

# Моделирование нагрева и фотовозбуждения монокристаллического кремния наносекундными лазерными импульсами на длине волны 1.06 мкм при облучении в многоимпульсном режиме

Д.С.Поляков, Е.Б.Яковлев

*Проведено теоретическое исследование процессов нагрева и фотовозбуждения монокристаллического кремния наносекундным лазерным излучением на длине волны 1.06 мкм. Предложенная физико-математическая модель нагрева учитывает сложную нелинейную динамику коэффициента межзонного поглощения кремния и вклад радиального теплоотвода в процесс остывания кремния между импульсами при многоимпульсном воздействии, что позволяет удовлетворительно согласовывать пороги плавления кремния для различных длительностей импульса из наносекундного диапазона с экспериментальными данными (как при одноимпульсном, так и при многоимпульсном воздействии). Установлено, что при воздействии наносекундных импульсов с длиной волны 1.06 мкм важную роль в процессах фотовозбуждения и нагрева может играть динамический эффект Бурштейна–Мосса. Показано, что при характерных для лазерной многоимпульсной микрообработки кремния режимах (диаметр лазерного пятна меньше 100 мкм, частота следования импульсов около 100 кГц) нельзя пренебрегать радиальным теплоотводом при анализе процессов накопления тепла.*

**Ключевые слова:** наносекундные лазерные импульсы, монокристаллический кремний, многоимпульсный режим, динамический эффект Бурштейна–Мосса.

## 1. Введение

Воздействие наносекундных лазерных импульсов на монокристаллический кремний и структуры на его основе может быть использовано для получения различного рода поверхностных микрорельефов [1, 2], для отжига ионно-имплантированных слоев [3, 4], получения кремниевых наночастиц [5] и т. д. При этом, как правило, используются лазеры видимого и УФ диапазонов длин волн. Длина волны 1.06 мкм является не столь популярной из-за низкого начального коэффициента поглощения, который составляет всего  $10\text{--}30\text{ см}^{-1}$  [6]. Однако из-за ряда нелинейных эффектов в процессе воздействия коэффициент поглощения может увеличиваться на несколько порядков, что все же делает возможной обработку монокристаллического кремния наносекундными импульсами на длине волны 1.06 мкм. Тем не менее исследования, проводимые в этой спектральной области, до недавнего времени носили в основном фундаментальный, а не прикладной характер (см., напр., [7–9]). Появление и широкое внедрение волоконных иттербиевых лазеров, обладающих несомненными технологическими преимуществами (такими как высокие производительность и КПД, большой ресурс работы, надежность и пр.) ставит вопрос о целесообразности их использования для обработки монокристаллического кремния и структур на его основе. Так, например, в работах [10, 11] продемонстрирована их большая эффективность (в сочетании с довольно высо-

ким качеством обработки) при выполнении простых технологических операций формирования отверстий и скрайбирования. Волоконный лазер также может быть успешно применен для формирования рельефа, обладающего антиотражающим эффектом [12], и для генерации наночастиц кремния [13]. Ряд интересных результатов, связанных с формированием микрорельефа и структурными изменениями на границе раздела кремний/диоксид кремния, получен в работах [14, 15] при исследовании воздействия излучения волоконного иттербиевого лазера на структуру кремний–окисел, широко применяющуюся в микроэлектронике. В работе [16] при сходных условиях облучения продемонстрирована возможность управляемого изменения характеристик элементов кремниевых интегральных микросхем.

Практический интерес к проблеме воздействия наносекундных импульсов на длину волны излучения 1.06 мкм на кремний способствует развитию физико-математических моделей, инициированных лазерным воздействием процессов, в первую очередь оптических (поглощение излучения) и теплофизических. Здесь, по нашему мнению, можно выделить два специфических аспекта воздействия, в недостаточной степени освещенных в научной литературе.

Первый аспект связан со сравнительно сложной динамикой коэффициента поглощения кремния  $\alpha$  при воздействии излучения на длине волны 1.06 мкм. Малое начальное значение  $\alpha$  связано с тем, что длина волны 1.06 мкм лежит на краю области собственного поглощения кремния. С одной стороны, при достаточно интенсивном лазерном воздействии увеличение  $\alpha$  обусловлено нагревом решетки, что приводит к уменьшению ширины запрещенной зоны и, соответственно, к вовлечению большего числа уровней в межзонные переходы, а также к увеличению вероятности непрямых оптических переходов из-за роста концентрации фононов. Помимо этого увеличение концентрации фотовозбужденных носителей приводит к уве-

Д.С.Поляков, Е.Б.Яковлев. Санкт-Петербургский национальный университет информационных технологий, механики и оптики, Россия, 197101 С.-Петербург, Кронверкский просп., 49; e-mail: polyakovdmity1988@gmail.com

Поступила в редакцию 13 сентября 2017 г., после доработки – 29 декабря 2017 г.

личению коэффициента внутризонного поглощения. С другой стороны, при таком воздействии протекают процессы, способствующие снижению значения коэффициента межзонного поглощения и препятствующие нарастанию концентрации электрон-дырочной плазмы. Дело в том, что сильное фотовозбуждение кремния будет приводить к заполнению носителями состояний вблизи экстремумов зон, что при незначительном превышении энергии кванта ширины запрещенной зоны (даже с учетом ее температурного сужения) может вызывать заметное снижение вероятности межзонных переходов и уменьшение коэффициента межзонного поглощения. Описанное явление называется динамическим эффектом Бурштейна–Мосса (ДЭБМ) и обычно игнорируется при построении моделей наносекундных воздействий на монокристаллический кремний при длине волны излучения 1.06 мкм (см., напр., [17–23]). Стоит обратить внимание на то, что важная роль этого эффекта отмечалась еще в ранней работе [24] для случая миллисекундных воздействий (см. также [25]). Была даже продемонстрирована возможность использования пластины монокристаллического кремния в качестве насыщающегося поглотителя в неодимовых лазерах [25]. При наносекундных воздействиях концентрации фотовозбужденных носителей намного больше, чем при миллисекундных, поэтому логично ожидать, что ДЭБМ может оказывать влияние на процессы нагрева и фотовозбуждения кремния и в этом случае. Однако такого рода оценки отсутствуют.

