

УДК 535:537:539:546

ДОСЛІДЖЕННЯ ТЕПЛОФІЗИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ КРИСТАЛІЧНОГО КРЕМНІЮ

О.О. Гаврилюк*, О.Ю. Семчук

*Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка Національної академії наук України
вул. Генерала Наумова, 17, Київ, 03164, Україна*

Теоретично досліджені теплофізичні властивості Si (с). За допомогою програмного пакету Comsol Multiphysics промодельовано розподіл температури у пластинці Si (с). Показано, що фемтосекундними лазерними імпульсами можна ефективно прогрівати зразки кристалічного кремнію; найбільш ефективно прогривається приповерхнева область товщиною до 5 мкм.

ВСТУП

Лазерна обробка матеріалів останнім часом набула широкого застосування в промисловості, особливо в мікроелектроніці [1–4]. Відомі лазерні методи очищення поверхні та створення мікронних, субмікронних та наноструктурованих періодичних структур на поверхні напівпровідників, полімерів, металів тощо [3, 4]. Зокрема, для відновлення структури тонких напівпровідникових шарів, домішкового легування, обробки тонкоплівкових матеріалів застосовується лазерний відпал. Вплив лазерного випромінювання на напівпровідники може приводити до зміни їх кристалічної структури, електрофізичних та оптичних властивостей [5]. При опроміненні поверхні монокристалічного кремнію фемтосекундними лазерними імпульсами на ній формуються нанорозмірні кластери висотою від 2 до 30 нм і поперечним розміром від 70 до 200 нм [6]. Одноразове опромінення поверхні кристалів р-CdTe імпульсом рубінового лазера також спричиняє утворення нанорозмірних поверхневих структур з періодом 10^5 нм та з лінійними розмірами (19–20) нм і середньою висотою (3.4–9.38) нм [7]. В ніобаті літію під впливом лазерного випромінювання виникають самоподібні нанодоменні структури [8]. Особливий інтерес викликає можливість змінювати властивості багатошарових систем за допомогою лазерної обробки, а саме через селективний відпал окремих шарів багатошарової композиції підбором відповідної довжини хвилі та потужності випромінювання, чого не можна досягти при традиційній термообробці [9].

Розробка технології відтворюваного отримання кремнієвих нанокристалів і нанокомпозитних плівок, що містять нанокристали кремнію в діелектричній матриці, є важливим і актуальним завданням сучасної нанотехнології. Кристалічний кремній Si (с) є основним матеріалом сучасної напівпровідникової мікроелектроніки і залишатиметься таким ще протягом наступних десятиліть. Проте мініатюризація компонентів сучасних інтегральних схем і оптичних систем вимагає знаходження нових шляхів наноструктурування цього матеріалу. Окрім традиційно використовуваних літографічних технологій існують і інші шляхи високоточної обробки Si (с). Одним з них методів є обробка поверхні потужними надкороткими лазерними імпульсами тривалістю менше 100 фс [2].

РОЗРАХУНКОВІ МЕТОДИ

При описанні процесу лазерного нагріву речовини, суттєвими є дві обставини. По-перше, внаслідок проникнення світла в глибину середовища оптичні теплові джерела є, як правило, об'ємними, а не локалізованими, наприклад, на його межах, як це буває в задачах про звичайний температурний нагрів. По-друге, виділення оптичної енергії відбувається неоднорідно по об'єму взаємодії через зменшення інтенсивності світла при його проникненні в глибину середовища. Остання обставина призводить до просторово-неоднорідного нагріву речовини та викликає процеси тепло- та масопереносу між різними ділянками середовища. Енергія лазерного випромінювання, що поглинається поверхнею, перетворюється в енергію

* контактний автор sashatigerunik@rambler.ru

хаотичного руху атомів та молекул. Достатньо помітне підвищення температури при поглинанні потужного лазерного випромінювання викликає фазові переходи – а інколи й цілі каскади фазових перетворень, таких як іонізація газу або його випаровування з поверхні, розбризкування, а після закінчення дії лазерного імпульсу затвердіння та ін. [2].

