

## 激光退火的机理

刘世祥 朱美芳 姚德成 石万全

(中国科学技术大学研究生院)

近几年来,半导体材料的激光退火引起人们很大兴趣,这是因为较之常规的热退火,激光退火有它独特的优点,即空间上的局域性和时间上的短暂性.离子注入后的半导体都伴有晶格损伤,使用常规的热退火来消除损伤,同时使注入杂质电激活,需要较高温度( $\sim 1000^\circ\text{C}$ )和较长时间( $\sim 30\text{ min}$ )的热处理,这就使表面层遭到沾污,基底材料由于长时间加热而电学参数变坏,而且有时并不能完全消除损伤.激光退火可以克服这些缺点,它不仅能够完全消除晶格损伤,还可获得较高的电激活率,适当选择激光的输出方式和功率可以完全消除杂质的再分布.用激光辐照表面涂有杂质源的半导体材料,能够使杂质向体内扩散而制成 p-n 结,还能使金属和半导体材料合金化而形成良好的欧姆接触.最近,受到人们重视的是在  $\text{SiO}_2$  和其他绝缘衬底上,沉积一层多晶硅薄膜,经激光辐照后,可使这层薄膜转变成单晶,这就有可能实现大规模集成电路的立体化.另外,经激光辐照后的金属表面会硬化,有的超导材料经激光辐照后可提高其超导转变温度.

自 1975 年苏联学者发表了他们关于半导体激光退火的开拓性工作以来,由于它具有重要的应用背景,引起了各国学者的重视,在短短的几年中做了大量研究工作,得到许多实验结果,并且召开了几次国际会议.但至今对激光退火的机理尚不十分清楚,且存在着不同的看法.就目前的研究结果来看,可以分为激光退火的热机理和非热机理两大类.

## 一、激光退火的热机理

P. Baeri<sup>[1]</sup> 等人认为,激光光束辐照在固体

表面上,其光能被接近表面的电子所吸收,吸收了能量的电子将多次与声子碰撞而将其能量最终转交给晶格.可以认为,吸收的光能几乎同时就地转变成热能,从而使固体表面温度升高,这些热量能够通过热传导而向体内传播.它遵守一般的热传导方程.选取不同的边界条件,求解这个热传导方程,可以得到固体中温度分布等一些重要关系式和物理量,从而解释一些实验现象.这样,激光退火就完全是一个热效应,我们称之为热机理.根据激光退火时非晶层转变成单晶层的方式不同,热机理又被分成两种类型:液相外延再生长(熔化型)和固相外延再生长(非熔化型).前者多数是在脉冲激光作用下发生的,后者是用连续激光退火.

## 1. 液相外延再生长

当使用红宝石或 Nd:YAG 等脉冲激光器对离子注入表面层进行退火,能量密度达到某个数值(称为阈值)以上时,表面薄层吸收光能后,温度很快升高而熔化,熔化前沿很快向晶体内部推进,达到一个最大的熔化深度.这一过程要在稍大于激光脉冲持续时间内完成.然后熔化前沿再反扫回来到达表面.在这个过程中,非晶层中原子重新排列再结晶成单晶<sup>[2,3]</sup>.

液相外延再生长的关键是要在激光辐照的表面产生熔化层,表面熔化的实验证据如下:

(1) P. Baeri<sup>[3]</sup> 和 J. C. Wang<sup>[4]</sup> 等许多人研究了脉冲激光退火后注入离子的再分布情况,都发现有浓度分布展宽现象.如  $\text{As}^+$ , 在注入深度与浓度的关系曲线上,浓度分布相当均匀地展宽近  $700\text{ \AA}$ . 这个展宽是在稍大于脉冲持续时间(50—200 ns)内完成的,相应的扩散系数为  $10^{-4}\text{ cm}^2/\text{s}$ ,这和液态中杂质的扩散系数

