

Моделирование лазерного нагрева многослойных структур на основе кремния и золота

Шафаревич Ю.В.¹, Федотов А.С.^{1,2}

¹Белорусский государственный университет

²Объединенный институт ядерных исследований

uliasafarevic@gmail.com

В настоящее время интерес исследователей привлекает аморфный и микрокристаллический кремний благодаря его широкому применению в электронике, энергетике, медицине и других областях [1]. Получение микро- и нанокристаллического кремния остается трудоемкой задачей. Один из способов создания таких материалов – селективная лазерная кристаллизация тонких пленок аморфного кремния. Такой подход обеспечивает высокую степень химической чистоты образцов и позволяет контролировать объем кристаллизующейся области путем варьирования параметров падающего излучения.

В результате поглощения энергии коротких лазерных импульсов в тонкой пленке аморфного кремния происходит его нагрев и рекристаллизация в участках, где температура достаточно высока.

Цель работы заключается в исследовании влияния параметров лазерного излучения на температурную динамику в пленке аморфного кремния при наличии металлического слоя и при его отсутствии: «тонкая пленка аморфного кремния – кристаллическая подложка» (α -Si – c-Si) и «тонкая пленка аморфного кремния – золотой слой – кристаллическая подложка» (α -Si – Au – c-Si). Золотой слой при этом может играть роль как проводника температуры, снижая длительность процесса, так и активировать металл-ассистированную кристаллизацию [2].

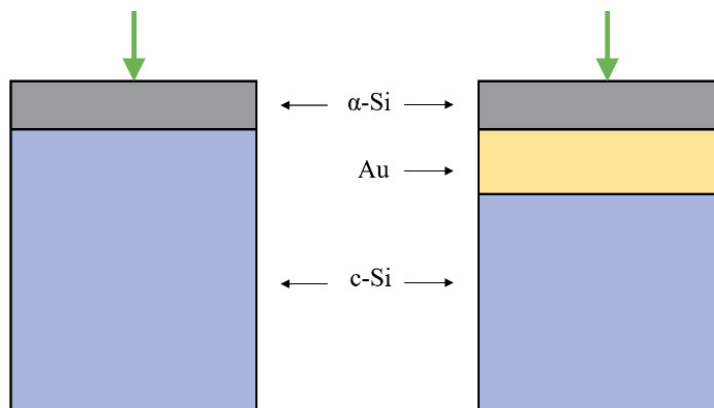


Рис. 1. Схема расчетной области

Задача нахождения температурного поля в веществе описывается неоднородным уравнением теплопроводности с переменными коэффициентами, которое в одномерном случае имеет вид [4]:

$$c(T)\rho(T)\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + Q(x, t), \quad (1)$$

где c – теплоемкость, ρ – плотность, λ – теплопроводность материала, t – время, T – температура, Q – источник.

На границе с воздухом поток тепла определяется законом Стефана-Больцмана:

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0} = \varepsilon \sigma (T_{env}^4 - T^4), \quad (2)$$

где σ – постоянная Стефана-Больцмана, ε – коэффициент серости вещества, T_{env} – температура внешней среды.

На нижнюю границу накладывается условие Дирихле постоянства температуры:

$$T|_{x=l} = T_{env}. \quad (3)$$

Последнее слагаемое в формуле (1) описывает распределение поглощаемой энергии лазерного излучения в единице объема:

$$Q = \kappa I_0 \frac{t}{\tau_p} \exp\left(-\frac{t}{\tau_p}\right) \exp(-\kappa x) (1 - R_c). \quad (4)$$

Решение задачи (1) – (4) отыскивалось методом конечных разностей со стабилизирующим итерационным процессом по значениям температуры на новом слое времени. Конечно-разностная схема имела вид [5]:

$$\rho c \frac{\hat{T}_i^{k+1} - T_i^k}{\tau} = \frac{\lambda_{i+1}^k \left(\hat{T}_{i+1}^{k+1} - \hat{T}_i^{k+1} \right) - \lambda_i^k \left(\hat{T}_i^{k+1} - \hat{T}_{i-1}^{k+1} \right)}{2h^2} + \frac{\lambda_{i+1}^k (T_{i+1}^k - T_i^k) - \lambda_i^k (T_i^k - T_{i-1}^k)}{2h^2} + \hat{Q}_i \quad (5)$$

а граничные условия:

$$\frac{\lambda_3^k \left(\hat{T}_2^{k+1} - \hat{T}_1^{k+1} \right)}{2h} + \frac{3\lambda_1^k \left(\hat{T}_1^{k+1} - \hat{T}_0^{k+1} \right)}{2h} = q, \quad (6)$$

$$\hat{T}_n^{k+1} = T_0, \quad (7)$$

где индекс i отвечает за пространственную координату, индекс k – за номер итерации по температуре для нового временного слоя, $\hat{T}$ – температура на новом временном слое, T – на старом временном слое.

Для решения задачи был написан программный код на Python и Fortran. Примеры рассчитанных профилей распределений температуры при флюенсе 0,01 Дж/см², длительности импульса τ_p 10 нс и длине волны падающего излучения 1064 нм приведены на рисунке 1.