Второй аспект связан с особенностями многоимпульсного воздействия. Волоконные лазеры работают на высоких частотах следования импульсов (десятки-сотни килогерц), при которых важными становятся эффекты накопления тепла. Существующие модели многоимпульсного воздействия для указанного диапазона частот имеют ряд недостатков. Так, например, модель из работы [19] является одномерной, хотя очевидно, что для многоимпульсного воздействия существенным может быть радиальный теплоотвод. В более поздней модели [20] радиальный теплоотвод учитывается, однако в ней не исследован многоимпульсный режим. К тому же в обеих моделях [19, 20] полностью игнорируется динамика электронной подсистемы полупроводника. В работе [14] анализируется задача с трехмерным теплоотводом, однако не учитывается сложная динамика коэффициента межзонного поглощения, используется явно завышенное значение сечения поглощения на свободных носителях и игнорируется нелинейность теплофизических свойств кремния.

Таким образом, целью настоящей работы является анализ многоимпульсного нагрева монокристаллического кремния наносекундными импульсами на длине волны излучения 1.06 мкм при частотах их следования 1–1000 кГц в рамках модели, учитывающей как различные механизмы нелинейности коэффициента поглощения, так и вклад радиального теплоотвода в эффект накопления тепла от импульса к импульсу.

## 2. Основные уравнения модели нагрева и фотовозбуждения кремния наносекундными импульсами

Динамику нагрева и фотовозбуждения монокристаллического кремния наносекундными лазерными импульсами опишем системой связанных уравнений теплопро-

водности, диффузии фотовозбужденных носителей, а также уравнения, описывающего затухание излучения при его распространении в глубь материала. Вместе с начальными и граничными условиями в цилиндрической системе координат указанная система будет иметь следующий вид:

$$c_s(T_s) \frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r k_s(T_s) \frac{\partial T_s}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k_s(T_s) \frac{\partial T_s}{\partial z} \right) + q_T(T_s, n_e), \quad (1)$$

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r D(T_s) \frac{\partial n_e}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( D(T_s) \frac{\partial n_e}{\partial z} \right) + q_n(T_s, n_e), \quad (2)$$

$$\frac{\partial q}{\partial z} = - [\alpha_{vc}(T_s, n_e) + \alpha_n(T_s, n_e)] q, \quad (3)$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial z} \Big|_{z=0} = \frac{\partial T_s}{\partial z} \Big|_{z=L} = 0, \quad \frac{\partial T_s}{\partial r} \Big|_{z=0} = \frac{\partial T_s}{\partial r} \Big|_{r \rightarrow \infty} = 0, \quad (4)$$

$$\frac{\partial n_e}{\partial z} \Big|_{z=0} = \frac{\partial n_e}{\partial z} \Big|_{z=L} = 0, \quad \frac{\partial n_e}{\partial r} \Big|_{z=0} = \frac{\partial n_e}{\partial r} \Big|_{r \rightarrow \infty} = 0, \quad (5)$$

$$q \Big|_{z=0} = (1 - R_s) q_0, \quad (6)$$

$$T_s \Big|_{r=0} = T_0, \quad n_e \Big|_{r=0} = n_0, \quad (7)$$

где  $T_s = T_s(r, z, t)$  – температура монокристаллического кремния;  $n_e = n_e(r, z, t)$  – концентрация фотовозбужденных носителей;  $q = q(r, z, t)$  – плотность мощности излучения;  $c_s$  – удельная теплоемкость кремния;  $k_s$  – коэффициент теплопроводности;  $D$  – коэффициент диффузии носителей;  $q_T$  – объемный источник тепла;  $q_n$  – объемный источник носителей;  $\alpha_{vc}$  – коэффициент межзонного поглощения;  $\alpha_n$  – коэффициент внутризонного поглощения на свободных носителях;  $R_s = 0.33$  – коэффициент отражения на длине волны 1.06 мкм [19];  $q_0 = q_0(r, t)$  – плотность мощности падающего лазерного излучения;  $L$  – толщина пластины кремния;  $T_0 = 293$  К и  $n_0 = 10^{12}$  см<sup>-3</sup> – начальные температура кремния и концентрация носителей;  $r, z$  – радиальная и осевая координаты;  $t$  – время. Полагается, что лазерный пучок имеет осевую симметрию и облучение осуществляется без его перемещения по поверхности.

Объемные источники в формулах (1) и (2) определяются в соответствии со следующими соотношениями:

$$q_n(T_s, n_e) = \frac{\alpha_{vc}(T_s, n_e) q}{\hbar \omega} - \left( \gamma n_e^3 + \frac{n_e}{\tau_r} \right), \quad (8)$$

$$q_T(T_s, n_e) = \left\{ \alpha_{vc}(T_s, n_e) \left[ 1 - \frac{E_g(T_s, n_e)}{\hbar \omega} \right] + \alpha_n(T_s, n_e) \right\} q + \left( \gamma n_e^3 + \frac{n_e}{\tau_r} \right) E_g(T_s, n_e), \quad (9)$$

где  $\hbar$  – приведенная постоянная Планка;  $\omega$  – частота падающего излучения;  $\gamma = 1.2 \times 10^{-31}$  см<sup>6</sup>·с<sup>-1</sup> – коэффициент оже-рекомбинации [26];  $\tau_r \approx 10^{-6}$  с – характерное время безызлучательной рекомбинации [25];  $E_g$  – ширина запрещенной зоны кремния, зависящая как от температуры кремния, так и от концентрации свободных носителей (см. ниже). Первое слагаемое в формуле (8) связано с генерацией носителей при межзонном поглощении, при этом избыток энергии ( $\sim \hbar \omega - E_g$ ) передается решетке за счет

электрон-фононного взаимодействия. Второе слагаемое в (8) связано с процессами безызлучательной рекомбинации и оже-рекомбинации. При этом в решетке будет выделяться энергия  $\sim E_g$ . Хотя непосредственно в процессе оже-рекомбинации энергия в решетке не выделяется, соответствующее слагаемое в выражении для теплового источника (9) все же присутствует, поскольку энергия, полученная третьим носителем, практически мгновенно передается решетке посредством электрон-фононного взаимодействия. В формуле (9) также присутствует слагаемое, связанное с поглощением на свободных носителях.

