

单晶 Si Nd YAG 激光连续退火的数值计算

傅仁武¹, 陈朝¹, Markevich M I²

(1 厦门大学 物理系, 福建 厦门 361005; 2 白俄罗斯科学院电子学研究所, 明斯克 220841)

摘要: 应用固相外延模型来模拟单晶 Si 的连续 Nd YAG 激光退火过程, 在低功率密度连续激光退火下, 用准静态模型模拟辐照区向非辐照区的径向传导散热。在数值计算中, 应用部分线性法处理非线性非齐次热传导方程, 得到相应的隐格式差分方程, 再用追赶法求解隐格式差分方程, 得出绝热边界条件下的温度的时间和空间分布, 从而得出激光退火的再结晶厚度。当激光波长 $\lambda = 1.06 \mu\text{m}$, 功率密度 $i_0 = 700 \text{ W/cm}^2$, 预热温度 $T_0 = 523 \text{ K}$ 时, 经过 0.7 秒, 表面温度升到 1290K 左右, 再结晶厚度约为 0.5 μm 。

关键词: 单晶 Si; 激光退火; 固相外延; 准静态模型; 隐格式差分方程

中图分类号: O472.3 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-7032(2000)04-0320-04

1 引 言

离子注入技术广泛应用于器件制造工艺, 但它引入了位错、层错和各种点缺陷。激光是一种很好的退火手段, 可以方便地控制激光能量的大小及光斑大小, 得到适当的温度的时间和空间分布, 进而得到合适的再结晶厚度。这样就可消除各种缺陷, 并使注入杂质激活。激光退火的应用已不仅限于此, 如在非晶材料上生长晶状半导体材料, 将化学气相沉积形成的小粒多晶生长成大粒多晶, 在硅片上形成金属硅化物。这些技术为大规模集成电路的制造提供了新方法。但是激光退火的理论复杂, 工艺条件难掌握。

早期的理论模型不考虑径向传导散热, 通常采用的数值解法要求满足 $K \cdot t / C \cdot (z)^2 < 0.5$ 的解稳定性条件。这对于脉冲激光退火是合理的。但对于连续激光退火, 由于总的退火时间在 ms 数量级以上, 如果采用这种模型, 则需要的计算量很大。且长时间的退火, 径向传导散热已不可忽略。

本文采用固相外延模型, 并对径向传导散热做了准静态近似。在数值计算上采用部分线性法对非线性非齐次热传导方程做了近似, 得到隐格式差分方程。选择绝热边界条件, 求解该方程得到温度的时间和空间分布。

2 连续激光退火的理论模型

当连续 Nd YAG 激光辐照样品时, 样品中价

带电子吸收 1.06 μm 的光子能, 电子跃迁到导带, 在这个过程中有声子参与, 然后通过硬碰撞使样品温度升高。热量在样品中的传导遵守热传导方程:

$$c \cdot (T/t) = Q_{in} - Q_{out} - F$$

其中: c 和 ρ 分别为样品的比热和密度, T 为样品中的温度分布, Q_{in} 和 Q_{out} 分别是样品吸收和耗散的功率密度。热流矢量 F 为:

$$F = -K \cdot \nabla T + c \cdot T \cdot u$$

式中的 K 为样品的热传导率, u 为样品移动的速度。本文 u 为 0。

硅的热传导率 K 强烈地依赖于温度 $K = K(T)$, 当温度 T 从室温上升到 1700K 时, 其近似解析表达式为^[1]:

$$K(T) = A / (T - T_K)$$

式中: $A = 305.7 \text{ W/cm}$, $T_K = 105.4 \text{ K}$ 。

硅的比热 c (单位 $\text{J} \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$) 是温度的函数, 当温度从 400K 上升到 1200K 时, 其近似解析表达式为^[2]:

$$c(T) = 0.6835 + 2.159 \cdot 10^{-4} T$$

热源项 Q_{in} 是激光功率密度 p 、反射率 r 、入射深度 d 和吸收系数 α 的函数, 其中 α 随温度的变化而变化。本文采用的是 1.06 μm 的激光, 其能量接近硅的禁带宽, 故样品的主要吸收机理是声子辅助跃迁, 其经典公式为:

$$= B(h - E_g + E_p)^2 / [\exp(E_p/kT) - 1]$$

其中 B 为常数, E_g 为样品禁带宽度, E_p 为声

子能量, 为被吸收的光波频率。

但实验发现, 与各参量间的关系更复杂, 实验数据与理论结果有偏差。故本文采用实验数据拟合的方法得到 的经验公式^[3]:

$$= 280\ 145 - 1\ 674\ T + 2\ 882\ T^2$$

其中, 的单位为 cm^{-1} , T 的单位为 K 。

为了使问题简化, 通常考虑一维情况。当激光束直径 $2a$ 样品厚度 d 时, 并且激光光斑能量均匀分布, 热传导方程可简化为:

$$c (T/ t) - K (^2T/ z^2) = Q_{in} - Q_{out} \quad (1)$$

这是一个非线性非齐次偏微分方程, 一般不存在解析解。

采用数值计算方法发现, 在空间层次中, Q_{out} 是径向传导散热项。在离激光束中心几毫米的范围内假设温度平衡分布的时间估计在微秒的数量级。这样假定数值计算的每个数量级为毫米的时间步长内, 激光辐照区通过热传导在其周围建立了一个稳定的温度分布。由此物理模型可估算出径向传导散热。这就是准静态模型。具体如下:

以样品厚度方向为 z 轴, 以样品表面方向为 r 轴, 以激光束中心为原点, 建立柱坐标系。

则在 $a < r < b$, $0 < z < d$ 的中空圆柱里, 温度分布满足 Laplace 方程:

$$^2T = 0 \quad (2)$$

边界条件: $\frac{T}{z} \Big|_{z=0, d} = 0; T(a, z) = f(z) = T_1;$

$T(b, z) = T_0$

解方程(2) 得:

$$T(r, z) = \frac{T_0 \ln(r/a) + T_1 \ln(b/r)}{\ln(b/a)} \quad (3)$$

$$\frac{dT}{dr} \Big|_{r=a} = \frac{T_0 - T_1}{a \ln(b/a)} \quad (4)$$

从 S. C. Tsou 等发表的数据^[4] 可估计出 $b/a = 1.6$ 。则单位底面积的圆柱, 侧面单位长度散热

速度为: $Q_{out} = -2\sqrt{\left[K \frac{dT}{dr} \right]_{r=a}}$

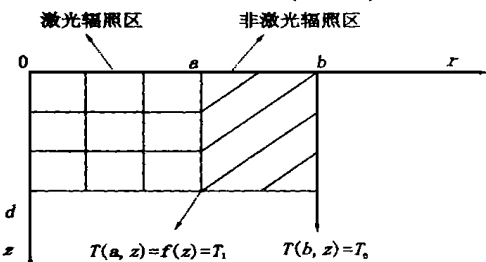


图 1 准静态模型示意图

Fig. 1 Schematic of quasi-static model.

3 理论计算方法

在 $z-t$ 平面上取差分网格, 设 z, t , 分别为自变量 z, t 的改变量,

$$Z_k = k z \quad k = 0, 1, \dots, m + 1;$$

$$t_j = j t \quad j = 0, 1, \dots$$

差分格式在时间坐标上取向后差商, 在空间坐标上取中心差商, 即:

$$(\ tT)_{kj} = (T_{kj} - T_{k, j-1})/ t \quad (5\ 1)$$

$$(\ z2T)_{kj} = (T_{k+1, j} - 2T_{kj} + T_{k-1, j})/(z)^2 \quad (5\ 2)$$

部分线性化法假设在每个空间层次上 k 可视 为常量, 从而提出偏微分号。在差分网格结点 (k, j) 上, (1) 式可写成差分形式:

$$c (\ tT)_{kj} - k(T_{k, j-1})(\ z2T)_{kj} = (Q_{in})_{k, j-1} - (Q_{out})_{k, j-1} \quad (6)$$

$$\text{令 } p_{kj} = k(T_{kj}) t/c (\ z)^2 \quad (7)$$

把(5 1), (5 2), (7) 式代入(6) 式整理之, 可 得:

$$(1 + 2p_{k, j-1}) T_{kj} - p_{k, j-1} T_{k-1, j} - p_{k, j-1} T_{k+1, j} = T_{k, j-1} + t/(c) [(Q_{in})_{k, j-1} - (Q_{out})_{k, j-1}] \quad (8)$$

