

## ФОРМУВАННЯ ТЕМПЕРАТУРНИХ ПОЛІВ В ЛЕГОВАНИХ СТРУКТУРАХ НА ОСНОВІ Si ПРИ ЛАЗЕРНОМУ ОПРОМІНЕННІ: ІМПУЛЬСНИЙ РЕЖИМ

Р.М. БУРБЕЛО, М.В. ІСАЄВ, А.Г. КУЗЬМИЧ

УДК 535.16:534.341  
©2010Київський національний університет ім. Тараса Шевченка, фізичний факультет  
(Вул. Володимирська, 64, Київ 01601; e-mail: rmb@univ.kiev.ua)

У роботі представлено результати аналізу, які пояснюють загальну тенденцію в особливостях процесу поширення тепла в напівпровідникових структурах на основі Si з модифікованими властивостями приповерхневого шару при опроміненні їх коротким лазерним імпульсом. Показано, що наявність структурної неоднорідності (модифікованого шару) та врахування впливу нелінійної залежності коефіцієнта температуропровідності приводить до суттєвої трансформації області (її зменшення), локалізації теплової енергії та збільшення температури в приповерхневому шарі матеріалу.

### 1. Вступ

Фотоакустична (ФА) діагностика є тією областю досліджень різноманітних властивостей матеріалів, яка останнім часом інтенсивно розвивається. Визначальною складовою процесу енергоперетворення тут є саме фототермічне перетворення (ФТП) як результат нестационарного нагріву середовища електромагнітним випромінюванням (наприклад, лазерним).

Інтерес, який сьогодні спостерігається до досліджень ФА явищ, пов'язаний в основному з успішним застосуванням різноманітних ФА методів у фізичному матеріалознавстві і особливо в мікро- та оптоелектроніці [1]. Зауважимо, що повний опис ефекту ґрунтується на поширенні щонайменше на трьох типах полів (світлових, теплових, пружних) та енергоперетворення між ними, а в напівпровідникових матеріалах, а ще із залученням електронно-діркової підсистеми. Зрозуміло, що навіть для однорідних неперервних середовищ існують серйозні проблеми в його описі. Але ці проблеми ще більше ускладнюються при розвитку моделі ФА ефекту в неоднорідному середовищі (наприклад, у шаруватих структурах). Подібних невирішених питань маємо значну кількість, починаючи від особливостей поглинання світла в неоднорідному середовищі – до впливу меж поділу на

поширення породжених нестационарним поглинанням теплових хвиль і т. п.

На сьогодні у різноманітних областях фізичного матеріалознавства (наприклад, для визначення теплових параметрів; розрахунку ФА сигналу, що дає можливість визначити пружні сталі матеріалу; при дослідженні процесів лазерної обробки) актуальною є задача розрахунку часової еволюції просторового розподілу температурних полів у матеріалі.

Так, у роботі [2] наведено аналіз аналітичного розв'язку рівняння теплопровідності з врахуванням відтоку тепла із поверхні. Отримані результати свідчать про те, що максимум температурної кривої переміщується в глибину зразка. У даній роботі проаналізовано лише однорідний за своєю структурою матеріал, отримані результати непридатні для розрахунку теплових полів у неоднорідних структурах. Вказана проблема частково вирішується в [3], де автори моделюють теплову структуру зразка окремими шарами, всередині яких теплопровідність стала, тобто для кожного такого шару можна записати однорідне рівняння теплопровідності. Застосувавши перетворення Лапласа та ввівши матрицю теплового опору між шарами, отримано матриці перенесення, які дозволяють описати процес поширення тепла в неоднорідних структурах, ввівши *ефективну теплопровідність* (узагальнену для всієї структури). У межах запропонованого методу неможливо розглянути нелінійні процеси під час поширення тепла.

Метою даної роботи є аналіз процесу формування температурних профілів як результат дії коротких лазерних імпульсів ( $\sim 10^{-8}$  с) на напівпровідникові матеріали на основі кремнію (Si залишається одним з основних матеріалів сучасної мікроелектроніки), в яких відповідно до технологічних потреб суттєво змінені (модифіковані) приповерхневі властивості. Ці зміни (наприклад, див. [4], де досліджено вплив іонного легування монокристалічного кремнію на величину коефіцієнта температуропровідності матеріа-

лу модифікованої структури) для величин, що визначають теплові властивості матеріалів, можуть сягати більше декількох порядків. З огляду на те, що великий інтерес являє саме дія на середовище високоенергетичного лазерного випромінювання у роботі також проаналізовано вплив нелінійної залежності коефіцієнта температуропровідності від температури.