В даній роботі було проведено теоретичне дослідження теплофізичних властивостей Si (с), кремнієвої пластини p -типу з орієнтацією поверхні (100). Лазерне випромінювання мало такі характеристики: $\lambda = 1064$ нм, тривалість імпульсу 100 фс, час між імпульсам 10 фс, інтенсивність 0.2 Дж/см². Розповсюдження температурного поля по поверхні Si (с) при його нагріванні лазерним випромінюванням описується диференціальним рівнянням параболічного типу (рівнянням Фур'є) [10]:

$$\rho c_p \frac{\partial T(\vec{r}, t)}{\partial t} - \nabla[\kappa(T)\nabla T(\vec{r}, t)] = \alpha I_0(\vec{r})(1 - R) \exp(-\alpha z), \quad (2)$$

де I_0 – інтенсивність одиничного лазерного імпульсу, $\kappa(T)$ – коефіцієнт теплопровідності, R – відбиваюча властивість поверхні Si (с),

$$I_0(\vec{r}) = \frac{2I_0 \left\{ \cos \left[\left(\frac{4\pi x}{\lambda} \right) \sin \left(\frac{\theta_0}{2} \right) \right] + 1 \right\}}{2\pi\sigma \exp \left\{ -\left(t - \tau_p \right)^2 / 2\sigma^2 \right\}}, \quad \sigma = \frac{\tau_p}{2\sqrt{2 \ln 2}},$$

t_p – період повторення імпульсу, τ_p – тривалість лазерного імпульсу.

Отже, рівняння (2) описує часову еволюцію температури поверхні напівпровідника при дії імпульсу лазерного випромінювання (інтерференційної картини). Лазерне випромінювання поглинається в приповерхневому шарі. Енергія лазерного пучка перетворюється в тепло за рахунок теплопровідності з поверхні в об'єм. Ми вважали, що коефіцієнти поглинання та відбивання світла поверхнею напівпровідника є константами, тобто не залежать від температури.

РЕЗУЛЬТАТИ ТА ОБГОВОРЕННЯ

Математичне моделювання проводилось за допомогою програмного пакету Comsol Multiphysics. Результати розрахунків наведено на рисунках 1–3. За допомогою пакета COMSOL Multiphysics можна моделювати практично всі фізичні процеси, які описуються диференціаль-

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \chi \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{\rho c_p} \left(\frac{\partial Q}{\partial t} \right)_{\text{зовн}}, \quad (1)$$

де $\chi = \kappa/\rho c_p$ – температуропровідність, T – температура зразка, $\rho(T)$ – густина, $c_p(T)$ – теплоємність при постійному тиску,

$\left(\frac{\partial Q}{\partial t} \right)_{\text{зовн}} = \alpha J(\vec{r}, t)$ – об'ємне джерело

теплоти, $J(\vec{r}, t)$ – розподіл інтенсивності лазерного випромінювання в середовищі, α – коефіцієнт поглинання лазерного випромінювання поверхнею середовища.

Розповсюдження температурного поля по поверхні твердого тіла (напівпровідника Si (с)) при нагріванні його двома лазерними пучками, що сходяться під кутом θ та створюють на його поверхні інтерференційну картину, описується рівнянням (1), яке для задачі, що розглядається в цій роботі, може бути переписане наступним чином:

ними рівняннями в частинних похідних (ДРЧП). Задачі розв'язуються методом кінцевих елементів. Програма містить бібліотеку ДРЧП і різні засоби для моделювання та симуляції.