相符合，而远大于杂质在固态中的扩散系数 ( $10^{-12}$ — $10^{-14}$  cm<sup>2</sup>/s)。

(2) 实验发现，具有较小分凝系数的杂质如 Pb<sup>[5]</sup>，Te 和 Cu 优先富集在样品表面。这是由于固液界面由体内向表面推移过程中排杂而造成的。而对具有较大分凝系数的 As 就没有观察到这种表面富集现象。

(3) 固相外延的再生长速率约为  $2 \times 10^7$  Å/s，按此速率计算，在脉冲持续时间 (50—200 ns) 内，再生长厚度仅为几个埃，不能解释用能量密度为 2 J/cm<sup>2</sup> 的调 Q 脉冲激光退火会使 5000 Å 厚的非晶层转变成单晶<sup>[1]</sup>。

(4) 激光退火后样品表面形貌和不平整的皱纹都说明有熔化层产生<sup>[6]</sup>。

(5) D. H. Auston 等人做的时间分辨反射率的测量是表面熔化的重要实验证据<sup>[7]</sup>。他们使用波长 1.06 μm、脉冲持续时间 50 ns 的调 Q 钕玻璃激光器对 As<sup>+</sup> 注入硅进行退火，与此同时，用一个连续的 He-Ne 激光器以 57.5° 入射角照射到样品表面，并测量其表面反射率的变化，结果如图 1 所示。在  $t_1$  以前有较低的反

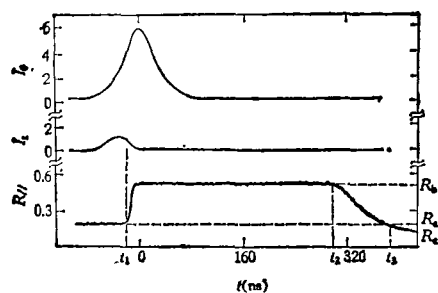


图 1 反射系数  $R_{//}$  随时间  $t$  变化曲线 ( $I_0$  为入射光强,  $I_t$  为透射光强)

射率  $R_a$ ，当到了  $t_1$  时，开始迅速升到一个稳定值  $R_b$ ，一直到  $t_2$  开始下降，到  $t_3$  后再下降到  $R_c$ 。 $R_a$ 、 $R_b$  和  $R_c$  分别与非晶硅、金属液体硅和单晶硅的反射率相符，与理论计算值相差在 10% 以内。说明样品是通过液相而再结晶成单晶的。

A. E. Bell<sup>[1]</sup> 对脉冲激光退火的热过程进行了详细的理论分析<sup>[2]</sup>，他认为使用通常的一维

物理

热传导方程来描述这种热过程是合适的。这个方程是

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{\rho C} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[ K(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right] + A(x, T) \right\},$$

其中  $\rho$ 、 $C$  和  $K(T)$  分别是材料的密度、比热和热导， $A(x, t)$  是吸收的光能密度。它的解  $T(x, t)$  描述沿  $x$  轴与时刻  $t$  的温度分布，样品表面取做零点， $x$  轴方向指向体内并垂直于表面，由于热导  $K(T)$  与温度有很强的依赖关系，这个方程是非线性的，只能对  $x$  轴上逐点求出数值解。边界条件，也就是样品前后表面的辐射和对流损失忽略不计。表面熔化和再结晶等相变过程也被考虑进去了，在计算机程序中，一旦任何点达到熔点，吸收的能量就用作熔化潜热，温度保持不变。

Bell 将上述条件下计算的结果与实验进行了比较。对于纯硅材料，波长  $\lambda = 0.69 \mu\text{m}$  的红宝石激光，脉冲持续时间  $\tau_p = 25$ — $30$  ns，不同能量密度下熔化深度的计算值和实验值列在表 1 中。从表中可以看出，计算结果与实验值符合较好。熔化深度随时间的变化表示在图 2 中。离子注入样品与纯硅材料不同之处是表面由于注入而形成一定厚度的非晶层。在不同波长和不同持续时间的激光辐照下，单晶和非晶样品阈值能量  $E^T$  的计算结果列于表 2 中。实验数据为： $\lambda = 0.69 \mu\text{m}$ ， $\tau_p = 50$  ns， $E^T$  为 1 J/cm<sup>2</sup>， $\lambda = 1.06 \mu\text{m}$ ， $\tau_p = 110$  ns， $E^T \sim 6$  J/cm<sup>2</sup>，这刚好位于单晶和非晶的计算值之间。阈值能量是和晶层厚度有关的。Bell 计算并画出了阈值能量和非晶层厚度的关系图。据此可以得出，如果典型的注入非晶层厚度为 0.5 μm，那么对于  $\lambda = 0.69 \mu\text{m}$ ， $\tau_p = 50$  ns，其阈值能

