

文章编号: 1001-3806(2007)06-0624-03

超短脉冲激光烧蚀半导体表面的热效应分析

黎小鹿¹, 李俊¹, 陶向阳^{1,2*}

(1. 江西师范大学 物理与通信电子学院, 南昌 330022; 2. 江西光电子与通信重点实验室, 南昌 330022)

摘要: 为了研究超短激光辐照下半导体表面的热效应, 采用有限差分法对双温方程进行了数值模拟, 研究了飞秒、皮秒激光作用下, 半导体表面载流子和晶格的温度分布情况。结果表明, 载流子与晶格的温度耦合时间和金属耦合时间大致相同, 激光功率密度是影响载流子温升的主要因素, 超短脉冲激光入射时能量主要被半导体表层载流子吸收, 所得结论与实验结果较吻合。

关键词: 激光物理; 飞秒激光; 有限差分法; 半导体; 双温方程

中图分类号: TN241 **文献标识码:** A

The thermal analysis of ultrashort laser pulse ablation on semiconductor surface

L I X i a o - l u , L I J u n , T A O X i a n g - y a n g

(1. College of Physics and Communication Electronics, Jiangxi Normal University, Nanchang 330022, China; 2. Key laboratory of photoelectric & communication of Jiangxi, Nanchang 330022, China)

Abstract: To describe ultrashort laser ablation on semiconductor surface, numerical simulation of the double-temperature equation is performed by finite-difference method. The temperature fields of femtosecond, picosecond pulses laser ablation on semiconductor are showed. The results indicate that metal and semiconductor have the same time of the couple with carrier temperature and lattice temperature. Laser pulse power density is the main factors affecting temperature of carrier, the simulation results are accorded with the experiment reported by others.

Key words: laser physics; femtosecond-laser; finite difference method; semiconductor; double-temperature equation

引 言

随着激光技术的进步, 激光与物质的相互作用的研究受到广泛的重视, 20 世纪 90 年代初, 高质量的掺钛蓝宝石研制成功后, 飞秒脉冲激光器的发展和应用十分引人注目^[1~3]。飞秒激光与物质作用时, 激光能量传递到材料在飞秒时间内完成, 导致材料辐照区域温度迅速升高, 能量来不及扩散仅在表面很薄的一层材料达到很高的温度, 实现烧蚀^[2]。飞秒超短脉冲激光与以往的长脉冲激光与物质相互作用相比, 优势主要体现在极短的脉冲持续时间使得在激光与物质相互作用期间基本上不需要考虑流体动力学过程的影响。激光能量直接沉积在材料的趋肤层内, 使能量的吸收更为集中, 大大地降低了材料的烧蚀阈值, 另外, 作用时间的缩短, 也使因热传导作用而影响的热效应体积减小了很多。当激光能流密度被调整到等于或刚超过材料烧蚀阈值时, 材料中的热影响区实际上比聚焦区

更小, 这极大地提高了加工领域的加工精度, 同时也实现了真正意义上的“冷”加工^[3]。目前, 许多学者对飞秒激光作用于金属、透明介质及绝缘体材料等进行了大量研究^[4~9], 半导体在光电子器件领域都有着广泛的应用, 研究飞秒激光与半导体的相互作用具有很重要的应用价值。作者在考虑了飞秒激光作用于半导体的物理机理的基础上, 从双温方程出发, 采用有限差分法研究了飞秒激光作用于半导体表面的热效应。

1 模型建立

飞秒激光与半导体相互作用的物理过程如图 1 所

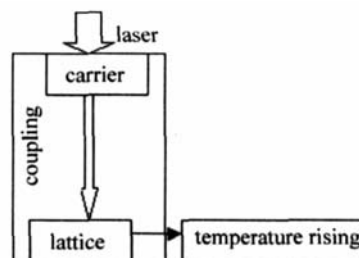


Fig 1 Ultrashort laser interaction with the physical process of the semiconductor