## 2. Математична модель

Розглянемо таке залежне від часу нелінійне рівняння термодифузії:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left( D(T, z) \frac{\partial T}{\partial z} \right) + f(z)g(t), \quad (1)$$

де  $D$  – коефіцієнт температуропровідності, що в загальному випадку залежить від просторової координати (у неоднорідних зразках) та від температури;  $f(z)$  – функція, що характеризує просторовий розподіл джерел тепла у зразку. Для випадку, що розглянуто відповідно до закону Бугера–Ламберта (джерелом тепла є лазерне випромінювання, що поглинається матеріалом), маємо

$$f(z) = \frac{I(1-R)\alpha \exp(-\alpha z)}{c\rho},$$

$g(t)$  – функція, що характеризує часовий розподіл джерел енергії, що у випадку одинокого імпульсу має вигляд  $g(t) = H(t) - H(t + \tau)$ , де  $H(t)$  – функція Хевісайда. У всіх розрахунках будемо вважати такі величини:  $I = 10 \text{ МВт/см}^2$  – потужність лазерного випромінювання,  $\tau = 20 \text{ нс}$  – тривалість імпульсу,  $R = 0,37$  – коефіцієнт відбиття від поверхні зразка,  $\alpha = 5 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$  – коефіцієнт поглинання світла матеріалом,  $c = 0,8 \text{ Дж/(г К)}$  та  $\rho = 2,3 \text{ г/см}^3$  – теплоємність та густина матеріалу, які є сталими. Будемо слідкувати лише за зміною коефіцієнта температуропровідності.

На практиці найчастіше реалізуються такі граничні умови:

–  $(\partial T / \partial z)|_{z=0} = 0$  – відсутність відтоку тепла від поверхні зразка в зовнішнє середовище;

–  $T|_{z=z_{\max}} = 0$  – контакт нижньої поверхні зразка з термостатом ( $z_{\max} = 300 \text{ мкм}$  – товщина зразка)

та початкові умови:

–  $T|_{t=0}$  – рівномірний розподіл температури у зразку до опромінення (початкову температуру візьмемо за нуль; розглянемо лише перевищення над початковою температурою).

Відповідно до мети роботи розглянемо випадки опромінення коротким лазерним імпульсом однорідного зразка та зразка з модифікованими властивостями приповерхневого шару (двошарова структура). Для визначеності будемо розглядати монокристалічний кремній – Si ( $p$ -тип,  $D_0 = 0,94 \text{ см}^2/\text{с}$ ,  $N_p \sim 10^{12} \text{ см}^{-3}$ ) та двошарову структуру “легований шар + кристал підкладка Si” – Si<sub>p+p+</sub> ( $N_p \sim 10^{20} \text{ см}^{-3}$ , температуропровідність легovanого шару  $D_{p+} = 0,25 \text{ см}^2/\text{с}$  [5]). Для визначеності будемо вважати, що товщина модифікованого шару  $d_{p+} = 0,6 \text{ мкм}$  і у випадку сильного поглинання світла ( $\alpha^{-1} = 0,2 \text{ мкм}$ ) практично все випромінювання поглинається в першому шарі. Зрозуміло, що тоді формування температурних профілів у структурах, що розглядаються, буде визначатися в основному процесами дифузії тепла. У першому та другому випадках оцінимо також роль температурної залежності коефіцієнта температуропровідності ( $D(T)$ ).