表 1

能量密度 (J/cm <sup>2</sup> )	实验深度 (μm)	计算深度 (μm)
1.0	0	0.00
1.2	0.1—0.2	0.11
1.4	0.25—0.3	0.22
1.6	0.4—0.5	0.34
1.8	0.7	0.46

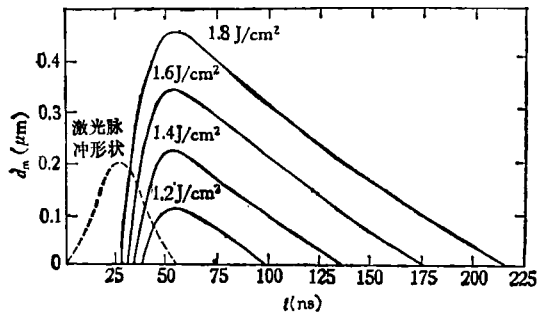


图2 熔化深度 ( $d_m$ ) 与时间 ( $t$ ) 的关系曲线  
(高斯脉冲  $\tau_p = 27.5 \times 10^{-9} s$ ,  
纯硅吸收系数  $7 \times 10^3 cm^{-1}$ )

表2 计算阈值能量密度

$\tau_p$ (ns)	$\lambda = 0.69 \mu m$		$\lambda = 1.06 \mu m$	
	单晶 ( $J/cm^2$ )	非晶 ( $J/cm^2$ )	单晶 ( $J/cm^2$ )	非晶 ( $J/cm^2$ )
24	1.4	0.42	50	1.8
50	1.5	0.53	50	2.0
110	1.8	0.7	50	2.1

量为  $1 J/cm^2$ ; 而当  $\lambda = 1.06 \mu m$ ,  $\tau_p = 110 ns$  时,  $E^T \sim 6 J/cm^2$ .

热熔化模型的理论计算和实验的符合以及表面出现熔化层的证据, 使热熔化模型得到很多人的承认. 大量实验和计算得到了一些关于液相外延再生长很有用的物理量: 液体冷却速度  $\sim 10^9 K/s$ , 温度梯度  $\sim 10^6 K/cm$ , 再生长速率  $\sim 2 m/s$ .

## 2. 固相外延再生长

固相外延再生长不同于液相外延的主要特点是: (1) 退火是在低于熔点情况下进行的, 即表面没有熔化层产生. (2) 注入杂质离子完全进入晶格位置而没有使杂质再分布. (3) 所使用的激光器是连续激光器. 其有关的理论计算和实验如下.

(i) M. Lax<sup>[8]</sup> 求解了使用连续扫描激光情况下稳态线性热传导方程, 计算出由于激光辐照引起的表面温度的升高. 对于入射光强为高斯分布的情况, 样品表面中心最大的温升为

$$T_{max} = \frac{P}{2\pi^{1/2} K w}$$

该式表明, 最大温升  $T_{max}$  与入射光功率  $P$  成正

比而与热导  $K$  和束斑直径  $w$  成反比.

利用 Lax 的计算结果, A. Gat<sup>[9]</sup> 等人用激光打点的方法研究了  $As^+$  注入硅片的连续激光退火的机理. 他们使用不同功率相同辐照时间以及相同功率不同辐照时间的实验结果, 进行了计算, 求出了样品表面温度的分布. 对于连续输出  $7W$ , 束斑直径为  $37.3 \mu m$  的氩离子激光器来说, 样品中心最高温度是  $1080^\circ C$ , 低于硅的熔点  $1412^\circ C$ , 在这个温度下完成了激光退火. 透射电子显微镜和电子衍射实验证明, 注入层被激光辐照的区域已变成了单晶.