示, 超短脉冲激光辐照到半导体表面, 在极短的时间内载流子通过本征吸收和多光子吸收, 产生大量的载流

作者简介: 黎小鹿 (1983-), 男, 硕士研究生, 主要从事激光与物质的相互作用的研究。

* 通讯联系人。E-mail: x y tao@163.com

收稿日期: 2006-09-30; 收到修改稿日期: 2006-12-25

子,同时载流子吸收入射激光能量使其温度升高。通过载流子与晶格的耦合作用,载流子的热能传给周围晶格,使晶格温度升高。在这个过程中,由于载流子密度在较短的时间达到一定数值,可近似认为载流子达到平衡是瞬时完成的,且在脉冲激光结束到载流子与晶格完成耦合的时间内,载流子浓度变化不大,近似认为为一常量。

超短激光与半导体作用的双温模型为^[10]:

$$\frac{\partial C_e T_e}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa_e \frac{\partial T_e}{\partial x} \right) - \gamma (T_e - T_l) + S \quad (1)$$

$$\frac{\partial (C_l T_l)}{\partial t} = \gamma (T_e - T_l) \quad (2)$$

式中, x 是垂直于靶材表面方向, T_e, T_l 分别为载流子和晶格温度, $C_e = 3N K_B$ 和 $C_l = \rho c_p$ 分别代表载流子和晶格的热容, K_B 为 Boltzmann 常数, κ_e 为半导体的热导率, γ 为载流子与晶格的耦合系数,且 $\gamma = \frac{3N K_B}{\tau_e}$, τ_e 为载流子与晶格的相互作用时间常数, S 是激光热源项, $S = I_0 (1 - R) \alpha \exp(-\alpha x)$, I_0 为入射激光光强, R 为表面反射率, α 为吸收系数。

用有限差分法结合初始条件和边界条件对双温方程数值求解,其差分格式如图 2 所示,其中, $\Delta x, \Delta t$ 为

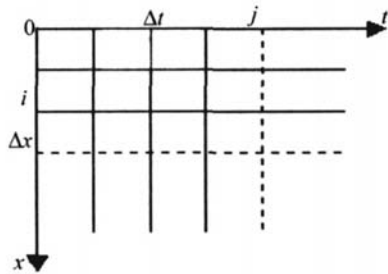


Fig 2 Chart of one dimension finite difference method

空间步长和时间步长, i 和 j 分别表示第 i 层和第 j 个时间,双温方程的差分格式如下:

$$C_e \frac{T_{i,j+1}^e - T_{i,j}^e}{\Delta t} = \kappa_e \frac{T_{i+1,j+1}^e - 2T_{i,j+1}^e + T_{i-1,j+1}^e}{h^2} - \gamma (T_{i,j+1}^e - T_{i,j+1}^l) + I_0 (1 - R) \alpha \exp(-\alpha i \Delta x) \quad (3)$$

$$C_l \frac{T_{i,j+1}^l - T_{i,j}^l}{\Delta t} = \gamma (T_{i,j+1}^e - T_{i,j+1}^l) \quad (4)$$

令 $r = \frac{\kappa_e \Delta t}{C_e \Delta x^2}, \beta = \frac{\gamma \Delta t}{C_e}, I' = \frac{I_0 (1 - R) \alpha \Delta t}{C_e}$, 将上式整理后得:

$$-r T_{i-1,j+1}^e + (1 + 2r + \beta) T_{i,j+1}^e - r T_{i+1,j+1}^e = T_{i,j}^e + \beta T_{i,j+1}^l + I' \exp(-\alpha i \Delta x) \quad (5)$$

$$T_{i,j+1}^l = \frac{C_l}{C_l + \gamma \cdot \Delta t} \left(T_{i,j}^l + \frac{\gamma \cdot \Delta t}{C_l} T_{i,j+1}^e \right) \quad (6)$$