## 3. Випадок температурнезалежного коефіцієнта температуропровідності

### 3.1. Однорідний зразок ( $D = \text{const}$ )

Проаналізуємо розподіл температури при опроміненні однорідного за структурою зразка. Будемо вважати, що коефіцієнт температуропровідності не залежить від температури ( $D = \text{const}$ ). Тоді розв’язок рівняння (1) можна отримати в аналітичному вигляді

$$T_1(z, t) = \begin{cases} \sum_{n=0}^{\infty} f_n(t) \cos(a_n z), & t \leq \tau, \\ \sum_{n=0}^{\infty} f_n(\tau) \frac{\exp(-a_n D t)}{\exp(-a_n D \tau)} \cos(a_n z), & t \geq \tau, \end{cases}$$

$$f_n(t) = A_n (1 - \exp(-a_n^2 D t)),$$

$$A_n = \frac{2}{z_{\max}} \frac{I(1-R)\alpha}{c\rho D a_n^3} \frac{(-1)^n \exp(-\alpha z_{\max}) + \alpha/a_n}{1 + (\alpha/a_n)^2},$$

$$a_n = \left( \frac{\pi}{2} + \pi n \right) \frac{1}{z_{\max}}.$$

На рис. 1 наведено розраховані температурні профілі при опроміненні зразка Si лазерним імпульсом тривалістю  $\tau = 20 \text{ нс}$  у різні моменти часового циклу “нагрів – кінець нагріву – охолодження”. Такі часові проміжки вибрано, щоб продемонструвати загальну тенденцію процесу поширення тепла.

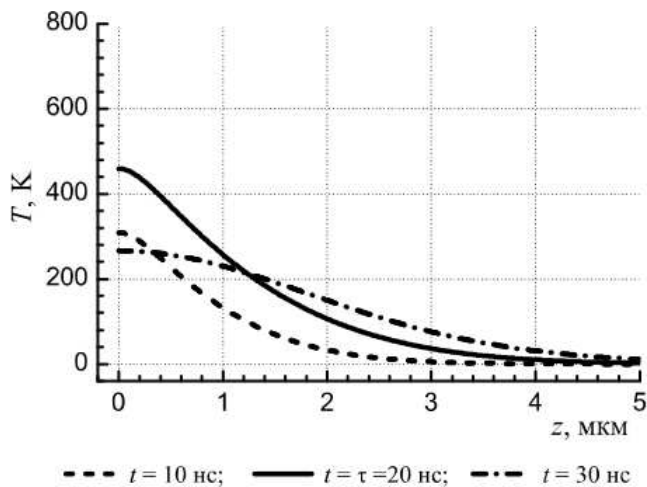


Рис. 1. Температурні профілі для однорідного зразка у різні моменти часового циклу

### 3.2. Структурно-неоднорідний зразок ( $D = D(z)$ )

Проаналізуємо температурний розподіл при опроміненні іонно-легованого зразка монокристалічного кремнію (структура  $Si_{p+p^+}$ , товщина модифікованого шару  $d_{p^+} = 0,6$  мкм). Дану структуру будемо моделювати системою, що складається з двох шарів. Коefіцієнт температуропровідності представимо у вигляді

$$D(z) = \begin{cases} D_1 = D_{p^+}, & z < d_{p^+}, \\ D_2 = D_0, & z \geq d_{p^+}, \end{cases} \quad (2)$$

де  $D_1$  та  $D_2$  – температуропровідності верхнього і нижнього (кристал підкладка Si) шару відповідно. Випадку, що розглядається, відповідають криві температурних профілів, зображені на рис. 2, а як результат чисельного розрахунку рівняння (1) методом кінцевих елементів. Як видно з рис. 2, а, температурні профілі у зразку можна описати функцією вигляду  $T_2(z, t) = F(z, t, D_1, D_2, d_{p^+})$ . Дана функція в точці  $z = d_{p^+}$  має розрив похідної 1-го роду, що є наслідком моделі «різкої границі» (2), і фізично виникає внаслідок умови нерозривності потоків через межу поділу перший – другий шари ( $D_1(\partial T/\partial z)|_{z=p^++0} = D_2(\partial T/\partial z)|_{z=p^+-0}$ ). За умови  $D_1 = D_2$  форма даної кривої переходить у форму кривої, що відповідає однорідному зразку (розділ 3.1).