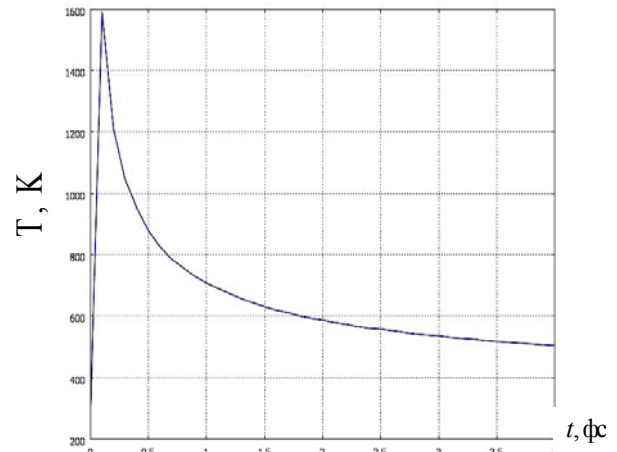


Рис. 1. Залежність зміни поверхневої температури з часом

З рис. 1 видно, що за час дії лазерного імпульсу (100 фс) протягом 25 нс на поверхні зразка створюється температура 1590 К. За 1 нс температура релаксує до свого попереднього значення (300 К). При цьому відбувається

прогрівання об'єму зразка. З рис. 2 випливає, що за час дії лазерного імпульсу найбільш ефективно прогривається приповерхнева область товщиною до $5 \cdot 10^3$ нм, а зразок прогривається на глибину до $2 \cdot 10^4$ нм. На рис. 3 представлено чисельне моделювання зміни температури зразка на різних глибинах (шарах) з часом – як і слід було очікувати, з віддаленням від поверхні за рахунок зменшення інтенсивності лазерного пучка (інтерференційної картини) температура в шарах падає. Разом з тим, розподіл температури по координатах зберігає свій вигляд (подібність).

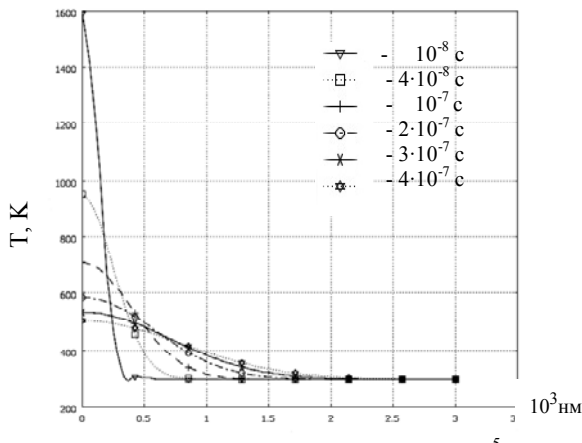


Рис. 2. Зміна температури зразка в залежності від відстані від поверхні у різні проміжки часу

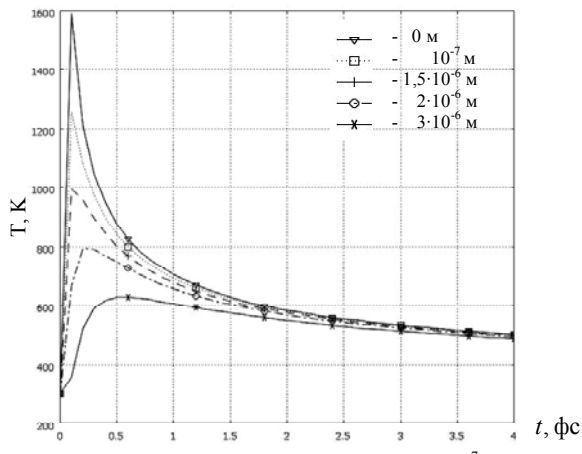


Рис. 3. Зміна температури зразка з часом в шарах на різних глибинах зразка

Отже, фемтосекундними лазерними імпульсами можна ефективно прогривати зразки кристалічного кремнію товщиною до $2 \cdot 10^4$ нм. При цьому найбільш ефективно прогривається приповерхнева область товщиною до $5 \cdot 10^3$ нм. Властивості лазер-індукованих періодичних поверхневих структур з кроком $(5-10) \cdot 10^3$ нм, що при цьому можуть виникати, залежать, в першу

чергу, від довжини хвилі лазерного випромінювання та абляційних характеристик напівпровідника. Таким чином, фемтосекундне лазерне випромінювання може бути ефективним методом мікро-нано-структурування та відпалу напівпровідникових матеріалів, що використовуються в мікроелектроніці.