初始条件:

$$T_{i,0} = 300K, (i = 1, 2, 3, \dots, N) \quad (7)$$

$$T_{N,j} = 300K, (j = 0, 1, 2, \dots, t/\Delta t) \quad (8)$$

式中, $N = L/\Delta x, L$ 为半导体材料的厚度, t 为总过程经历的时间, (5) 式左边系数构成一个三对角矩阵,可用追赶法求解。由初始条件出发,由第 j 个时间的温度 T_i 依次求解得 $T_{i,j+1}$ 。

2 计算结果与讨论

作者以超短脉冲激光辐照下半导体 Si 表面为例进行了数值分析。入射激光波长设为 $\lambda = 800nm$ 。半导体 Si 表面的载流子密度近似为 $1.0 \times 10^{21} cm^{-3}$,其它参数如表 1 所示^[11~13]。

Table 1 Physical parameters of Si

$c_p / (J \cdot cm^{-3} \cdot K^{-1})$	$\rho / (g \cdot cm^{-3})$	τ_e / ps	$\kappa_e / (W \cdot cm^{-1} \cdot K^{-1})$	R	α / cm^{-1}
0.88	2.328	1	1.35	0.32	5.02×10^3

图 3 中给出了在相同的激光能量 ($E = 0.05J/cm^2$) 时,不同脉冲宽度 ($t = 10fs, 100fs$) 的飞秒激光对半导体

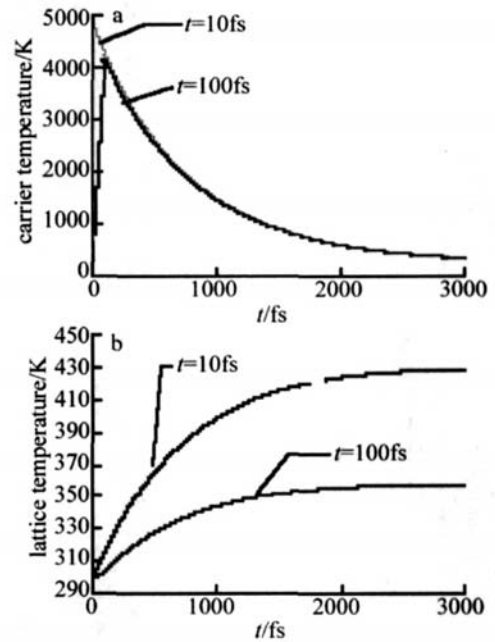


Fig 3 a—relations of surface carrier temperature with time b—the surface lattice temperature with time

表面温度的影响。从中可以发现,载流子与晶格耦合时间基本相同,为 $1ps \sim 3ps$,与文献 [14] 中采用双温方程模拟的金属中电子和晶格耦合时间大致相同。由图 3 可以看出,在激光能量相同时,脉冲宽度的激光对载流子和晶格耦合时间产生影响,脉宽短的激光功率密度大,引起的载流子温升大,晶格温度也相应增加。

图 4 中给出了脉宽为 $1ps$ 和 $5ps$ 时表层载流子的温度随时间的变化关系。对于皮秒脉冲激光,载流子与晶格的耦合时间比飞秒激光要长。飞秒脉冲过后约 $3ps$ 内,载流子和晶格温度达到平衡,而对于皮秒激光