Для описания температурных зависимостей теплоемкости и теплопроводности кремния мы использовали известные из литературы аппроксимации экспериментальных данных (см., напр., [19] и цитируемые там источники):

$$c_s(T_s) = 1.6 \exp(2.375 \times 10^{-4} T_s) \text{ [Дж}\cdot\text{см}^{-3}\cdot\text{К}^{-1}], \quad (10)$$

$$k_s(T_s) = \begin{cases} 1521 T_s^{-1.226}, & T_s < 1200 \text{ К} \\ 8.98 T_s^{-0.502}, & T_s \geq 1200 \text{ К} \end{cases} \text{ [Вт}\cdot\text{см}^{-1}\cdot\text{К}^{-1}]. \quad (11)$$

Коэффициент амбиполярной диффузии носителей вычисляется по формуле

$$D = \frac{2D_e D_h}{D_e + D_h},$$

где коэффициенты диффузии электронов ( $D_e$ ) и дырок ( $D_h$ ) оценивались как  $D_{e,h} \approx v_{e,h}^2 / (3\gamma_{ph})$  (здесь  $v_{e,h}$  – средние тепловые скорости электронов и дырок,  $\gamma_{ph}$  – частота столкновений носителей с решеткой).

При нагревании кремния до температуры плавления и поглощения энергии, соответствующей удельной теплоте плавления, происходит фазовый переход, сопровождающийся изменением оптических и теплофизических свойств кремния. Как известно, при плавлении он испытывает переход полупроводник – металл, при этом поглощение становится поверхностным, а коэффициент отражения существенно увеличивается. Для описания температурного поля в расплаве решается уравнение теплопроводности, а движение фронта плавления описывается в рамках классической задачи Стефана:

$$c_1 \frac{\partial T_1}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r k_1(T_1) \frac{\partial T_1}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k_1(T_1) \frac{\partial T_1}{\partial z} \right), \quad (12)$$

$$-k_1 \frac{\partial T_1}{\partial n_{sl}} + k_s \frac{\partial T_s}{\partial n_{sl}} = v_{sl} L_{sl}, \quad (13)$$

$$T_s|_{r=r_{sl}, z=z_{sl}} = T_1|_{r=r_{sl}, z=z_{sl}} = T_m, \quad (14)$$

$$-k_l \frac{\partial T_1}{\partial z} \Big|_{z=0} = (1 - R_1) q_0, \quad (15)$$

где  $T_1 = T_1(r, z, t)$  – температура расплава кремния;  $c_1 = 2.65 \text{ Дж}\cdot\text{см}^{-3}\cdot\text{К}^{-1}$  – теплоемкость расплава [19];  $k_1$  – теплопроводность расплава;  $v_{sl}$  – скорость движения межфазной границы;  $L_{sl} = 3.8 \times 10^3 \text{ Дж/см}^3$  – удельная теплота плавления [19];  $n_{sl}$  – нормаль к фронту плавления;  $z_{sl}$  и  $r_{sl}$  – координаты межфазной границы;  $R_1 = 0.8$  – коэффициент отражения расплава [19];  $T_m = 1685 \text{ К}$  – температура плавления кремния.

Для стадии нагрева, на которой присутствует как твердая, так и жидкая фазы кремния, в не занятой расплавом области решается уравнение теплопроводности (1), к которому, помимо граничных условий (4), добавляются условия (13) и (14), действующие на межфазной границе. Поскольку расплав кремния непрозрачен для падающего излучения, в области, находящейся под слоем расплава,  $q = 0$ . Предполагается также, что на межфазной границе отсутствует поток носителей. В области, где имеется расплав, решается только уравнение (12) с граничными условиями (13)–(15), при этом считается, что сразу после затвердевания расплава концентрация носителей становится равной равновесной концентрации в твердом кремнии при температуре плавления.

### 3. Модель зависимости коэффициента поглощения монокристаллического кремния на длине волны 1.06 мкм от концентрации фотовозбужденных носителей и температуры

Как уже отмечалось, изменение коэффициента межзонного поглощения кремния  $\alpha_{vc}$  на длине волны 1.06 мкм связано с температурным сужением ширины запрещенной зоны, с увеличением концентрации фононов (что увеличивает вероятность не прямых переходов), а также с ДЭБМ. В таких условиях коэффициент  $\alpha_{vc}$ , входящий в уравнения (3), (8), (9), будет определяться выражением вида (см. [27], с. 236)

$$\begin{aligned} \alpha_{vc}(T_s, n_c) = A & \left\{ [N(T_s) + 1] \int_{E_g(T_s, n_c)}^{\hbar(\omega - \Omega)} \{ f_v[E - \hbar(\omega - \Omega)] - f_c(E) \} \right. \\ & \times \sqrt{E - E_g(T_s, n_c)} \sqrt{\hbar(\omega - \Omega) - E} \\ & + N(T_s) \int_{E_g(T_s, n_c)}^{\hbar(\omega + \Omega)} \{ f_v[E - \hbar(\omega + \Omega)] - f_c(E) \} \\ & \left. \times \sqrt{E - E_g(T_s, n_c)} \sqrt{\hbar(\omega + \Omega) - E} dE \right\}, \quad (16) \end{aligned}$$

где  $A$  – постоянный коэффициент, определяемый по экспериментальным данным;

$$N(T_s) = \left[ \exp\left(\frac{\hbar\Omega}{k_B T_s}\right) - 1 \right]^{-1}$$

– число заполнения фононов с энергией  $\hbar\Omega$ ;  $k_B$  – постоянная Больцмана;

$$f_{c,v}(E, T_s, n_c) = \left[ \exp\left(\frac{E - \mu_{c,v}(T_s, n_c)}{k_B T_s}\right) + 1 \right]^{-1}$$

– квазиравновесные функции распределения валентных электронов и электронов проводимости по энергии;  $\mu_{c,v}$  – химические потенциалы, определяемые из условий нормировки

$$\int_{E_g}^{\infty} f_c(E) g_c(E) dE = n_c, \quad \int_{E_0}^0 f_v(E) g_v(E) dE = n_v - n_c;$$

$n_v$  – максимальная концентрация валентных электронов в кремнии; энергия отсчитывается от потолка валентной зоны. Плотности уровней  $g_{c,v}$  находятся по формулам

$$g_c(E) = \frac{\sqrt{2} m_c^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E - E_g}, \tag{17}$$

$$g_v(E) = \frac{\sqrt{2} m_v^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{-E}, \tag{18}$$

где  $m_c = 1.08m_0$ ;  $m_v = 0.6m_0$  – эффективные массы плотностей состояний в кремнии [6];  $m_0$  – масса электрона.