ЛІТЕРАТУРА

1. Semchuk O.Yu., Semioshko V.N., Grechko L.G. et al. Laser ablation lithography on thermoelectric semiconductor // Applied Surface Science. – 2006. – V.252. – P. 4759–4762.
2. Ахманов С.А., Емельянов В.И., Коротеев Н.И. и др. Воздействие мощного лазерного излучения на поверхность полупроводников и металлов: нелинейно-оптические эффекты и нелинейно-оптическая диагностика // Успехи физ. наук. – 1985. – Т. 147, № 4. – С. 675–745.
3. Schaaf P. Laser Nitriding of Metals // Prog. Mater. Sci. – 2002. – V. 47, N 1. – P. 1–161.
4. Pereira A., Cross A., Delaporte P. et al. Surface nanostructuring of metals by laser irradiation: effects of pulse duration, wavelength and gas atmosphere // Appl. Phys. A. – 2004. – V. 79. – P. 1433–1437.
5. Лисовченко В.Н., Конакова З.В., Коноплев Б.Г. и др. Уменьшение поглощения в структурах кварц/Si, кварц/SiO₂ и SiC/Si/SiO₂ под влиянием лазерной обработки // Физика и техника полупроводников. – 2010. – Т. 44, № 3. – С. 326–329.
6. Заботнов С.Е., Ежок А.А., Головань Л.А. и др. Формирование наночастиц на поверхности кремния под действием фемтосекундных лазерных импульсов // Физика и техника полупроводников. – 2007. – Т. 41, № 8. – С. 1017–1020.
7. Байдуллаева А., Власенко А.И., Кузан Л.Ф. и др. Образование наноразмерных структур на поверхности кристаллов р-CdTe при однократном воздействии импульсного излучения рубинового лазера // Физика и техника полупроводников. – 2005. – Т. 39, № 9. – С. 1064–1067.
8. Шур В.Я., Кузнецов Д.К., Лобов А.И. и др. Поверхностные самоподобные монодоменные структуры, индуцированные лазерным излучением в ниобате лития // Физика и техника полупроводников. – 2008. – Т. 50, № 4. – С. 689–695.

9. Жигалина О.М., Хмеленин Д.Н., Воротилов К.А. и др. Электронная микроскопия структуры композиций пленок титаната бария–стронция на подложках Pt-Ti-SiO₂-Si после лазерного отжига // Физика и техника полупроводников. – 2009. – Т. 51, № 7. – С. 1398–1399.
10. Лыков А.В. Теория теплопроводности. – Москва: Высшая школа, 1967. – 600 с.

Надійшла 25.06.2012, прийнята 04.07.2012

Исследование теплофизических свойств кристаллического кремния

А.А. Гаврилюк, А.Ю. Семчук

*Институт химии поверхности им. А.А. Чуйко Национальной академии наук Украины
ул. Генерала Наумова, 17, Киев, 03164, Украина, sashatigerunik@rambler.ru*

Теоретически исследованы теплофизические свойства Si (с). С помощью программного пакета Comsol Multiphysics промоделировано распределение температуры в пластинке Si (с). Показано, что фемтосекундными лазерными импульсами можно эффективно прогреть образцы кристаллического кремния; наиболее эффективно прогревается приповерхностная область толщиной до 5 мкм.

Study on of thermophysical properties of crystalline silicon

O.O. Gavrilyuk, O.Yu. Semchuk

*Chuiiko Institute of Surface Chemistry of National Academy of Sciences of Ukraine
17 General Naumov Str., Kyiv, 03164, Ukraine, sashatigerunik@rambler.ru*

The thermophysical properties of Si (c) have been studied theoretically. Using the Comsol Multiphysics software package, mathematical modeling of temperature distribution in the Si (c) plate is carried out. It has been shown that femtosecond laser pulses can efficiently warm samples of crystalline silicon. The near-surface region with thickness of 5 microns is heated most efficiently.