

皮秒和纳秒脉冲激光作用于半导体材料的加热机理研究*

沈中华 陆建 倪晓武

(南京理工大学应用物理系 南京 210094)

摘要 从半导体材料的吸收机制出发,分析研究了激光能量在半导体材料中的传输过程,并采用双温模型分别模拟计算了在入射激光能量相同的情况下,皮秒和纳秒激光脉冲作用于硅半导体材料的加热过程,结果表明在纳秒脉冲作用下,可以忽略载流子效应,用单纯的单温热传导方程来模拟。而在皮秒脉冲作用下,应该考虑载流子效应,采用包括晶格温度和载流子温度的双温模型来模拟硅半导体材料的加热过程。

关键词 脉冲激光-半导体材料的相互作用,双温模型,载流子效应

1 引言

激光与材料的相互作用是一个较复杂的物理过程,其温度场的分布不仅与材料的本身性质有关,而且与激光参数密切相关。在研究激光与材料的热作用过程中,基本上是通过解析法求解^[1~3]或用数值模拟热传导方程^[4~6],这对于象一般金属类的材料来说是比较合理的。但半导体材料的吸收机制比较复杂,因此其加热机理也更为复杂。

本文从半导体材料的吸收机制出发,分析研究了激光能量在半导体材料中的传输过程。在入射激光能量相同的情况下,采用双温模型分别模拟计算了皮秒和纳秒脉冲激光作用下硅半导体材料的晶格、载流子的加热过程,结果表明皮秒脉冲作用下晶格的温升明显延迟于载流子的温升,且在脉冲作用过程中晶格温度比载流子温度低几倍;而在纳秒脉冲作用下,晶格的温度与载流子的温度同步上升,且在整个作用过程中两者温度几乎相等。

2 物理模型与计算模型的建立

2.1 半导体材料的吸收机制

半导体材料中有效的吸收机制有本征吸收、激子吸收、自由载流子吸收和杂质吸收等。

本征吸收对应于价带电子吸收光子跃迁到导带,产生电子-空穴对。它的吸收系数比较大,可达 $10^5 \sim 10^6 \text{ cm}^{-1}$ 。

激子能级位于接近导带底的禁带中,它的电离能很小,在室温下,它已经电离了。实验上也

* 国家教委跨世纪人才培养计划专项基金、霍英东高校青年教师基金和江苏省自然科学基金资助课题。

收稿日期: 1998-04-13; 收到修改稿日期: 1998-06-15

只能在极低温下,才能测量激子的存在。所以在常温下激子的吸收是很弱的,可以不考虑。

自由载流子可以在宽阔的红外光谱区引起吸收,载流子吸收系数和载流子浓度成正比。在 $h\nu > E_g$ 的激光作用下,由于光激发可以产生大量的过剩载流子,因此自由载流子吸收在激光与半导体材料相互作用过程中也是主要的吸收机制。

由晶格振动的激发而引起的吸收一般比较小,只有在离子晶体或离子性比较强的化合物中才有显著的吸收作用。

杂质吸收包括中性杂质吸收和电离杂质吸收。中性杂质吸收系数与未电离杂质数目成正比,电离杂质吸收系数和电离的杂质数目成正比,一般情况下杂质浓度比较小,相应的杂质吸收系数比较小,只有在重掺杂的情况下,杂质吸收才是主要的。

根据上面几种吸收过程的特点可以将入射激光在半导体材料中的传递机制归纳为以下几种类型:

(1) 电介质型 入射激光的光子能量远小于半导体材料的禁带宽度,即 $h\nu \ll E_g$, 多光子过程和吸收是无足轻重的,在导带和价带没有自由载流子,在高激励下,光的基本吸收机理是光与晶格直接相互作用,导致高超音速的声子振荡。

(2) 金属型 半导体材料是强电导型的,入射激光的光子能量小于半导体材料的禁带宽度,即 $h\nu < E_g$, 此时多光子吸收也是无足轻重的,但导带和价带内有大量的自由载流子,吸收可能靠与自由载流子相互作用来实现,并以热能的形式传给晶格。

(3) 感应金属型 对于本征半导体材料,初始自由载流子浓度很低,入射激光的光子能量大于半导体材料的禁带宽度,即 $h\nu > E_g$, 此时初始吸收主要为本征吸收,产生大量自由载流子,随后自由载流子吸收也参与作用,与本征吸收一起成为主要的吸收机制,载流子吸收的光能同时以热能的形式传给晶格。