(ii) D. H. Auston<sup>[10]</sup> 等人用连续输出的氩离子激光器对  $As^+$  注入硅片进行退火, 同时用一个 He-Ne 激光照射在样品的中心区域测量其反射率, 反射率随激光功率的变化如图 3 所示.  $6W$  以下为非晶的反射率, 当功率增加时, 非晶层逐渐变薄, 到  $6.5W$  时, 反射率在  $a$  点出现峰值, 这可能是由于样品表面的与再生长界面的反射光干涉的结果. 再加大功率, 反射率下降到  $b$ , 由  $b$  到  $c$  的反射率相应于单晶的反射率. 下面的虚线是经过热退火后的样品并已证明变成单晶的反射率.  $c$  点开始反射率很快增加到  $d$ ,  $d$  点相应于液体硅的反射率. 此实验结果表明, 使用  $b$  到  $c$  点之间的功率, 可以达到有效退火的目的, 而样品表面没有熔化.

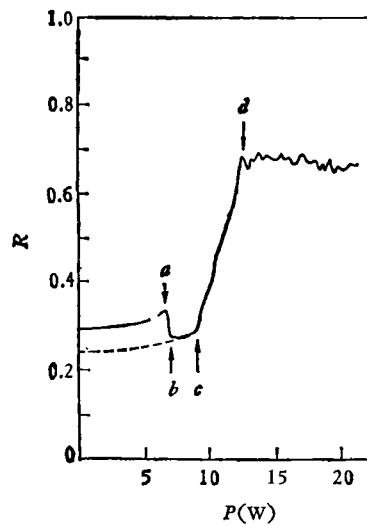


图3 反射率  $R$  随激光功率  $P$  变化曲线

(iii) J. S. Williams<sup>[11]</sup> 等人用连续氩离子激光辐照 As<sup>+</sup> 和 Sb<sup>+</sup> 注入的硅片, 背散射和沟道测量表明,  $3 \times 10^{15}/\text{cm}^2$  剂量的 As<sup>+</sup> 几乎 100% 替位, 用分辨率为 40 Å 的背散射测量, 未发现注入离子的再分布, 这同样说明样品没有熔化。

以上的计算和实验表明, 当使用连续激光器退火时是固相外延再生长。再生长是在较高但低于熔点的温度下进行的, 激光辐照的主要作用是提供样品温度升高的能量, 这样它也完全是一种热效应, 类似于常规热退火, 再生长速度  $\nu$  可用热退火的表示式:  $\nu = \nu_0 e^{-E_a/kT}$ 。其中  $E_a$  是联系这个再生长过程的激活能, 对于重掺杂样品 (As 的剂量为  $10^{16}/\text{cm}^2$ ),  $E_a = 2.7 \text{ eV}$ ,  $\nu_0 = 2.9 \times 10^9 \text{ cm/s}$ 。当  $T \sim 1200\text{K}$  时,  $\nu \sim 10^{-2} \text{ cm/s}$ 。

## 二、脉冲激光退火的非热机理

Baeri, Wang 和 Bell 等人用单纯的热模型计算了在脉冲激光辐照下的退火效应, 在不少方面取得了理论与实验一致的结果。但随着对激光退火的深入研究及新的实验现象的出现, 对热熔化模型又提出了异议。1978 年<sup>[12,13]</sup>以来, 提出了一些非热模型来解释新的实验现象, 探讨激光退火的微观过程。