Уменьшение ширины запрещенной зоны связано с нагревом решетки и с генерацией электрон-дырочной плазмы:

$$E_g(T_s, n_e) = E_g(0, 0) - A_T N(T_s) - A_n \sqrt[3]{n_e}, \tag{19}$$

где  $A_T$  – параметр Фэна;  $A_n = 1.5 \times 10^{-8}$  эВ/см [28]. Учет температурного вклада в снижение  $E_g$  соответствует модели Фэна [29]. Значения параметров  $E_g(0, 0) = 1.17$  эВ,  $A_T = 0.24$  эВ и  $\hbar\Omega = 0.054$  эВ выбирались исходя из условия согласия с экспериментальной зависимостью  $E_g(T_s, n_0)$  (см. [30], с. 465) (рис.1,*a*) и экспериментальной зависимостью  $\alpha_{vc}(T_s, n_0)$ , приведенной в работе [31] (рис.1,*б*). Значение параметра  $A$  в формуле (16) определялось по начальному значению  $\alpha_{vc}(T_0, n_0) \approx 12$  см<sup>-1</sup>. На рис.1,*б* представлена также температурная зависимость  $\alpha_{vc}(T_s, n_e = 10^{20}$  см<sup>-3</sup>). Видно, что при такой концентрации, характерной для наносекундных воздействий на кремний [25], наблюдается заметное снижение  $\alpha_{vc}$  при  $T_s < 900$  К, связанное с ДЭБМ, однако при больших температурах различие невелико. Таким образом, для ответа на вопрос о роли ДЭБМ необходимо рассматривать ситуацию в динамике.

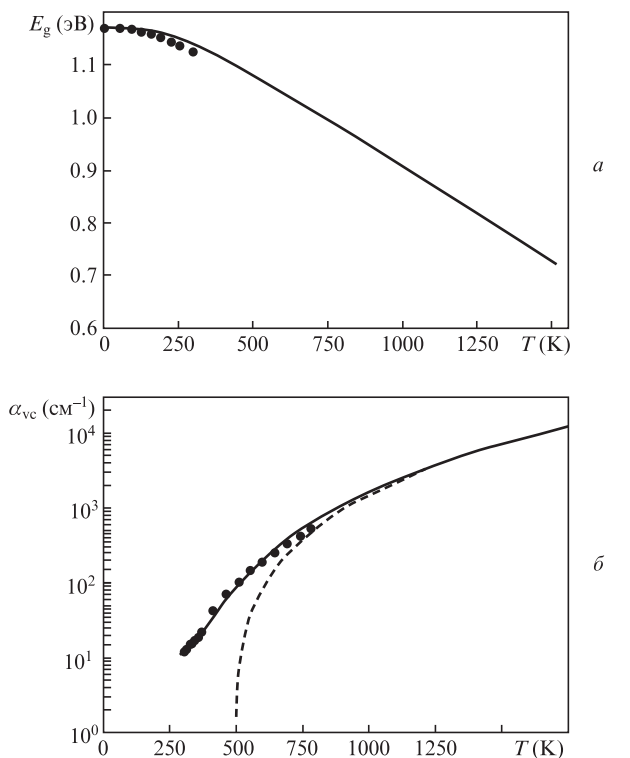


Рис.1. Зависимости ширины запрещенной зоны кремния (*a*) и коэффициента межзонного поглощения (*б*) от температуры; *a*: точки – экспериментальные данные [30], сплошная кривая – аппроксимация по формуле (19); *б*: точки – экспериментальные данные [31], сплошная кривая – расчет по формуле (16) при  $n_e = n_0$ , штриховая кривая – расчет по формуле (16) при  $n_e = 10^{20}$  см<sup>-3</sup>.

Коэффициент поглощения свободными носителями  $\alpha_n$  вычисляется по модели Друде. При  $\omega > \omega_p$ ,  $\omega > \gamma_{ph}$  ( $\omega_p$  – плазменная частота) согласно [32]

$$\alpha_n(T_s, n_e) = \sigma(T_s) n_e, \tag{20}$$

где

$$\sigma(T_s) = \frac{e^2 \gamma_{ph}(T_s)}{\epsilon_0 n m_{opt} c \omega^2};$$

$\sigma$  – сечение поглощения на свободных носителях;  $e$  – заряд электрона;  $\epsilon_0$  – электрическая постоянная;  $c$  – скорость света;  $n = 3.6$  – показатель преломления кремния [6];  $m_{opt} = 0.15m_0$  – приведенная оптическая масса носителей [33];  $\gamma_{ph}(T_s) = \gamma_{ph}(T_0) T_s / T_0$  – частота столкновений носителей с фононами. Выбор  $\gamma_{ph}(T_0) \approx 8 \times 10^{13}$  с<sup>-1</sup> позволяет согласовать сечение поглощения при комнатной температуре с экспериментальным значением  $\sigma(T_0) \approx 5 \times 10^{-18}$  см<sup>2</sup> [34].

#### 4. Экспериментальное определение пороговых плотностей потока плавления при наносекундном лазерном воздействии

Непосредственное измерение температуры, до которой нагревается кремний при наносекундном лазерном воздействии (в том числе в многоимпульсном режиме) довольно затруднительно, поэтому для проверки адекватности предложенной модели разумно использовать экспериментальные зависимости пороговых плотностей энергии плавления от длительности импульса, от числа импульсов, от частоты их следования и т. п.

В качестве источника излучения при проведении экспериментов использовался наносекундный волоконный иттербиевый лазер, генерирующий импульсы длительностью 4–200 нс при частотах следования 2–100 кГц. Образцами служили пластины монокристаллического кремния марки КЭФ4.5 толщиной 400 мкм с кристаллографической ориентацией поверхности (100). Распределение интенсивности по сечению пучка и его диаметр в плоскости обработки определялись с помощью измерителя профиля пучка Veamage CCD23. Излучение, имеющее поперечный гауссов профиль интенсивности, фокусировалась в пятно радиусом 35 мкм по уровню  $e^{-1}$ . В случае многоимпульсного воздействия число импульсов в серии контролировалось с помощью высокоскоростного фотодиода.