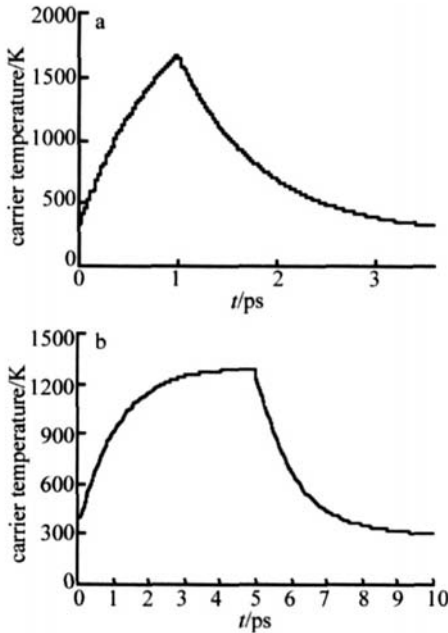


Fig 4 Relations of surface carrier temperature with time

a— $t=1\text{ps}$ b— $t=5\text{ps}$

脉冲过后约大于 3ps ,载流子和晶格温度才达到平衡。且在相同的激光能量时,皮秒激光引起的表层的载流子和晶格的温升小于飞秒激光作用引起表层的载流子和晶格温升。

图 5中给出了飞秒脉冲激光结束时,激光脉冲入射方向半导体材料内部载流子温度的分布曲线,发现载流子温升主要发生在微米量级以内,与吸收量级相

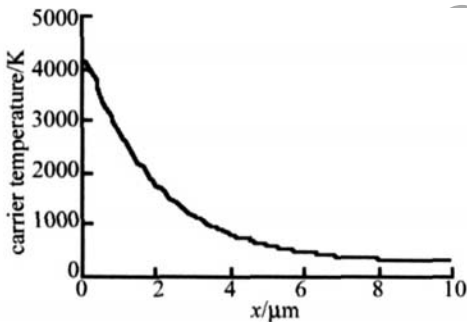


Fig 5 Carrier temperature distributes under the surface in laser incidence forward at the end of pulse ($t=100\text{fs}$)

当,其它区域载流子温升变化不大,即飞秒脉冲激光入射时能量主要被半导体表层载流子吸收。

图 6为在激光能量密度 $E=1.2\text{J}/\text{cm}^2$,波长 $\lambda=800\text{nm}$,脉宽分别为 10fs , 60fs , 1ps 的超短脉冲激光作用时,半导体 Si表面晶格的最高温度随激光能量密度的变化关系。随着激光能量密度的增加,半导体晶格表面最大温度趋于线性增加,在相同的能量密度,随着脉宽的缩短,半导体 Si的表面最大温度而增大。图 7为半导体的破坏阈值与脉冲宽度的关系,从中可得到,随着脉宽的缩短,半导体发生破坏需要的能量减小,与文献 [13]中的实验结论相符。且当激光能量密度 $E=$

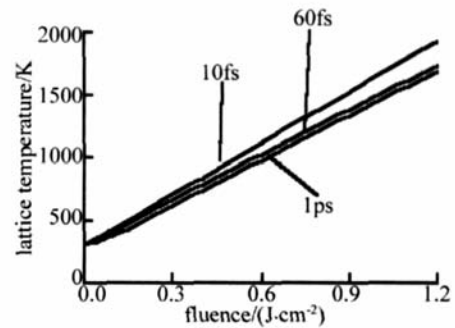


Fig 6 Relation of lattice maximal temperature (MAX) with fluence ($E=1.2\text{J}/\text{cm}^2$)

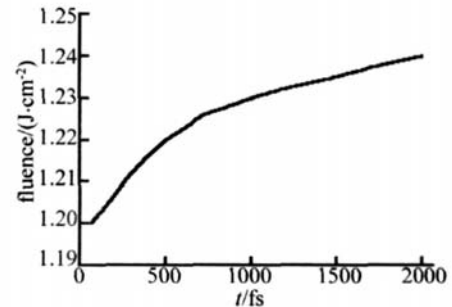


Fig 7 Curves of the fluence with different threshold duration time

$1.2\text{J}/\text{cm}^2$,脉宽为 60fs 时,半导体 Si温度达到熔点 (1693K),此时半导体 Si受到破坏,与文献 [13]中的实验结论基本吻合。