### 1. 重要的实验现象

(1) Raman 散射测量晶格温度: H. W. Lo 和 A. Compaan<sup>[14]</sup> 用  $\lambda = 485 \text{ nm}$  和  $\tau_p = 50 \text{ ns}$  的染料激光器作为加热脉冲, 同时也作为 Raman 散射的人射激光, 在硅单晶表面上测量了不同入射激光功率密度下单声子斯托克斯和反斯托克斯散射强度, 由此计算出相应的晶格温度, 如图 4 所示。在通常退火阈值能量  $1 \text{ J/cm}^2$  条件下, 图中表示的晶格温度为  $300^\circ\text{C}$ 。同时他们也测量了退火过程中表面反射率随时间的变化, 其结果画在图 4 中左上角, 观察到了类似图 1 中反射率的突变。

按照热模型, 在阈值能量条件下, 表面温度可达  $1412^\circ\text{C}$ , 而 Lo 等人的结果表明表面温度

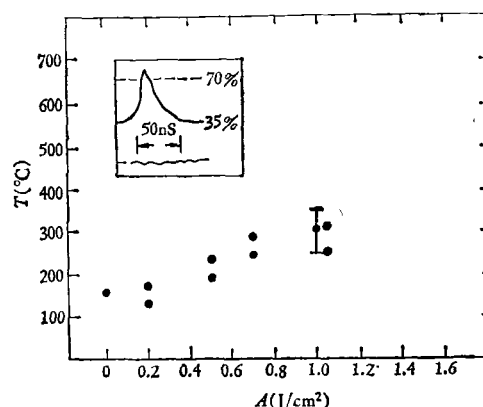


图 4 晶格温度  $T$  和加热脉冲功率密度  $A$  的关系

仅为  $300^\circ\text{C}$ , 相差  $1000^\circ\text{C}$  之多, 这就使人怀疑该实验是否可靠。Lo 等人继续测量了氩离子连续激光辐照表面的晶格温度, Raman 散射结果表明, 在激光束中心点温度为  $1500\text{K}$ , 它与 Lax 采用的非线性热扩散方程的解相吻合。Lo 等人认为, Raman 散射测量的结果是可靠的。为什么晶格温度仅  $300^\circ\text{C}$ ? 为什么在该温度下也能观察到表面反射率的突变? 热熔化模型是难以解释这个问题的。

(2) 脉冲激光退火后表面杂质分凝: 前面介绍了具有较小分凝系数的杂质在脉冲激光退火后有表面富集现象, 这被看作是表面熔化的证据。Hoonhout<sup>[15]</sup> 将 Ga, As, Se, Ge, Sb, Fe, Sn 和 Bi 等多种元素以同一剂量注入硅中, 以同样能量密度的脉冲激光退火, 杂质在表面富集的情况列于表 3 中。结果表明, 材料的分凝系数与退火后杂质再分布之间, 不存在由液相外延过程中所确定的关系。

表 3 杂质元素在表面的富集

元 素	平衡分凝系数	表面百分比(%)
Ge	0.33	11
As	0.3	14
Sb	$2.1 \times 10^{-2}$	10
Sn	$1.6 \times 10^{-2}$	28
Ga	$8 \times 10^{-3}$	15
Bi	$7 \times 10^{-4}$	11
Te	$10^{-6}$	11
Se	$< 10^{-8}$	8

(3) 关于反射率测量: 反射率测量是证明

脉冲激光退火表面熔化的重要实验。深入的分析与分析也提出了一些问题。如反射率数值, Auston 的结果  $R_{\parallel} = 57\%$ , 与在真正熔化硅上测出  $R_{\parallel} = 47\%$  有较大的差别。又如按热模型给出的再生长速度是  $\sim 2\text{m/s}$ , 按此计算, 反射率下降时间仅需  $5\text{ns}$ , 而图 1 中的实验结果是下降时间约  $100\text{ns}$ , 理论与实验之间有较大差距。

热熔化模型除了不能解释上述实验现象外, 在计算中也有一些不足之处。因此, 现在人们一方面还在进一步发展和完善热模型, 另一方面也试图建立新的模型来进一步探讨激光退火的机理。