Оплавление поверхности кремния (как для одноимпульсного, так и для многоимпульсного воздействий) фиксировалось по формированию характерного микрорельефа, показанного на рис.2, появление которого обычно связывается с действием термокапиллярных сил в неоднородно нагретой ванне расплава (см., напр., [35]). За порог плавления принималась плотность энергии в центре пучка, при которой плавится область в центральной части пучка; ее радиус составляет  $\sim 0.3r_0$  (т.е. примерно 11 мкм при  $r_0 = 35$  мкм). Отметим, что при меньших плотностях энергии наличие микрорельефа зафиксировать не удастся (т.е. фактически в нашей работе за порог плавления принимается порог формирования микрорельефа, показанного на рис.2). Конечно, такой способ определения порогов плавления выглядит не вполне строгим, од-



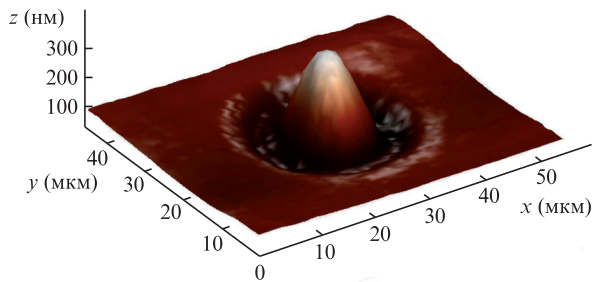


Рис.2. Микрорельеф поверхности кремния, сформированный при наносекундном многоимпульсном воздействии (режим облучения:  $Q = 1.4 \text{ Дж/см}^2$ ,  $t_p = 14 \text{ нс}$ ,  $r_0 = 35 \text{ мкм}$ ,  $f = 99 \text{ кГц}$ , число импульсов  $N_p \sim 100$ ).

нако определенные таким образом пороговые плотности энергии достаточно хорошо согласуются с данными, полученными по методике, которая основана на измерении скачка коэффициента отражения при плавлении кремния [36].

### 5. Анализ нагрева и фотовозбуждения кремния при одноимпульсном воздействии

Численный анализ системы уравнений (1) и (2), описывающих нагрев кремния в твердой фазе, осуществлялся с использованием локально-одномерной неявной схемы (см. [37], с. 332). Поскольку при нагреве кремния в твердой фазе в рассматриваемых условиях источник тепла является объемным, то моделирование процесса плавления поверхностного слоя осуществлялось следующим образом. При достижении на поверхности кремния температуры, равной температуре плавления, ее рост прекращался до момента поглощения энергии, равной соответствующей удельной теплоте плавления. После этого считалось, что поверхностный слой расплавился, и источник тепла переносился на поверхность. Далее в области, занятой расплавом, решалось уравнение (12) (также с использованием локально-одномерной неявной схемы). На стадии остывания для ускорения расчетов осуществлялся переход на более грубую расчетную сетку и увеличивался шаг по времени.

При выполнении численных расчетов полагалось, что пространственно-временная структура импульса описывается формулой

$$q_p(r, t) = \frac{Q}{t_0} t \exp\left(-\frac{t}{t_0}\right) \exp\left(-\frac{r^2}{r_0^2}\right), \quad (21)$$

где  $Q$  – плотность энергии;  $r_0$  – радиус пучка по уровню  $e^{-1}$ ;  $t_0$  – длительность переднего фронта импульса (при рассмотрении воздействия одиночных импульсов  $q_0 = q_p$ ). При этом полная длительность импульса по полуширине  $t_p \approx 2.5t_0$ . Временная форма импульса, описываемая формулой (21), достаточно хорошо соответствует реальной форме импульсов излучения волоконного лазера, задействованного в эксперименте.

На рис.3 показаны зависимости от времени концентрации фотовозбужденных носителей и температуры кремния на поверхности в центре пучка при облучении импульсом длительностью 14 нс с  $Q = 3.3 \text{ Дж/см}^2$ , близкой к порогу плавления. Видно, что максимальная концентрация носителей составляет около  $2 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$ . Особенностью, характерной именно для воздействия на длине

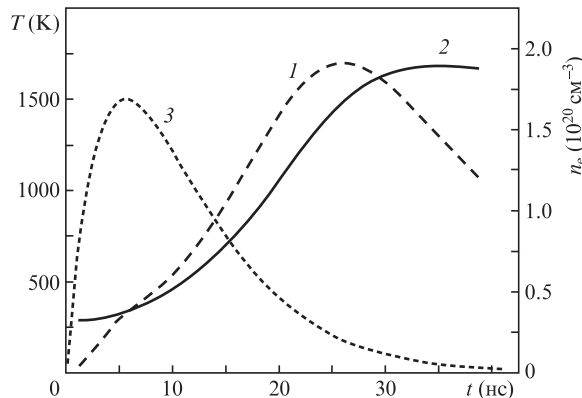


Рис.3. Типичные зависимости от времени концентрации носителей (1) и температуры кремния на поверхности в центре пучка (2) при облучении наносекундным импульсом на длине волны излучения 1.06 мкм; 3 – временная форма импульса (режим облучения см. в тексте).

волны 1.06 мкм, является то, что основной вклад в нагрев поверхности дает задний фронт импульса, и максимальная температура достигается тогда, когда интенсивность греющего импульса становится примерно в 30 раз меньше максимальной (т.е. практически уже после окончания импульса). Это связано с сильной положительной обратной связью между нагревом, фотовозбуждением и коэффициентом поглощения кремния. На рис.4 помимо огибающей импульса показана временная динамика коэффициентов межзонного поглощения  $\alpha_{vc}$  (с учетом и без учета ДЭБМ) и коэффициента поглощения на свободных носителях  $\alpha_n$  вблизи поверхности в центре пучка (режим облучения тот же, что и на рис.3). Видно, что  $\alpha_n$  сравнительно быстро нарастает и вплоть до 12-й наносекунды более чем на порядок превышает  $\alpha_{vc}$ . На заднем фронте импульса происходит быстрый рост коэффициента межзонного поглощения, и он становится больше коэффициента поглощения на свободных носителях.