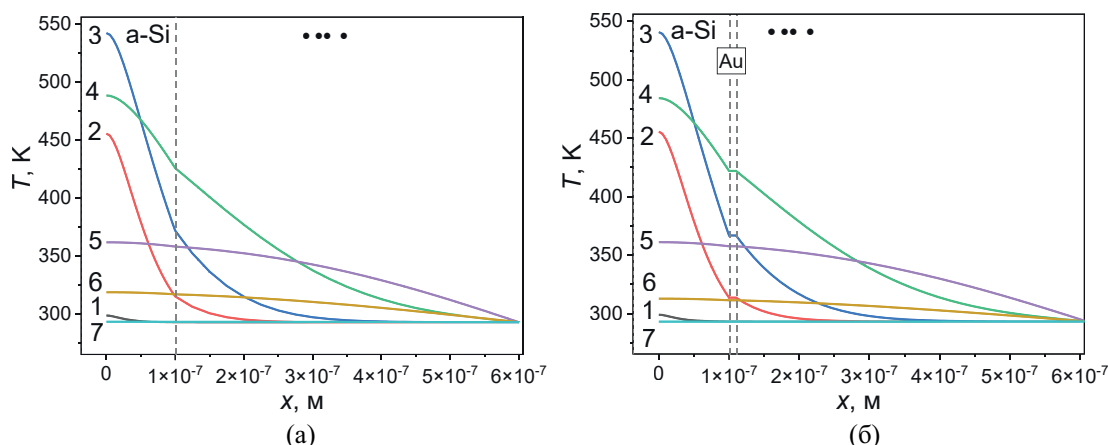
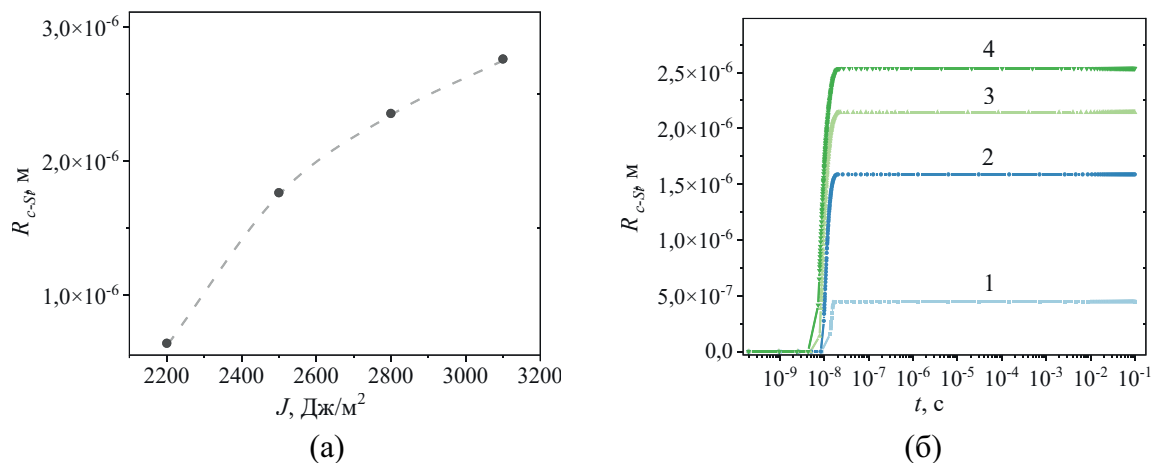


Рис. 1. Распределение температуры в композитах (а) α -Si – c-Si и (б) α -Si – Au – c-Si

Для описания необратимого перехода аморфного кремния в кристаллическое состояние в (1) было добавлено слагаемое Q_{a-c} , которое учитывает затраты теплоты L_{a-c} на кристаллизацию в случае превышения пороговой температуры. Без учета механизма

металл-ассистирования температура перехода при лазерной кристаллизации составляет $T_{a-c} \approx 1100$ К.

Рассчитанная временная зависимость радиуса кристаллизовавшегося материала представлена на рисунке 2. Временная зависимость имеет характер сигмоиды. Переходный участок сигмоиды, который соответствует быстрому росту кристаллической области, занимает около 15 нс ($\approx 1.5\tau_p$), после чего радиус R_{c-Si} выходит на стационарное значение.



Различные флюенсы падающего излучения:

1 – 220 мДж/см², 2 – 250 мДж/см², 3 – 280 мДж/см², 4 – 310 мДж/см²

Рис. 2. Зависимость радиуса R_{c-Si} кристаллита от (а) флюенса и (б) V_{c-Si} от времени

Разработан подход для вычислительного исследования процесса кристаллизации аморфного кремния при нагреве наносекундными лазерными импульсами. Получено пространственное распределение температуры и доли кристаллизовавшегося кремния в аморфном слое спустя различное время с момента начала нагрева. Установлена монотонная зависимость глубины кристаллизовавшейся области от флюенса облучающего лазера в диапазоне (220 – 310) мДж/см². Известное из литературы пороговое значение флюенса, полученное экспериментально, составляет 0,33 мДж/см².

ЛИТЕРАТУРА

1. Auciello O., Aslam D.M. / J Mater Sci. 2021. Vol. 56, № 12. P. 7171–7230.
2. Pereira L. et al // Journal of Non-Crystalline Solids. 2004. Vol. 338–340. P. 178–182.
3. Самохвалов Ф.А. и др. // Теплофизика и аэромеханика. 2023. № 2. P. 381–385.
4. Либенсон, М.Н., Е.Б. Яковлев, Г.Д. Шандыбина. – Санкт-Петербург: НИУ ИТМО, 2014. – 181 с.
5. Самарский А.А., Вабищевич – М: Едиториал УРСС, 2003. – 784 с.