Наявність такого розриву може мати непередбачувані наслідки у випадку, якщо потрібно проводити подальші розрахунки (наприклад, при використанні перетворення Лапласа для розрахунку ФА сигналу виникають «граничні частоти»). Цей розрив можна

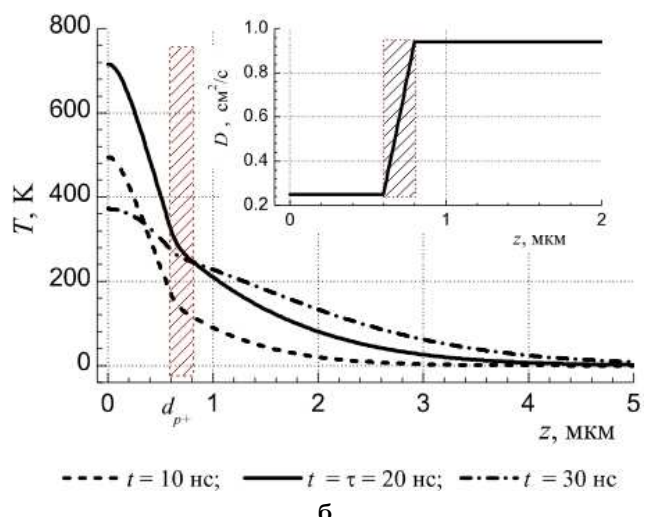
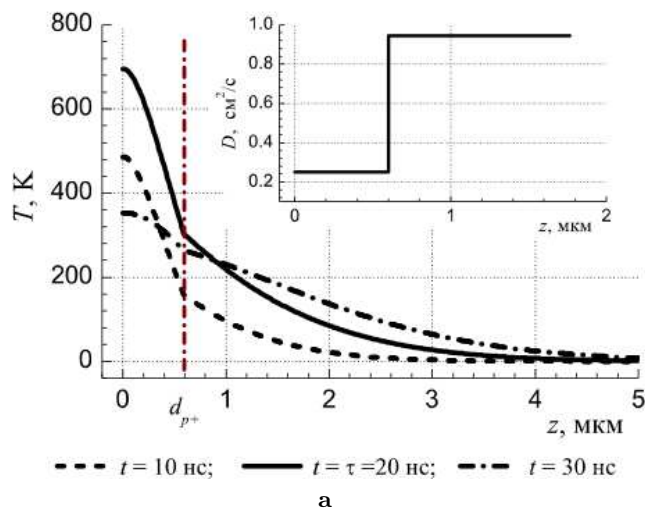


Рис. 2. Температурні профілі для двошарової структури  $Si_{p+p^+}$  у різні моменти часового циклу; на вставці – модельна залежність  $D(z)$ (а); температурні профілі для двошарової структури  $Si_{p+p^+}$  у моделі “перехідного шару” в різні моменти часового циклу; на вставці: модельна залежність  $D(z)$  (б)

усунути, використавши замість моделі «різкої границі» модель “перехідного шару” [6], в якому температуропровідність змінюється не стрибком, а наприклад, за лінійним законом –  $D(z) = a + bz$  (див. рис. 2, б, вставка). Тут  $a$  і  $b$  сталі, які знаходяться з умов нерозривності функції  $D(z)$ :

$$\begin{aligned} D|_{z=p^++0} &= D_{p^+}, \\ D|_{z=p^++l-0} &= D_0, \end{aligned}$$

$l$  – товщина переходу. На рис. 2, б наведено криві температурного розподілу для модельної структури з “перехідним шаром”. Як видно, у даному випадку розрив усувається.

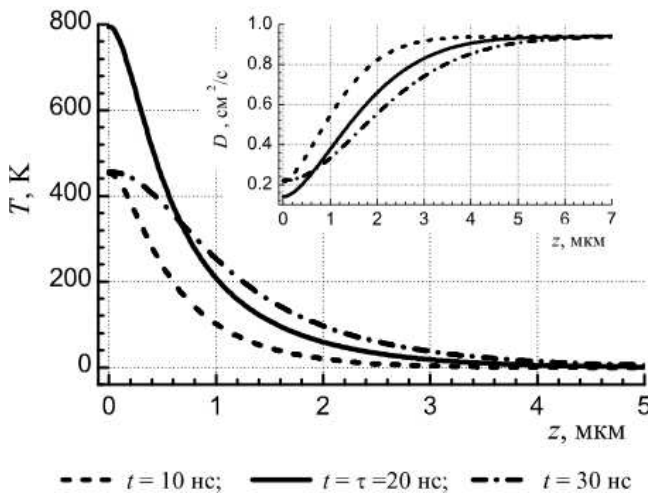


Рис. 3. Температурні профілі у випадку  $D = D(T)$  (фізична нелінійності); на вставці – модельна залежність температуропровідності  $D(T(z, t))$  в різні моменти часового циклу

В цілому, порівнюючи результати розділів 3.1 та 3.2, видно, що наявність модифікованого шару (структурної неоднорідності) приводить до зменшення області локалізації теплової енергії у приповерхнево шарі зразка.

