

飞秒激光作用下硅材料的热力响应

郭春风, 齐文宗, 王德飞, 于继平
(四川大学电子信息学院, 四川 成都 610064)

摘要:为描述飞秒激光辐照半导体材料的热力响应过程, 扩展了热电子崩力和自恰场两种模型, 得到了完全耦合的非线性热弹方程组。在单轴应力条件下, 利用有限差分法, 计算了500fs脉冲激光作用下硅膜内载流子温度、晶格温度、热应力和热电子崩力的变化情况, 同时考虑了能量密度和薄膜厚度两个因素的影响。数值结果表明: 能量密度越高达到热平衡所需的时间就越长; 对于比较薄的硅膜, 随着激光作用时间的增加, 热应力的双峰逐渐增加并由前后表面同时向薄膜的中间移动。

关键词:飞秒激光; 超快热弹模型; 硅膜; 热应力

中图分类号: O437; O472

文献标识码: A

Thermomechanical Response of Silicon Materials Heated by Femtosecond Lasers

GUO Chun-feng, QI Wen-zong, WANG De-fei, YU Ji-ping

(School of Electronics and Information Engineering, Sichuan University, Chengdu 610064, China)

Abstract: To describe thermomechanical response of semiconductors subjected to femtosecond laser heating, the hot-electron blast and complete self-consistent models are extended. A set of fully coupled thermoelasticity equations is derived based on the assumption of uniaxial stress. Numerical analysis is performed for a thin silicon film heated by a 500fs laser pulse using a finite difference method. It is shown that it takes a longer time for a high fluence to establish the thermal equilibrium than that for a low fluence. On the other hand, as time prolongs, two peaks of thermal stress increase gradually and move towards the center region of the film for a very thin silicon film.

Key words: femtosecond lasers; ultrafast thermoelasticity model; silicon film; thermal stress

1 引言

近年来, 超短、高峰值功率的脉冲激光已广泛地应用于光纤通讯、医学、超精细加工、高密度信息存储、时间分辨光谱学等诸多领域^[1]。利用飞秒激光对半导体材料进行微加工, 半导体材料受到激光照射会造成其温度场的变化, 进而使材料的热应力场分布发生变化。只要温度或热应力达到阈值就会对材料造成不可逆的热损伤^[2]。因此通过对飞秒脉冲作用下半导体损伤机制的研究和相应损伤过程的理解, 可以为半导体材料的广泛应用积累理论经验。本文基于热电子崩力和自恰场两种模型^[3-6], 建立了飞秒激光辐照半导体材料的超快热弹模型。在单

轴应力条件下, 利用有限差分法, 数值求解了完全耦合的非线性方程组, 详细分析了薄膜内载流子温度、晶格温度与能量密度的关系、热电子崩力和热应力与薄膜厚度的关系。

2 理论模型

为了描述热力响应的基本行为, 取均匀激光束半径趋于无穷大, 因此本文利用单轴应力条件, 在自恰场模型的基础上结合 Chen J K 等人关于热电子崩力方面的工作, 建立了一维超快热弹模型: ①载流

作者简介: 郭春风 (1982 -), 女, 硕士研究生, 主要从事超短脉冲激光与物质相互作用的研究。E-mail: guochunfeng23@163.com
收稿日期: 2008-09-05

子对速率方程;②载流子能量速率方程;③晶格温度与应变速率的耦合方程;④热电子崩力和经典热应力的耦合方程。其中非线性方程为:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\alpha I(z, t)}{h\nu_f} + \frac{\beta I^2(z, t)}{2h\nu_f} - \gamma n^3 + \theta n - \nabla \cdot \bar{J} \quad (1)$$

$$C_{e-h} \frac{\partial T_e}{\partial t} = (\alpha + \Theta n) I(z, t) + \beta I^2(z, t) - \nabla \cdot \bar{W} -$$

$$\frac{C_{e-h}}{\tau_e} (T_e - T_1) - \frac{\partial n}{\partial t} \left\{ E_g + \frac{3}{2} k_B T_e [H_{1/2}^{3/2}(\eta_e) + H_{1/2}^{3/2}(\eta_h)] \right\} - n \left(\frac{\partial E_g}{\partial n} \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial E_g}{\partial T_1} \frac{\partial T_1}{\partial t} \right) \quad (2)$$

$$C_1 \frac{\partial T_1}{\partial t} = \nabla \cdot (k_1 \nabla T_1) + \frac{C_{e-h}}{\tau_e} (T_e - T_1) -$$

$$(3\lambda + 2\mu) \alpha_T T_1 \frac{\partial \varepsilon_{kk}}{\partial t} \quad (3)$$

$$\rho \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + 2\Lambda_{xx} T_e \frac{\partial T_e}{\partial x} \quad (4)$$