当取绝热边界条件时, $(T/ z) |_{z=0, 1} = 0$
 (9 1)

相应的差分近似为: $T_{0, j} = T_{1, j}$
 $T_{m, j} = T_{m+1, j}$
 (9 2)

当取恒温边界条件时: $T_{m+1, j} = T_0$
 (9 3)

初始条件为: $T_{k, 0} = T_0$
 (9 4)

(8) ~ (9 4) 组成了非线性热传导方程的完 整的差分方程组, 可用之直接求出 $T(z, t)$ 。

T 时刻样品的再结晶厚度 为^[7]:

$$t = \int_0^t \exp[- (E_a/K_B/T(t))] dt$$

其中: K_B 为玻耳兹曼常数, E_a 为激活能, 对 单晶纯硅沿 100 方向 $E_a = 2.35\text{eV}$, $\nu_0 = 3.2 \times 10^{13}\text{nm/sec}$ 。

4 计算机语言工具及计算结果图示

本文应用 C 语言编制程序, 在 VC 上编译运行。并应用 ORIGIN6.0 对运算结果作图。

基本参数: Si 片厚度 $d = 300\ \mu\text{m}$, 红外反射率 R 取 0.35, 空间分辨率 $\Delta z = 0.1\ \text{m}$, 时间步长 $\Delta t = 10^{-2}\text{sec}$, 预热温度 $T_0 = 523\text{K}$, 激光束直径 r_a

= 0 1cm.

图 2 和图 3 是在激光功率密度 $700\text{W}/\text{cm}^2$ 情况下得到的。从图可以看出, 温度先是随时间陡峭上升, 而后变缓, 最后可认为达到平衡; 表面与体内温差很小, 满足绝热近似。图 3 说明, 再结晶是在一定时间后, 温度达到某个值时才开始的。这时可认为达到了激活能。

图 4 说明, 高的激光功率密度将会使样品结

晶早, 结晶速度快。激光功率密度和退火时间对再结晶的影响是明显的。因而, 应恰当选择激光功率密度和退火时间, 以得到合适的再结晶厚度。图 5 是对 Si 的 $1.06\ \mu\text{m}$ 光吸收系数的实验数据进行拟合并外推得到的, 图中, 光吸收系数随温度单调上升, 并且斜率增大, 这与禁带宽度随温度升高而降低有关。

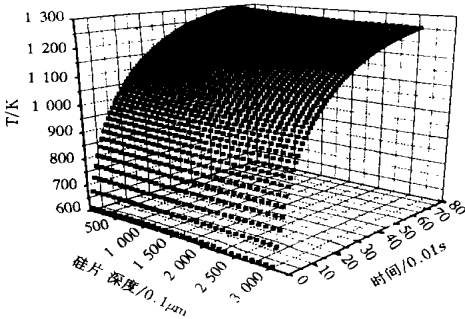


图 2 退火温度的时间空间分布

Fig. 2 Distribution of annealing temperature at time and space.

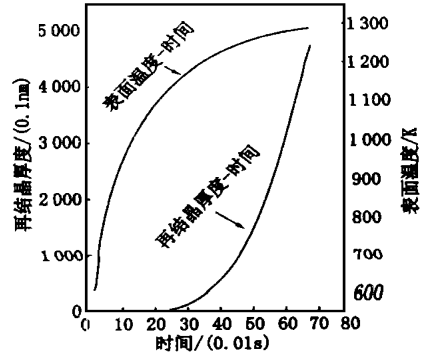


图 3 再结晶厚度、表面温度与时间的关系

Fig. 3 Dependence of recrystallization thickness and surface temperature on time.