При расчете, не учитывающем ДЭБМ, коэффициент межзонного поглощения на начальных этапах действия импульса более чем в два раза превышает коэффициент, рассчитанный с учетом ДЭБМ. Имеет смысл отметить, что разница в оценках здесь больше, чем на рис.1,б, поскольку сравниваются коэффициенты поглощения, рассчитанные при одинаковых концентрациях носителей (кон-

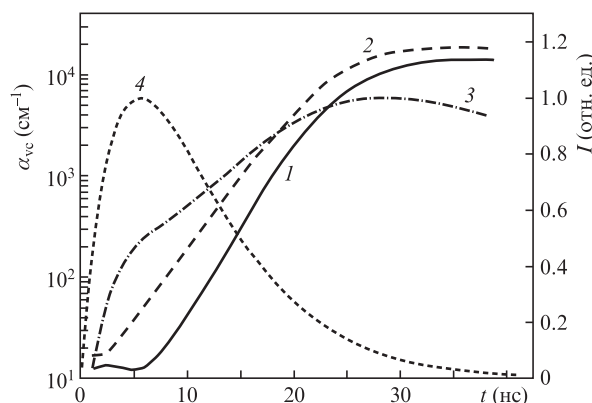


Рис.4. Зависимости коэффициента межзонного поглощения, рассчитанного с учетом (1) и без учета (2) ДЭБМ, а также коэффициента поглощения на свободных носителях (3) от времени; 4 – форма импульса.

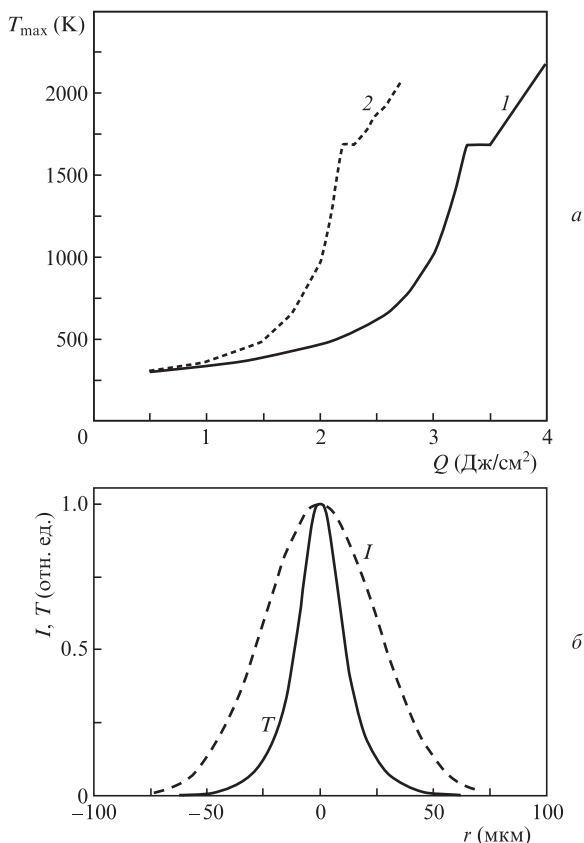


Рис.5. Зависимости максимальной температуры кремния от плотности энергии импульса – расчет с учетом (1) и без учета (2) ДЭБМ (а), а также радиальное распределение температурного поля (б).

центрация носителей дает вклад в сужение ширины запрещенной зоны и приводит к дополнительному увеличению коэффициента поглощения, рассчитанного без учета ДЭБМ). Различие в предсказаниях моделей проиллюстрировано на рис.5,а, где показаны зависимости максимальной температуры решетки от плотности энергии импульса (при  $t_p = 14$  нс). Видно, что предсказания моделей могут различаться в разы. Однако при этом характер зависимости  $T_{max}(Q)$  сохраняется – в обоих случаях температура быстро растет с увеличением плотности энергии. Оказывается, что при куполообразном пространственном распределении интенсивности (в частности, гауссовом) пространственное распределение температуры оказывается существенно более узким (рис.5,б), что обусловлено положительной обратной связью между температурой и коэффициентом поглощения, распределение которых по сечению пучка является сильно неоднородным. Как видно из рис.5,б, пространственная ширина температурного распределения примерно в два раза меньше диаметра пучка (при оценке по полуширине).

На рис.6 представлены рассчитанная (с учетом ДЭБМ) и экспериментальная зависимости пороговой плотности энергии плавления от длительности импульса (расчет проведен для  $r_0 = 35$  мкм, при котором нагрев одиночным наносекундным импульсом может рассматриваться с учетом лишь теплоотвода в глубину). Видно, что совпадение между ними является вполне удовлетворительным, и это подтверждает правомерность использования рассмотренного в работе подхода к моделированию процессов нагрева и фотовозбуждения кремния наносекундными импульсами на длине волны 1.06 мкм.

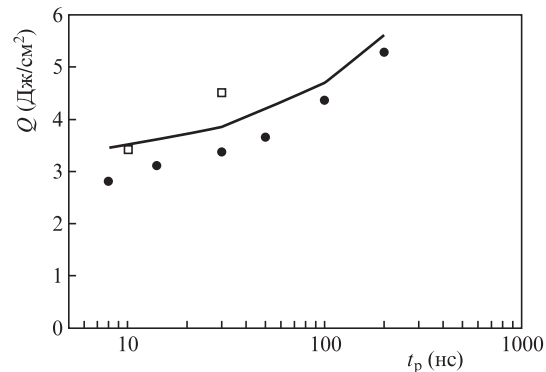


Рис.6. Экспериментальные (точки) и теоретическая (кривая) зависимости пороговой плотности энергии плавления от длительности импульса (● – настоящая работа, □ – работы [17, 36]).

### 6. Анализ нагрева и фотовозбуждения кремния при многоимпульсном воздействии

В случае многоимпульсного воздействия функция  $q_0$ , входящая в граничное условие (6), будет определяться по формуле

$$q_0(r, t) = \sum_{i=0}^{N_p-1} q_p(r, t - if^{-1}) \tag{22}$$

( $f$  – частота следования импульсов,  $N_p$  – число импульсов).