式中, n, α, β 分别为载流子浓度、单光子吸收系数、双光子吸收系数; γ, θ, h 分别为俄歇复合系数、碰撞电离系数、普朗克常数; C, T, Θ 分别为热容、温度、自由载流子吸收横截面; τ, E_g, k_B 分别为弛豫时间、带隙能量、玻尔兹曼常数; $k, \lambda, \mu, \alpha_T$ 分别为热导率、Lame 常量、剪切模量、热膨胀系数; $\varepsilon_{kk}, \rho, u_x, \sigma_{xx}$ 分别为体应变、质量密度、 x 方向的位移、正应力; 下标 $e, e-h, l$ 分别表示电子、电子-空穴对和晶格; $2\Lambda_{xx} T_e \partial T_e / \partial x$ 为热电子崩力。

式(1)中, 载流子对通量 $\bar{J}$ 为:

$$\bar{J} = -D \left(\nabla n + \frac{n}{2k_B T_e} \nabla E_g + \frac{n}{2T_e} \nabla T_e \right) \quad (5)$$

其中, 俄歇扩散系数 D 为:

$$D = \frac{2k_B T_e}{q} \frac{\mu_e^0 \mu_h^0}{\mu_e^0 + \mu_h^0} \quad (6)$$

式(2)中, 电子-空穴对热容 C_{e-h}

为:

$$C_{e-h} = \frac{3}{2} n k_B$$

$$\left\{ \begin{aligned} & H_{1/2}^{3/2}(\eta_e) + H_{1/2}^{3/2}(\eta_h) \\ & - \eta_e [1 - H_{1/2}^{3/2}(\eta_e) H_{1/2}^{-1/2}(\eta_e)] \\ & - \eta_h [1 - H_{1/2}^{3/2}(\eta_h) H_{1/2}^{-1/2}(\eta_h)] \end{aligned} \right\} + n \frac{\partial E_g}{\partial T_e} \quad (7)$$

二级能流通量 $\bar{W}$ 为:

$$\bar{W} =$$

$$\{ E_g + 2k_B T_e [H_0^1(\eta_e) + H_0^1(\eta_h)] \} \bar{J} - (k_e + k_h) \nabla T_e \quad (8)$$

对于飞秒激光作用下的半导体, 式(1)和式(2)中的激光强度 $I(z, t)$ 为:

$$I(z, t) = \frac{(\alpha + \Theta n) I_0 e^{-(\alpha + \Theta n)x}}{(\alpha + \Theta n) + \beta I_0 [1 - e^{1 - (\alpha + \Theta n)x}]} \quad (9)$$

式中, I_0 为脉冲激光强度。本文采用 6 阶超高斯脉冲激光:

$$I_0(t) = \frac{3\omega^{1/6} \Gamma(5/6)}{2\pi} \frac{(1-R)\Phi}{t_p} e^{-\omega[(t-t_m)/t_p]^6} \quad (10)$$

其中, Γ, Φ, t_m, t_p 分别为 Gamma 函数、激光能量密度、脉冲时间和脉冲宽度。

在单轴应力条件下, 晶格膨胀变化的时间速率为:

$$\frac{\partial \varepsilon_{kk}}{\partial t} = \frac{1-2\nu}{E} \sigma_{xx} + 3\alpha_T (T_1 - T_0) \quad (11)$$

在初始边界条件下求解方程组(1)~(4)。为了简单起见, 假定硅膜整体温度等于室温, 这里模拟的是自由边界条件。因此初始和边界条件为:

$$\begin{cases} T_e(x, 0) = T_l(x, 0) = T_0 \\ u_x(x, 0) = 0, \frac{\partial u_x(x, 0)}{\partial t} = 0 \\ n(x, 0) = 10^{12} \text{ cm}^{-3}, \sigma_{xx}(x, 0) = 0, \varepsilon_{xx}(x, 0) = 0 \\ J(x, t) = 0, W(x, t) = 0, \sigma_{xx}(x, t) = 0 (x=0, L) \end{cases} \quad (12)$$