3 结论

采用有限差分法数值模拟了飞秒、皮秒脉冲激光辐照下半导体表面的热效应。研究表明,载流子与晶格的温度耦合时间和金属耦合时间大致相同,且得出了皮秒脉冲 (大于 3ps)激光作用于半导体时,载流子与晶格的耦合时间比飞秒脉冲激光 ($2\text{ps}\sim 3\text{ps}$)长,脉冲激光入射时能量主要被半导体表层载流子吸收。在超短脉冲激光作用下,半导体的载流子和晶格温升大小主要取决于入射激光的参数,这些结果为半导体进行微加工,热处理,光电器件破坏等方面提供参考。

参考文献

- [1] LI Ch D, WANG D L, LUO L *et al* Feasibility of femtosecond laser writing multi-layered bit planes in fused silica for three-dimensional optical data storage [J]. Chinese Physics Letters, 2001, 18 (4): 541 ~ 543.
- [2] NIX Ch, WANG Q Y. Finite difference method for thermal analysis of femtosecond-picosecond pulse laser ablation on metal surface [J]. Chinese Journal of Lasers, 2004, 31 (3): 277 ~ 280 (in Chinese).
- [3] OSTENDORF A. Precise structuring using femtosecond lasers [J]. The Review of Laser Engineering, 2002, 30 (5): 221 ~ 225.
- [4] M NOSH MA K, KOWALEV CZ A M, HARIL I *et al* Photonic device fabrication in glass by use of nonlinear materials processing with a femtosecond laser oscillator [J]. Opt Lett, 2001, 26 (19): 1516 ~ 1518.

(下转第 629页)

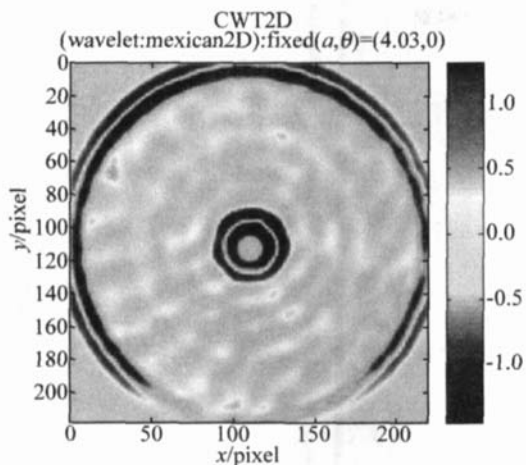


Fig 2 CWT2D of surface error after the first time measure (scale factor $a=4.03$)

2.2 试验结果

可见,针对此频段的对应区域靠近中心固定孔和边缘,即边缘效应明显。同理,可得到其它不合格频带的对应区域(从略)。当不合格频带的对应区域找出,下一步便可指导加工,最终减少或消除此频带误差,提高加工的效率。针对不同的加工方法,一般就有不同的局域消除方式,譬如通常的数控抛光,一般可通过适当选择抛光盘大小及均匀抛光的方式达到局域频带误差消除的目的,将另文讨论,这里从略。

为比较起见,这儿将同一大镜最终加工后的测量结果给出,如图 1b 所示,图 1d 为其 PSD 曲线与特征曲线的比较,可见,此时大镜是符合要求的。

3 结论

从实际的效果看,利用小波的方法能找到不合格频带的对应区域,从而为下一步提高加工效率打下基础。然而有一个问题,即如何考虑干涉仪频率响应特

性对真实误差数据的影响。因为干涉仪光学系统的复杂性,一般的方法是通过试验,即对一已知样品进行检测进而标定^[3],然而,高质量的台阶或正弦位相光栅样品难以获得,同时,它也不能对测量系统的设计和构建进行有效的指导。基于此考虑,笔者从原理上对以柯林斯公式描述的光学系统与小波之间的联系进行了一些探讨,下一步就希望针对具体的干涉仪进行讨论。