Из простейших теплофизических соображений следует, что степень влияния радиального теплоотвода будет зависеть от диаметра пучка. Оценки показывают, что при диаметрах лазерных пучков, характерных для микрообработки ( $2r_0 \sim 10-100$  мкм), вкладом радиального теплоотвода при анализе многоимпульсного нагрева пренебречь нельзя. Так, для примера на рис.7 показаны зависимости температуры поверхности кремния от времени при облучении серией импульсов длительностью  $t_p = 14$  нс с плотностью энергии  $Q = 1.4$  Дж/см<sup>2</sup> и  $r_0 = 35$  мкм при  $f = 99$  кГц, рассчитанные с учетом и без учета радиального теплоотвода. Как видно из рисунка, радиальный теплоотвод играет существенную роль при многоимпульсной обработке, и при анализе нагрева в рамках одномерных моделей оценки температуры могут быть существенно завышены. Видно также, что при данной частоте следова-

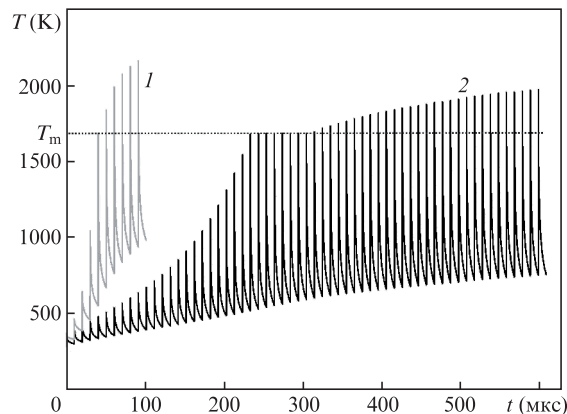


Рис.7. Зависимости температуры поверхности кремния от времени при многоимпульсном воздействии, рассчитанные без учета (1) и с учетом (2) радиального теплоотвода ( $T_m$  – температура плавления кремния).

ния импульсов материал не полностью остывает в промежутках между ними и имеет место эффект накопления тепла. Отметим, что поскольку время жизни носителей  $\tau_r \ll f^{-1}$ , накопления концентрации носителей от импульса к импульсу не происходит. Максимальная температура, достигаемая в течение импульса, при нагреве в твердой фазе растет со временем нелинейно. Когда происходит плавление, скорость роста максимальной температуры от импульса к импульсу замедляется. Это связано с тем, что теперь часть подводимой энергии тратится на продвижение фронта плавления в глубину, а также с увеличением коэффициента отражения расплава.

На рис.8,*a* показана зависимость порогового числа импульсов, необходимого для плавления, от частоты следования импульсов с плотностью энергии  $Q = 1.4 \text{ Дж/см}^2$  ( $t_p = 14 \text{ нс}$ ,  $r_0 = 35 \text{ мкм}$ ). Как видно из рисунка, эффекты накопления тепла начинают заметно проявляться при частотах свыше 30–40 кГц. На рис.8,*б* изображена зависимость порогового числа импульсов, необходимого для плавления поверхности кремния, при  $Q = 1.4 \text{ Дж/см}^2$  ( $t_p = 14 \text{ нс}$ ,  $f = 99 \text{ кГц}$ ) от радиуса пучка. Видно, что в области  $r_0 > 50 \text{ мкм}$  увеличение радиуса пучка не приводит к изменению порогового числа импульсов. Однако в области  $r_0 < 50 \text{ мкм}$  уменьшение радиуса пучка вызывает быстрый рост  $N_p$ , что свидетельствует о большом вкладе радиального потока тепла в процесс остывания кремния между импульсами.

На рис.9 представлены расчетные и экспериментальные зависимости пороговой плотности энергии от числа импульсов при воздействии импульсов с длительностями 14 и 100 нс, следующих с частотой 99 кГц. Видно, что

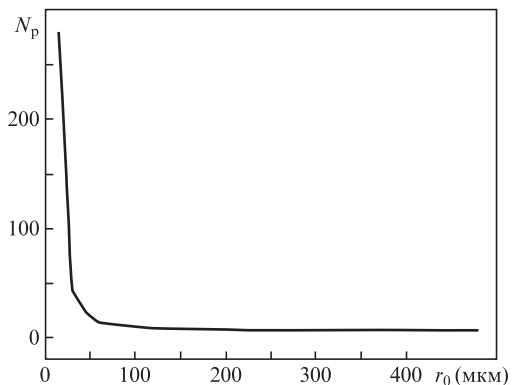
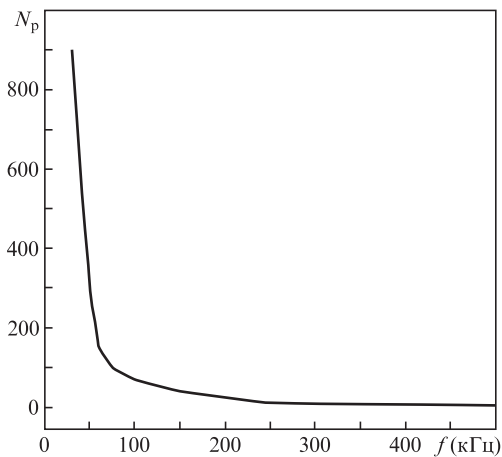


Рис.8. Зависимости порогового числа импульсов от частоты их следования (*a*) и от радиуса пучка (*б*).

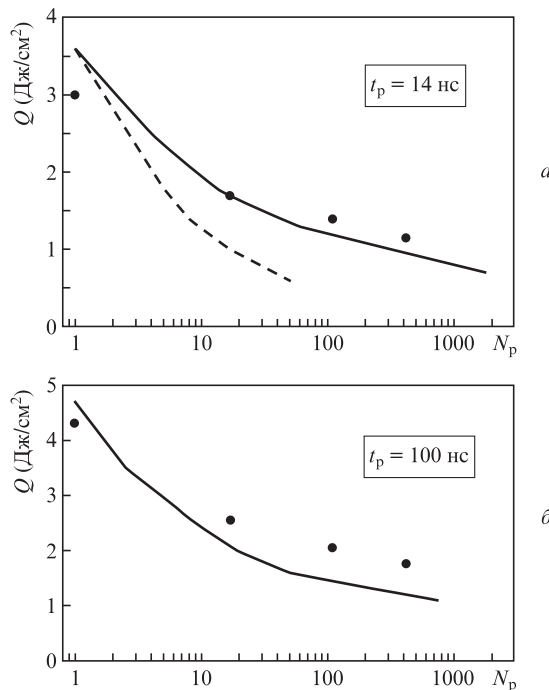


Рис.9. Зависимости пороговой плотности энергии от числа импульсов при  $f = 99 \text{ кГц}$  для  $t_p = 14 \text{ нс}$  (*a*) и  $100 \text{ нс}$  (*б*) (точки – эксперимент (настоящая работа), сплошная кривая – расчет с учетом радиального теплоотвода, штриховая кривая – расчет без его учета).

совпадение расчетных и экспериментальных данных в обоих случаях вполне удовлетворительно. При этом учет в модели радиального теплоотвода является принципиально важным.