3 数值模拟与分析

利用有限差分法, 对脉宽为 500fs 的脉冲激光辐照硅膜进行了数值模拟。由于半导体材料随温度变化的热力学参量比较多, 我们取空间步长为 100nm, 这不能很好地描述热力学参量随空间的变化。通过模拟分析, 将影响热力学参量较小的因素忽略后, 空间步长取为 1nm, 就能很好地描述其随空间的变化。自恰场模型中所采用硅的参量如表 1 所

表 1 硅材料的物理参量

参 量	硅	参 量	硅
$K_l / (\text{W} \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$	$1585 T_1^{-1.23}$	$D / (\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1})$	$18 \times (T_{\text{rm}} / T_1)$
$C_l / (\text{J} \cdot \text{cm}^{-3})$	$1.978 + 3.54 \times 10^{-4} T_1 - 3.68 T_1^{-2}$	E_g / eV	$1.16 - 7.02 \times 10^{-4} T_1^2 / (T_1 + 1108) - 1.5 \times 10^{-8} n^{1/3}$
$k_e / (\text{eV} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{A}^{-1} \text{K}^{-1})$	$-3.47 \times 10^8 + 4.45 \times 10^6 T_e$	R	$0.37 + 5 \times 10^{-5} \times (T_1 - T_{\text{room}})$
τ_e / fs	$240 \times (1 + n/6.0 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3})$	α / cm^{-1}	$5.02 \times 10^3 \exp(T_1 / 430)$
$\gamma / (\text{cm}^6 \cdot \text{s}^{-1})$	3.8×10^{-31}	$\beta / (\text{cm} \cdot \text{GW}^{-1})$	2.0
θ / s^{-1}	$3.6 \times 10^{10} \exp(-1.5 E_g / K_B T_e)$	Θ / cm^2	$5.1 \times 10^{-18} \times (T_1 / T_{\text{room}})$

示^[6-7]。数值分析中所采用的其他热弹参量为^[3-5,8]: $\Lambda = 70 \text{ J}/(\text{m}^3 \cdot \text{K}^2)$, $\rho = 2320 \text{ kg}/\text{m}^3$, 杨氏模量 $E = 1.13 \times 10^7 \text{ N}/\text{cm}^2$, 泊松比 $\nu = 0.42$ 和 $\alpha_T = 1.4591 \times 10^{-8} \text{ K}^{-1}$ 。

图1给出了能量密度分别为 $0.005 \text{ J}/\text{cm}^2$ 和 $0.001 \text{ J}/\text{cm}^2$ 的脉冲激光辐照 2000 nm 厚硅膜时, 薄膜前表面载流子温度、晶格温度以及载流子浓度随时间的变化曲线。从图中可以看出, 载流子温度和晶格温度之间存在着明显的差别, 这就是载流子和晶格之间的非热平衡性。比较图1(a)和图1(b)可以看出, $\Phi = 0.005 \text{ J}/\text{cm}^2$ 时, 薄膜在 $t > 5 \text{ ps}$ 以后慢慢趋于热平衡, 而 $\Phi = 0.001 \text{ J}/\text{cm}^2$ 时, 薄膜在 $t = 3 \text{ ps}$ 时已经基本上达到了热平衡。通过分析可以得出能量密度越高达到热平衡所需的时间就越长。这与 Chen J K 等人给出的结论相一致^[6]。从图中还可以看出, 在 1.834 ps 时载流子浓度的最大值为 $1.23 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, 此值远小于文献[6]给出损伤阈值。这说明低能量密度激光条件下热弹效应对半导体的影响很小。这与文献[9]的实验结论相吻合。