参 考 文 献

- [1] XU Q, GU Y Y, CAI L *et al* Measurement of wavefront power spectral density of large optical components [J]. *Acta Optica Sinica*, 2001, 21 (3): 344~347 (in Chinese).
- [2] YANG H F, JIANG Z F Research of Zernike modal wavefront reconstruction of 19-element Hartmann-Shack wavefront sensor [J]. *Laser Technology*, 2005, 29 (5): 484~487 (in Chinese).
- [3] LAWSON J K, WOLFE C R, MANES K R *et al* Specification of optical components using the power spectral density function [J]. *SPIE*, 1995, 2536: 38~50.
- [4] AIKENS D M, WOLFE C R, LAWSON J K The use of power spectral density (PSD) functions in specifying optics for the National Ignition Facility [J]. *SPIE*, 1995, 2536: 281~292.
- [5] AIKENS D M. The origin and evolution of the optics for the national ignition facility [J]. *SPIE*, 1995, 2536: 2~12.
- [6] REN H, ZHUO Zh Y, JIANG X D *et al* Discussion of the specific method of power spectral density [J]. *High Power Laser and Particle Beams*, 2002, 14 (2): 279~282 (in Chinese).
- [7] XU F, WEIQ Zh, WU F Analysis about evaluating method of power spectral density function [J]. *Optical Instruments*, 2000, 22 (3): 21~24 (in Chinese).
- [8] ISO 10110 - 1997, Optics and optical instrument [S].
- [9] YANG F Sh The engineering analyses and application of wavelet transform [M]. Beijing: Science Press, 1999. 1~12 (in Chinese).
- [10] The Mathworks Inc Wavelet toolbox3. 0. 1 [EB/OL]. http://www.mathworks.com/access/helpdesk/help/pdf_doc/wavelet/wavelet_ug/pdf, 2004-09-13.
- [11] The YAW Toolbox Team. Yawtb-0. 1. 0 [EB/OL]. <http://rhea.tel.e.ucl.ac.be/yawtb/pmwiki.php/Main/YAWTb>, 2002-06-15.
- [10] AN ISMOV S I, KAPEL DVICH B L, PERELMAN T L. Electron emission from metal surfaces exposed to ultra-short laser pulses [J]. *Soviet Physics-Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, 1974, 39 (2): 375~377.
- [11] SHEN Z H, LU J, NIX W. Study of the heating mechanism of a Semiconductor irradiated by picosecond and nanosecond laser pulses [J]. *Chinese Journal of Lasers*, 1999, 26 (9): 859~863 (in Chinese).
- [12] ALLMEN M V. Laser-beam interaction with materials physical principles and applications [M]. Berlin: Springer-Verlag, 1987. 201~207.
- [13] LOU F, JIANG J J, SUN C W. Variation in damage thresholds of Si photodiodes with laser pulse duration [J]. *High Power Laser and Particle Beams*, 2004, 16 (6): 685~688 (in Chinese).
- [14] ELSAYED-AL I H E, NORRIS T B, PESSOT M A *et al* Time-resolved observation of electron-phonon relaxation in copper [J]. *Phys Rev Lett*, 1987, 58 (12): 1212~1215.

(上接第 626 页)

- [5] ZHAO G, CHEN J G, ZHANG J *et al* Analytical description of the damage threshold of femtosecond pulses [J]. *Laser Technology*, 2006, 30 (1): 90~92 (in Chinese).
- [6] YOU M, ZHAO W, CHENG GH *et al* Crystallization in PTR glass induced by irradiation of femtosecond lasers [J]. *Laser Technology*, 2006, 30 (1): 41~42 (in Chinese).
- [7] LIU Zh, LIR X, YU W *et al* Heating of planar metal targets by ultra-short laser pulses [J]. *Acta Optic Sinica*, 2000, 20 (10): 1297~1304 (in Chinese).
- [8] CHNE J K, BERAUN J E, GRMES L E *et al* Modeling of femtosecond laser-induced non-equilibrium deformation in metal films [J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2002, 39 (12): 3199~3216.
- [9] CHICHKOV B N, MOMMA C, NOLTE S *et al* Femtosecond, picosecond and nanosecond laser ablation of solids [J]. *Appl Phys*, 1996, A63 (2): 109~115.