#### 4. Випадок температурозалежного коефіцієнта температуропровідності

##### 4.1. Однорідний зразок ( $D = D(T)$ )

У даному випадку ситуація принципово ускладнюється, оскільки коефіцієнт температуропровідності починає залежати від температури. Для знаходження температурних профілів використаємо аналогічно [7] модифікований метод сіток.

Зважаючи на те, що в Si високої чистоти теплопровідність носить фононний характер, та використавши експериментальні дані [5], отримаємо явну залежність коефіцієнта температуропровідності від температури  $D(T) = D_0/(1 + aT)$ .

На рис. 3 наведено результати розрахунку температурних профілів в однорідному зразку випадку температурозалежного коефіцієнта температуропровідності.

Порівнюючи результати розділів 3.1 та 4.1, видно, що наявність фізичної нелінійності ( $D = D(T)$ ) також приводить до зменшення області локалізації теплової енергії у приповерхнево шарі зразка.

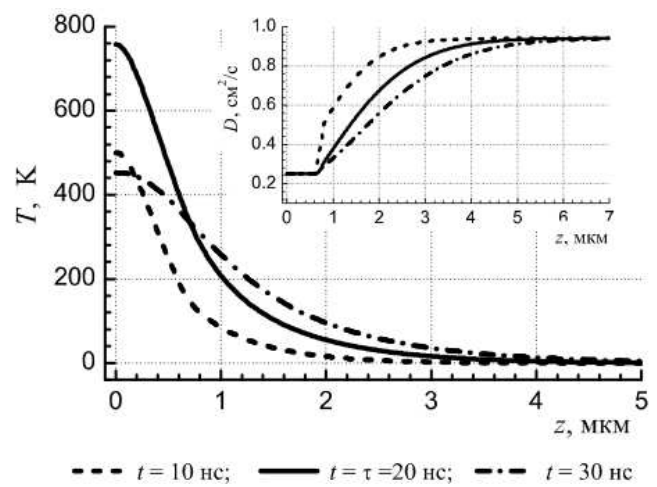


Рис. 4. Температурні профілі для двошарової структури  $Si_{p+p+}$ ; на вставці – модельна залежність коефіцієнта температуропровідності  $D(z, T(z, t))$  в різні моменти часового циклу

##### 4.2. Структурно-неоднорідний зразок ( $D = D(T, z)$ )

Розглянемо двошарову структуру  $Si_{p+p+}$  (товщина  $d_{p+} = 0,6$  мкм). Зважаючи на те, що процес розсіяння фононів на дефектах (при вказаних у розділі 2 концентраціях домішок) домінує над розсіянням на фонах, будемо вважати, що верхній шар має сталий коефіцієнт температуропровідності. Температуропровідність нижнього шару наведемо у вигляді  $D(T) = D_0/(1 + aT)$ . Підкреслимо, що і в цьому випадку (як і розділі 3.2) крива температурного профілю буде мати розрив першої похідної, що зумовлений різницею у величині коефіцієнтів температуропровідності першого і другого шарів, але він дещо нівелюється внаслідок спадної залежності коефіцієнта температуропровідності від температури. У деяких випадках (наприклад, при  $t \ll \tau$  і  $t \gg \tau$ ) цей розрив може стати суттєвим, і тому для його згладження використаємо, як і в розділі 3.2, модель «перехідного шару» з  $D(T, z) = a(T) + b(T)z$ . Тут  $a(T)$  і  $b(T)$  – функції від температури, які знаходяться з умов нерозривності функції  $D(z)$ :

$$\begin{aligned} D|_{z=p^++0} &= D_{p^+}, \\ D|_{z=p^++l-0} &= D(T). \end{aligned}$$

Схема для розрахунку температурних профілів у цьому розділі принципово не відрізняється від схеми, описаної в 4.1. На рис. 4 наведено розрахункові криві, що відповідають температурним розподілам з наявним таким «перехідним» шаром.

