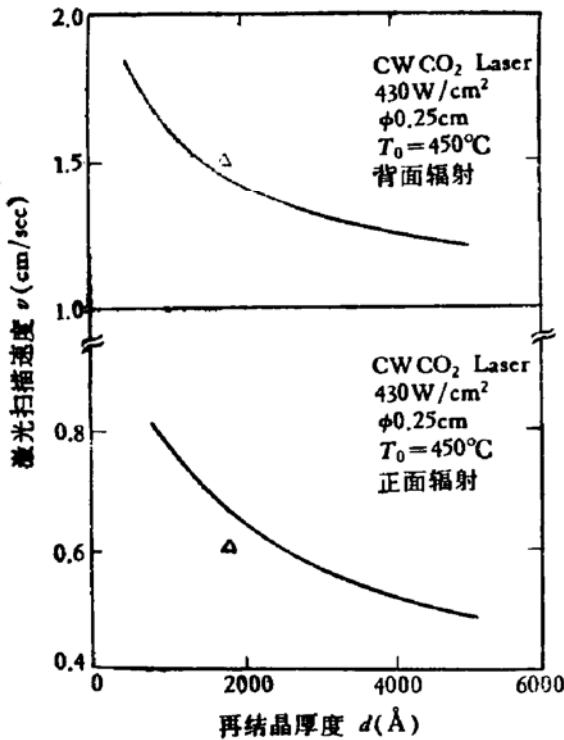


图7 参照 S. C. Tsou 实验数据计算所得激光扫描速度  $v$  和再结晶厚度  $d$  的关系曲线。图中符号 $\Delta$ 代表 S. C. Tsou 实验得到的临界值位置

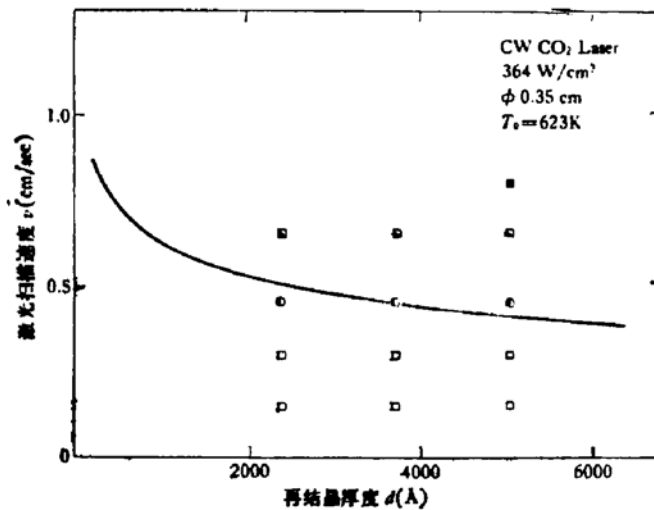


图8 CW CO<sub>2</sub> 激光 ( $364 \text{W/cm}^2$ ,  $\phi = 0.35 \text{cm}$ ,  $T_0 = 350^\circ\text{C}$ ) 退火的扫描速度和再结晶厚度的关系。图中符号 $\square$ 、 $\blacksquare$ 和 $\blacktriangle$ 分别代表注入层完全退火、部分退火和无明显退火效果的情况。 $\bullet$ 代表注入层接近临界退火的情况

以上,各种散热因素对退火效果有显著影响,决定再结晶层厚度的主要参数是激光功率密度、束斑直径、样品预热温度和扫描速度. 本文提出的用部份线性化和隐格式方法及描述径向传导散热的准静态模型求解非线性热传导方程,所得数值计算的结果和实验结果大致相符.

本文是在复旦大学谢希德教授指导下完成的. 上海冶金所邹世昌副研究员和华东师范大学王济身副教授对本文曾提了宝贵意见,复旦大学吴沈荣、吴美娟同志就本文的数学方法问题与作者进行了有益的商讨,在此一并表示衷心感谢.

### 参 考 文 献

- [1] P. Baeri, S. U. Campisano, G. Foti and E. Rimini *J. Appl. Phys.*, **50**, 788 (1979).
- [2] M. Takai, P. H. Tsien, S. C. Tsou, D. Rösenthaller M. Ramin, H. Ryssel and I. Ruge, *Appl. Phys.*, **22**, 129 (1980).
- [3] S. C. Tsou, P. H. Tsien, M. Takai, D. Rösenthaller, M. Ramin, H. Ryssel and I. Ruge, *Appl. Phys.*, **23**, 163 (1980).
- [4] M. Lax, *J. Appl. Phys.*, **48**, 3917 (1977).
- [5] M. Lax, *Appl. Phys. Lett.*, **33**, 786 (1978).
- [6] R. B. Gold and J. F. Gibbons, *J. Appl. Phys.*, **51**, 1256(1980).
- [7] M. R. T. Siregar, W. Lüthy and K. Affolter, *Appl. Phys. Lett.*, **36**, 787 (1980).
- [8] H. S. Carslaw and J. C. Jaeger, *Conduction of Heat in Solid*, Chapter 1 (1959).
- [9] 邹建根、沈金萱、屈逢源, CW CO<sub>2</sub> 激光退火后离子注入硅层的性质研究 (待发表).

## A Solid-Phase Epitaxy Model for CW CO<sub>2</sub>-Laser Annealing of Ion-Implanted Silicon

Shen Jinxuan and Qu Fengyuan

(Department of Physics, Fudan University)

### Abstract

The nonlinear equation of heat conduction can be numerically solved by a partial linearization method to obtain the corresponding difference equations in implicit form, thus overcoming the difficulties in the numerical calculation conventionally used in the fields of laser annealing. The method can be used not only for Q-switched laser annealing but also in the case of CW CO<sub>2</sub> laser annealing with the irradiation duration in the order of millisecond. The temperature dependence of the thermal conductivity and the absorption coefficient is also considered in the calculations. Moreover, a quasi-static physical model in radial power dissipations through conduction is proposed. It results in a series of relationship between the annealing parameters. The relationship between the thickness of regrowth region and the laser scanning speed calculated theoretically is in good agreement with the experimental data.