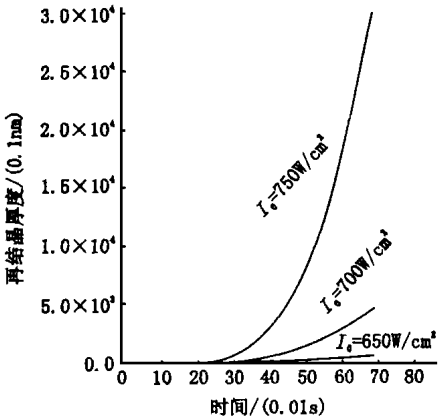


图 4 不同激光功率密度下再结晶度与时间的关系

Fig. 4 Relationship between recrystallization thickness and time under different laser power density.

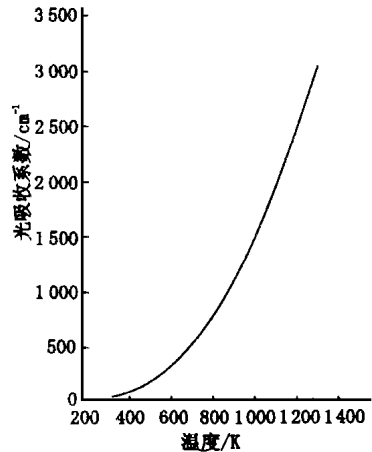


图 5 光吸收系数与温度的关系

Fig. 5 Relationship between absorption coefficient and temperature.

5 讨 论

1 连续激光退火基本上不改变已有杂质的分布, 也不会表面出现不规则的状况。而脉冲激光退火的显著优点在于溶解热力学的非平衡特性, 提供了比热退火更广泛的掺杂浓度。

2 采用固相外延模型, 在激光功率密度低、

退火温度低于熔点的条件是合理的。

3 在得到温度的时间、空间分布的基础上, 除了计算再结晶厚度外, 还可用于激光诱导杂质的时间、空间分布计算。

4 本文的程序稍做修改, 即可适用于脉冲激光退火的数值模拟。

参 考 文 献:

- [1] Glassbrenner C J, Glen A Slack. Thermal conductivity of silicon and germanium from 3K to the melting point [J]. *Phys. Rev.*, V134, 4A: 1058.
- [2] Shanks H R, Maycock P D, Sidles P H, Danielson G C. Thermal conductivity of silicon from 300 to 1400K [J]. *Phys. Rev.*, 1963, **130**(5): 1743-1748.
- [3] Siregar M R T, Von Allmen M, L thy, Helv W, *et al.* Dynamics of CO₂ laser heating in the processing of silicon [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1980, **36**(10): 787-791.
- [4] Tsou S C, *et al.* Front and back surface cw CO₂-laser annealing of arsenic ion-implanted silicon [J]. *Appl. Phys.*, 1980, **23**: 163-168.
- [5] Gold R B, *et al.* Calculation of solid-phase reaction rates induced by a scanning cw laser [J]. *J. Appl. Phys.*, 1980, **51**(2): 1256-1260.

Numerical Calculation of Continuous Nd YAG Laser Annealing of Monocrystalline Silicon

FU Ren-wu¹, CHEN Chao¹, Markevich M I²

(1. *Physics Dept. of Xiamen University, Xiamen 361005, China;*

2. *Inst. of Electronics, Belarus. Acad. of Sci., Minsic 220841, Belarussia)*

Abstract: The semiconductor solid phase epitaxial model of continuous laser annealing is used to simulate the laser annealing process of monocrystalline silicon at the continuous Nd YAG laser. Specially, at lower power density of laser, quasi-static model is used to simulate the radial heat dissipation from irradiated region to nonirradiated regions. A partial linear method is used to deal with non-homogeneous nonlinear equation of heat conduction. Then a hidden-form differential equation is gotten. Using the program of chasing method to solve the equation, the distribution of temperature($T(z, t)$) at time and space can be worked out accurately at the condition of adiabatic boundary. Furthermore, the thickness of recrystallization of laser annealing is gotten. At laser wave $\lambda = 1.06 \mu\text{m}$, the power density of laser $I_0 = 700\text{W}/\text{cm}^2$ and the preheated temperature $T_0 = 523\text{K}$, the result is that the temperature of surface reaches to about 1290K and the thickness of recrystallization is about 0.5 μm after 0.7sec.

Key words: monocrystalline silicon; laser annealing; solid phase epitaxy; quasi-static model; hidden-form differential equation