Порівнюючи результати розділу 4 (температурозалежний випадок), звернемо увагу на те, що наявність шарів у зразку (просторова неоднорідність р. 4.2) не приводить до суттєвих відмінностей у кривих температурних профілів на відміну від результатів розділу 3 (температурнезалежний випадок), де наявність неоднорідності  $D = D(z)$  суттєво впливає на форму температурного профілю.

Звернемо також увагу на те, що кількість поглинутої світлової енергії лазерного імпульсу у всіх випадках однакова, тому згідно із законом збереження енергії зменшення області локалізації тепла у процесі енергоперетворення *світло-тепло* та в подальшому дифузії теплового потоку в матеріалі приводить до зростання температури у приповерхневому шарі зразка.

## 5. Висновки

У роботі розглянуто процес формування температурних профілів у просторово неоднорідних структурах на основі Si при їх опроміненні коротким лазерним імпульсом. Для аналізу розв'язків нелінійного рівняння теплопровідності було застосовано модифікований сітковий метод. Це дало можливість знайти наближений розв'язок для систем, що мають шарувату структуру з довільним значенням величини співвідношення між тепловими параметрами шарів та величинами їх товщини.

Показана відмінність у процесах формування температурних профілів у випадках температурнезалежного і температурозалежного коефіцієнтів температуропровідності в легованих структурах на основі Si.

1. *Progress in Photothermal and Photoacoustic Science and Technology: Vol. 4, Semiconductors and Electronic Materials*, Eds. A. Mandelis, P. Hess (SPIE Optical Engineering Press, Bellingham, 2000);
2. Г.Н. Логвинов, Ю.В. Дрогобицький, Luis Nino de Rivera, Ю.Г. Гуревич, ФТТ **49**, вып. 5 (2007).
3. M.D. Dramicanin, Z.D. Ristovski, V. Djokovic and S. Galovic, Appl. Phys. Lett. **73**, 321 (1998).
4. U. Zammit, M. Marinelli, F. Scudieri, and S. Martellucci, Appl. Phys. Lett. **50**, 830 (1987).

5. *Теплопроводность твердых тел*, под ред. А.С. Охотина (Енергоатомиздат, Москва, 1984).
6. Р. Маллер, Т. Кейминс, *Элементы интегральных схем* (Мир, Москва, 1989).
7. М. Исаев, А. Кузьмич, Р. Бурбело, Вісник Київського національного університету ім. Тараса Шевченка, серія: фізика, № 8-9, 58 (2008).

Одержано 08.07.2009

## ФОРМИРОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ПОЛЕЙ В ЛЕГИРОВАННЫХ СТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ Si ПРИ ЛАЗЕРНОМ ОБЛУЧЕНИИ: ИМПУЛЬСНЫЙ РЕЖИМ

Р.М. Бурбело, Н.В. Исаев, А.Г. Кузьмич

### Резюме

В работе представлены результаты анализа, которые объясняют общую тенденцию процессов распространения тепла в полупроводниковых структурах на основе Si с модифицированными свойствами приповерхностного слоя при облучении их коротким лазерным импульсом. Показано, что наличие структурной неоднородности (модифицированного слоя) и учет нелинейной зависимости коэффициента температуропроводности приводит к существенной трансформации области (ее уменьшению) локализации тепловой энергии и увеличению температуры в приповерхностном слое образца.

## EVOLUTION OF TEMPERATURE DISTRIBUTION IN IMPLANTED Si-BASED STRUCTURES: PULSE MODE OF LASER IRRADIATION

R. Burbelo, M. Isaiev, A. Kuzmich

Taras Shevchenko National University of Kyiv, Physical Faculty  
(64, Volodymyrs'ka Str., Kyiv 01601, Ukraine;  
e-mail: rmb@univ.kiev.ua)

### Summary

We present the results explaining the general tendency in peculiarities of the process of heat distribution in semiconductor structures with modified properties of the surface layer under a pulse laser irradiation. It is shown that the presence of a structural inhomogeneity (modified layer) and the influence of a nonlinear dependence of the thermal diffusivity coefficient result in both a substantial transformation of the area of localization (its decrease) of thermal energy and an increase of the surface temperature.