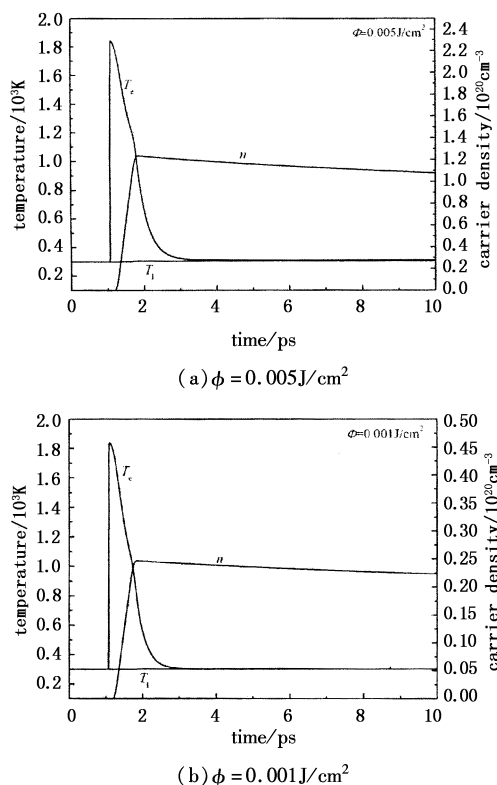


图1 薄膜前表面载流子温度、晶格温度及载流子浓度随时间的变化曲线

图2示出了能量密度为 $0.005 \text{ J}/\text{cm}^2$ 时, 不同空间格点下 2000 nm 厚硅膜内的热应力分布。从图中可以很清楚地看到 20 个空间格点的应力值全部落在 2000 个空间格点下的应力随深度的变化曲线上。

也就是说, 在低能量密度激光条件下将影响热力学参量较小的因素忽略后, 利用有限差分法能够很好地分析飞秒激光作用于硅薄膜时引起的热力响应。

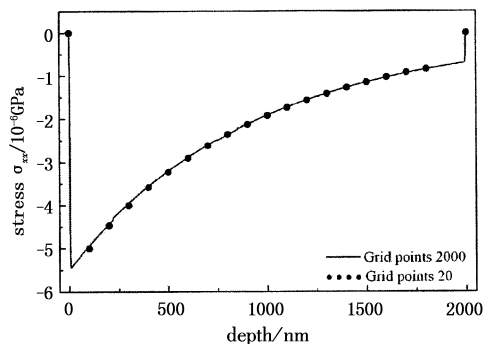


图2 不同空间格点 2ps 时热应力随深度的变化曲线

图3给出了能量密度为 $0.001 \text{ J}/\text{cm}^2$ 的脉冲激光分别辐照 2000 nm 和 200 nm 硅膜时, 不同深度处的热电子崩力随时间的变化关系。从图中可以看出, 低能量密度激光条件下热电子崩力随时间的分布呈双峰结构。比较图3(a)和图3(b)可知, 不同膜厚时, 第二个峰值前后热电子崩力随深度的变化不同, 这暗示了不同膜厚的硅膜内载流子温度的分布是不一样的。不同之处是由于两个方面的原因: ①对于比较厚的硅膜, 光贯穿深度与膜厚可比; ②对于比较薄的硅膜, 载流子温度和晶格温度会在整个薄膜内更快的达到均匀分布。

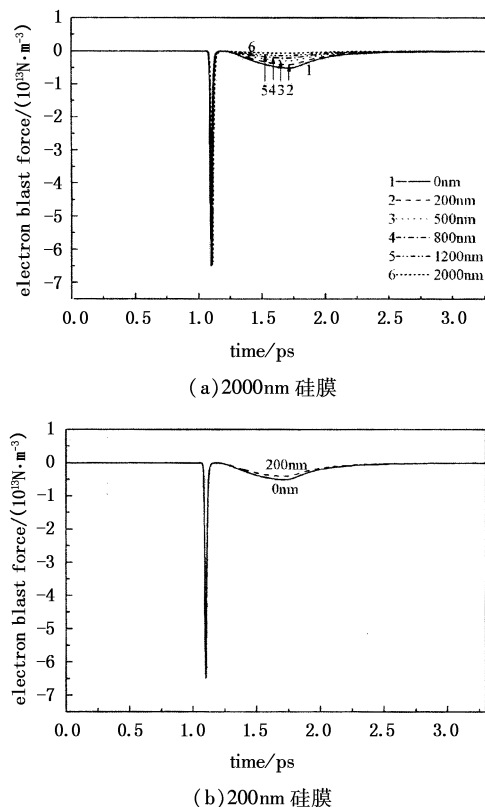
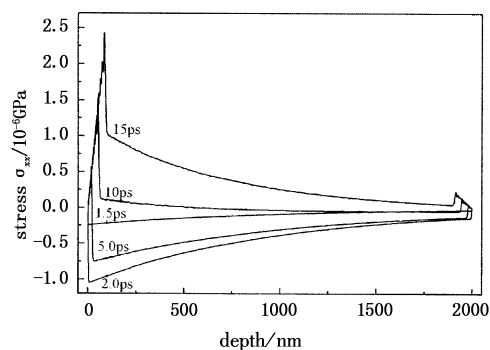
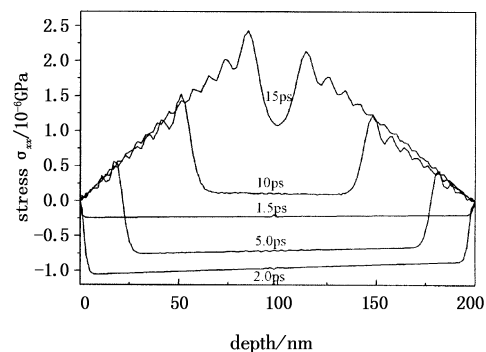