### 7. Заключение

В настоящей работе предложена модель нагрева с учетом фотовозбуждения монокристаллического кремния наносекундными лазерными импульсами на длине волны 1.06 мкм, лежащей на границе области собственного поглощения. Показано, что в сложной нелинейной динамике изменения коэффициента межзонного поглощения  $\alpha_{vc}$  важную роль играет динамический эффект Бурштейна–Мосса, игнорирование которого может завышать оценку значения  $\alpha_{vc}$  в несколько раз. Несмотря на это положительная обратная связь между нагревом и величиной коэффициента поглощения остается значительной, что при гауссовом распределении интенсивности в лазерном пучке приводит к тому, что пространственная ширина температурного распределения оказывается заметно меньше диаметра пучка. Указанная особенность является характерной именно для воздействия коротких импульсов на длину волны излучения 1.06 мкм. Установлено, что при характерных для лазерной многоимпульсной микрообработки кремния режимах нельзя пренебрегать радиальным теплоотводом при анализе процессов накопления тепла. Продемонстрировано удовлетворительное согласие рассчитанных в рамках предложенной модели порогов плавления с экспериментальными данными как для одноимпульсных, так и для многоимпульсных наносекундных воздействий.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (соглашение № 14.578.21.0197 (RFMEF157 816X0197)).

1. Zuev D.A. et al. *Appl. Phys. B*, **105**, 545 (2011).
2. Tavera T., Perez N., Rodriguez A., Yurrita P., Olaisola S.M., Castano E. *Appl. Surf. Sci.*, **258**, 1175 (2011).
3. Godbole V.P., Chaudhari S.M. *Bull. Mater. Sci.*, **11**, 97 (1988).
4. Yang Q. et al. *Nano Lett.*, **14**, 1769 (2014).
5. Vaccaro L., Sciortino L., Messina F., Buscarino G., Angello S., Cannas M. *Appl. Surf. Sci.*, **302**, 62 (2014).
6. Акципетров О.А., Баранова И.М., Евтюхов К.Н. *Нелинейная оптика кремния и кремниевых наноструктур* (М: Физматлит, 2012).
7. Банишев А.Ф., Голубев В.С., Кремнев А.Ю. *ЖТФ*, **71**, 33 (2001).
8. Банишев А.Ф., Голубев В.С., Кремнев А.Ю. *Письма в ЖТФ*, **26**, 8 (2000).
9. Scacuin V., Bassim N., Singh R.K., Scacuin D., Hermann J., Boulmer-Leborgne C. *Appl. Surf. Sci.*, **186**, 288 (2002).
10. O'Neil W., Li K. *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.*, **15**, 462 (2009).
11. Li K., Sparkes M., O'Neil W. *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.*, **20**, 900807 (2014).
12. Поляков Д.С., Сальников Н.М., Вейко В.П., Шимко А.А., Михайлова А.А. *Изв. вузов. Сер. Приборостроение*, **60** (11), 1070 (2017).
13. Вейко В.П., Поляков Д.С., Скворцов А.М., Чопенко Е.С. *Письма в ЖТФ*, **43**, 52 (2017).
14. Polyakov D., Veiko V., Skvortsov A. *JLMN*, **10** (3), 269 (2015).
15. Скворцов А.М., Вейко В.П., Хуинь К.Т., Поляков Д.С., Тампер А.М. *Квантовая электроника*, **47** (6), 503 (2017) [*Quantum Electron.*, **47** (6), 503 (2017)].
16. Хуинь К.Т. *Автореф. канд. дис.* (С.-Петербург, Университет ИТМО, 2015).
17. Meyer J.R., Kruer M.R., Bartoli F.J. *J. Appl. Phys.*, **51** (10), 5513 (1980).
18. Lietola A., Gibbons J.F. *J. Appl. Phys.*, **53** (4), 3207 (1982).
19. Tao S., Zhou Y. *J. Appl. Phys.*, **106**, 123507 (2009).
20. Tao S., Zhou Y., Benxin W., Gao Y. *Appl. Surf. Sci.*, **258**, 7766 (2012).
21. Chernek P.J., Orson J.A. *Proc. SPIE*, **4679**, 186 (2002).
22. Verburg P.C., Romer G.R.B.E., Huisin't Veld A.J. *Appl. Phys. A*, **114**, 1135 (2014).
23. Кириченко Н.А., Кузьмин П.Г., Щербина М.Е. *Квантовая электроника*, **41**, 626 (2011) [*Quantum Electron.*, **41**, 626 (2011)].
24. Бонч-Бруевич А.М., Имас Я.А., Либенсон Н.М., Салядинов В.С., Шандыбина Г.Д., Яковлев Е.Б. *ЖТФ*, **47**, 609 (1977).
25. Либенсон Н.М. *Лазерно-индуцированные оптические и термические процессы в конденсированных средах и их взаимное влияние* (СПб: Наука, 2007).
26. Ашитков С.И., Овчинников А.В., Агранат М.Б. *Письма в ЖЭТФ*, **79**, 657 (2004).
27. Грибковский В.П. *Теория поглощения и испускания света в полупроводниках* (Минск: Наука и техника, 1975).
28. Berggren K.F., Sernelius V.E. *Phys. Rev. B*, **24** (4), 1971 (1981).
29. Вайнштейн И.А., Зацепин А.Ф., Кортов В.С. *ФТТ*, **41** (6), 994 (1999).
30. Григорьев И.С., Мейлихов Е.З. *Физические величины* (М.: Энергоатомиздат, 1991).
31. Monodane T., Ohmura E., Fukuyo F., Fukumitsu K., Morita H., Hirata Y. *JLMN*, **1** (3), 231 (2006).
32. Панков Ж. *Оптические процессы в полупроводниках* (М.: Мир, 1973).
33. Ramer A., Rethfeld B., Osmani O. *J. Appl. Phys.*, **116**, 053508 (2014).
34. Bogess T., Bohnert K., Mansour K., Moss S.C., Boyd I., Smirl A. *IEEE J. Quantum Electron.*, **22** (2), 360 (1986).
35. Chen S.C., Cahill D.G., Grigoropoulos C.P. *J. Heat Transfer*, **122**, 107 (2000).
36. Ma C., Ho W-Y, Walser R., Becker M. *Proc. SPIE*, **1848**, 59 (1992).
37. Самарский А.А., Вабищевич П.Н. *Вычислительная теплопередача* (М.: Едиториал УРСС, 2003).