## 2. 脉冲激光退火的非热机理

(1) 冲击波模型: Khaiballin<sup>[32]</sup> 等人提出在  $10^7\text{W/cm}^2$  高强度的脉冲激光辐照下, 可产生一个强的光压, 它可以激励晶格, 促使它们重新排列而成为单晶。

(2) 离化增强效应: 在脉冲激光退火过程中, 能量大于禁带宽度的光子被晶体吸收, 产生大量电子空穴对, 即相邻硅原子之间的键合被打开, 大量硅原子离化, 硅中载流子浓度可达  $10^{20}\text{--}10^{21}/\text{cm}^3$ 。Bourgoin<sup>[16]</sup> 等人认为, 这样的离化作用改变了原子间相应的势能, 引起所谓离化增强扩散。激活能降低, 大大增强了缺陷的扩散或迁移率, 有利于材料的退火。

(3) Wautelet<sup>[37]</sup> 等人提出, 在强激光辐照下, 电子从价带激发到导带, 原子间键合发生了变化。根据单束束缚电荷模型, 原子间束缚电荷的变化会引起横声学声子色散关系的软化。在此基础上做适当近似可估算出晶格振动能会由于色散关系的软化而增加, 这相应于晶格熔点的降低。此外, 在强激光辐照下产生大量热电子使电子系统能量大大增加, 这就增加了系统的总能量, 这也意味着熔点的降低。Wautelet 粗略估计由于上述因素将使熔点降低  $750\text{K}$ 。

(4) 等离子体退火机理: 上述机理的讨论只是模型的设想。1979 年 Van<sup>[43]</sup> 和 Yoffa<sup>[18]</sup> 提出了硅的脉冲激光等离子体退火模型, 初步提出了硅材料激光退火的相变机理。

(i) 脉冲激光与硅相互作用的微观过程: (a) 吸收过程。入射激光引起硅本征吸收和自由载流子吸收, 在只有较少数目自由载流子时, 则本征吸收过程是主要的, 产生率  $g = 10^{21}/\text{cm}^2 \cdot \text{s}$ 。随着自由载流子数目的上升, 载流子的吸收也将增加, 当载流子浓度  $N_c$  达到  $10^{19}/\text{cm}^3$  时, 则必须进一步考虑能量的弛豫过程。(b) 能量弛豫过程。在波长为  $0.53\ \mu\text{m}$  的激光辐照下, 大量电子处于“热”状态, 它们将通过各种方式把自己的能量交出去。可能的过程有: (I) 电子与电子碰撞。(II) 等离激元 (plasmon) 的产生。当热电子能量  $E > \hbar\omega_p$  ( $\omega_p$  为等离子体振荡频率), 电子能量的弛豫可通过发射等离激元来进行。当然, 这是个动态过程, 同时也伴随着它的衰减过程。(III) 发射声子过程。通过计算, 比较上述过程发现, 当载流子浓度达某个临界值  $N_c \geq 10^{18}/\text{cm}^3$  时, 热载流子系统通过 (I) (II) 两个弛豫过程是主要的, 因此在所讨论的系统中, 可认为能量基本上贮存在载流子系统内。(c) 复合与扩散过程。根据载流子复合机理, 当载流子浓度  $N_c > 10^{18}/\text{cm}^3$  时, Auger 复合将是主要的。这个过程只改变载流子能量分布, 不改变载流子系统的总能量。

(ii) 等离子体相变过程: Yoffa 认为, 在强激光辐照下 (指退火能量范围), 可以产生高达  $10^{21}/\text{cm}^3$  以上的电子空穴对, 形成稠密的等离子体。在  $N_c > 10^{19}/\text{cm}^3$  时, 载流子的 Auger 复合过程由于库仑作用而受到抑制, 载流子浓度将继续增加, 当  $N_c$  达到  $8 \times 10^{21}/\text{cm}^3$  的临界值时, 由于束缚电荷的耗尽, 晶体声学模式不再稳定, 晶体之间的切应力将消失而成为“液体”, 发生二级相变。这个“液体”与常规的熔化相是不同的, 前者经历的是二级相变, 相变过程中能量主要保持在电子系统里, 只有很少能量交给晶格。而后者是严格的一级相变过程, 它只包括单纯的热过程。