图3 不同深度处电子崩力随时间的变化曲线

能量密度为 $0.001\text{J}/\text{cm}^2$ 时薄膜内热应力的分布如图4所示。从图4(a)可以看出,薄膜前表面附近的应力幅度比较大,随着深度的增加应力值慢慢地减小。结合图3(a)可以看出,薄膜前表面附近的应力主要是由于热电子崩力的作用,随着深度的增加热电子崩力慢慢减小,最后几乎趋于零,热电子崩力将不再起主要作用,晶格的非热平衡将起主要作用。比较图4(a)和图4(b)可知,对于比较厚的硅膜,热应力的最大值出现在受辐照的前表面附近,而这主要是由薄膜材料对入射脉冲激光的吸收深度所决定的;对于比较薄的硅膜,因为薄膜内的光强及其吸收都可以看作是均匀的,所以热应力的峰值出现在薄膜的前后表面附近,此时的热应力随膜厚的变化曲线出现双峰结构。随着激光作用时间的增加,热应力的峰值逐渐增加并由前后表面同时向薄膜的中间移动。当热应力的最大值超过了相应薄膜材料的机械强度时,即可能产生热应力损伤,热应力最大值的位置也就决定了薄膜材料的损伤位置。



(a) 2000nm 膜厚



(b) 200nm 膜厚

图4 不同时间热应力随深度的变化曲线

4 结论

基于热电子崩力和自恰场两种模型,建立了超短脉冲激光辐照半导体材料的超快热弹模型。在单

轴应力条件下,利用有限差分法数值考查了飞秒脉冲激光作用下硅薄膜内载流子温度、晶格温度、热电子崩力和热应力随时间和空间的变化过程,同时考虑了能量密度和薄膜厚度两个因素的影响。计算结果表明:能量密度越高达到热平衡所需的时间就越长,这与 Chen J K 等人给出的结论相一致;在低能量密度激光条件下,热电子崩力随着时间的变化曲线呈双峰结构;对于比较薄的硅膜,随着激光作用时间的增加,热应力的双峰逐渐增加并由前后表面同时向薄膜的中间移动。

参考文献:

- [1] 舒强,舒永春,刘如彬,等. 半导体可饱和吸收镜实现超短高功率脉冲激光研究进展[J]. 激光与红外, 2007,37(3):197-210.
- [2] 黄峰,牛燕雄,汪岳峰,等. 光学窗口材料激光辐照热-力效应的解析计算研究[J]. 光学学报,2006,26(4):576-580.
- [3] J K Chen, J E Beraun, L E Grimes, et al. Modeling of femtosecond laser-induced non-equilibrium deformation in metal films [J]. Int. J. Solids Struct., 2002, 39: 3199-3216.
- [4] J K Chen, J E Beraun, C L Tham. Ultrafast thermoelasticity for short-pulse laser heating [J]. Int. J. Eng. Sci., 2004,42:793-807.
- [5] J K Chen, J E Beraun, D Y Tzou. Thermomechanical response of metals heated by ultrashort-pulsed lasers [J]. J. Thermal Stresses,2002,25:539-558.
- [6] J K Chen, D Y Tzou, J E Beraun. Numerical investigation of ultrashort laser damage in semiconductors [J]. Int. J. Heat Mass Transfer,2005,48:501-509.
- [7] Henry M van Driel. Kinetics of high-density plasmas generated in Si by 1.06- and 0.53-μm picosecond laser pulses [J]. Phys. Rev. B,1987,35(15):8166-8176.
- [8] Lisa P Welsh, Judah A Tuchman, Irving P Herman. The importance of thermal stresses and strains induced in laser processing with focused Gaussian beams [J]. J. Appl. Phys.,1988,64(11):6274-6286.
- [9] P Allenspacher, B Hüttner, W Riede. Ultrashort pulse damage of Si and Ge semiconductors [C]//Proc. SPIE, 2003,4932:358-365.