随着等离子体空间的扩展以及能量部分地交给晶格, 等离子体密度将随之下降。当载流子浓度  $N_c \leq 8 \times 10^{21}/\text{cm}^3$  时, 就会发生二级相变的逆过程。只要等离子体密度下降不是太

快(约  $10^{-7}$  s), 原子间的共价键将逐渐恢复(过程太快将形成非晶态), 材料将象外延单晶那样结晶再生长。他们还认为, 即使未达到发生二级相变的临界值, 原子也可由于单晶衬底或任何其他因素所施加的切应力而使其重新排列, 使晶体逐渐恢复有序。

(iii) 等离子体模型对两个实验现象的解释: (a) 退火时的晶格温度。等离子体退火模型认为, 从激光中吸收的能量在相当一段时间内保持在载流子系统中, 因此相变过程中的晶格温度是低的。他们还认为, 在载流子把能量交给晶格以前已扩散相当一段距离。它们将带走能量并减少表面载流子浓度, 从而减少在表面区内向晶格交能量的速率, 相反却增加了发生能量转换区的体积。这种载流子的扩散效应也将减少晶格温度的上升, 所以测出了低的晶格温度。(b) 表面反射率实验。在等离子体中, 只要入射光频率  $\omega_\lambda$  等于或小于等离子体振荡频率  $\omega_p$ , 入射光就有可能在表面发生反射。在脉冲激光退火过程中,  $\omega_p$  是随  $N_e$  的增加而增加的, 当  $N_e$  增加到使  $\omega_p = \omega_\lambda$  时, 就会引起表面反射率的突然增加, 它不依赖于晶格温度, 这就解释了为什么在  $300^\circ\text{C}$  可以观察到反射率的突变, 为什么  $R_{\parallel}$  有差别等现象。

需要说明的是, 等离子体模型理论是很初步的, 对实验现象的解释也仅是定性的, 尚有许多问题需要研究。

以上介绍了激光退火的两种机理。激光退火实质上是激光与物质相互作用的复杂物理过程, 深入了解激光退火的机理, 在理论上和应用上都具有重要意义。

### 参 考 文 献

- [1] P. Baeri et al., *J. Appl. Phys.*, **50**(1979), 788.
- [2] A. E. Bell, *RCA Review*, **40**(1979), 295.
- [3] P. Baeri et al., *Appl. Phys. Lett.*, **33**(1978), 137.
- [4] J. C. Wang et al., *Appl. Phys. Lett.*, **33**(1978), 455.
- [5] G. Foti et al., *Phys. Status Solidi A*, **47**(1978), 412.
- [6] M. Von Allmen et al., *Appl. Phys. Lett.*, **33**(1978), 825.
- [7] D. H. Auston et al., *Appl. Phys. Lett.*, **33**(1978), 437.
- [8] M. Lax, *J. Appl. Phys.*, **48**(1977), 3919.
- [9] A. Gat et al., *J. Appl. Phys.*, **50**(1979), 2926.
- [10] D. H. Auston et al., *Appl. Phys. Lett.*, **33**(1978), 539.
- [11] J. S. Williams et al., *Appl. Phys. Lett.*, **33**(1978), 542.
- [12] I. B. Khaiballin et al., *Radiat. Eff.* **36**(1978), 225.
- [13] J. A. Van Vechten et al., *Phys. Lett.*, **74A**(1979), 417.
- [14] H. W. Lo, A. Compaan, *Phys. Rev. Lett.* **44**(1980), 1604.
- [15] D. Hoonhout, F. W. Saris, *Phys. Lett.*, **74**(1979), 253.
- [16] J. C. Bourgoin et al., *Phys.*, **59**(1973), 4042.
- [17] M. Wautelet, L. D. Laucle, *Appl. Phys. Lett.* **36**(1980), 197.
- [18] Ellen J. Yoffa, *Phys. Rev. B*, **21**(1980), 2415.