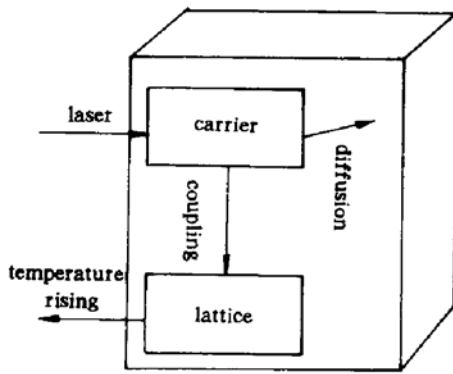


图 1 激光能量在半导体材料中的传递机制示意图

Fig. 1 Schematic figure of the laser energy transmission in a semiconductor material

因此,对于象 Si, Ge 等元素的本征半导体,当入射激光光子能量满足 $h\nu > E_g$ 条件时,其主要的传递机制是感应金属型的。图 1 就是这种感应金属型传递机制的示意图。半导体材料通过本征吸收吸收激光能量,产生大量的非平衡载流子,在本征吸收的同时,这些非平衡载流子和由于热激发产生的平衡载流子也要吸收入射激光能量,通过相互之间的弛豫碰撞交换能量。由于电子之间的碰撞时间很短(飞秒量级),在所考虑的激光脉宽范围(几十纳秒至几十皮秒量级)内我们可以合理地认为载流子达到热平衡状态是瞬时完成的。载流子在吸收入射激光能量,并向材料体内扩散的同时,通过与晶格的耦合,将能量传给晶格,使晶格温度上升,产生熔融、气化等物

理现象。

2.2 双温模型

根据上面的分析讨论,可以用包括晶格温度和载流子温度的双温模型来模拟上述过程:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{\alpha_{\text{int}} I}{E_{\text{photon}}} + \frac{\partial}{\partial x} \left(D_a \frac{\partial N}{\partial x} \right) - \frac{N}{\tau_A} \quad (1)$$

$$\frac{\partial C_e T_e}{\partial t} = E_g \frac{N}{\tau_A} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{E}{N} D_a \frac{\partial N}{\partial x} \right) - \gamma(T_e - T_i) + S(x) \tag{2}$$

$$\frac{\partial (C_i T_i)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T_i}{\partial x} \right) + \gamma(T_e - T_i) \tag{3}$$

$$\frac{dI}{dx} = (\alpha_{int} + \alpha_{FCA}) I \tag{4}$$

$$S(x) = (1 - R) \left(\frac{E_{photon} - E_g}{E_{photon}} \alpha_{int} + \alpha_{FCA} \right) I \tag{5}$$

(1) 式是载流子浓度变化方程, 式中 E_{photon} 为光子能量, D_a 为双极扩散系数, τ_A 为俄歇复合常数。(2) 式和(3) 式分别代表载流子系统和晶格系统的能量变化。式中 $S(x)$ 为源项, 即为由于对入射激光的晶格吸收和自由载流子吸收引起的电子系统的能量变化, 由(5) 式给出。 $C_e = 3NK_B$, T_e 和 $C_i = \rho C$, T_i 分别代表载流子系统单位体积的热容、温度和晶格系统的单位体积的热容、温度, γ 为载流子与晶格的耦合系数, 可以写成 $\gamma = \frac{3NK_B}{\tau_e}$, 其中 τ_e 为载流子与晶格的相互作用时间常数, k 为晶格热导率。 R 为材料表面的反射系数。 α_{int} 和 α_{FCA} 分别代表本征吸收和自由载流子吸收, 自由载流子吸收与载流子浓度有关。 K_B 为 Boltzmann 常数。

3 计算结果与讨论

本文对纳秒和皮秒脉冲激光分别作了数值模拟研究, 考虑入射激光的波长为 $1.06 \mu\text{m}$, 能量密度为 0.11 J/cm^2 , 小于硅材料的熔融阈值。脉冲波形为高斯分布, 脉宽分别为 25 ns 和 25 ps , 其激光脉冲波形如图 2 所示。材料的各参量取自文献[7, 8], 列于表 1。

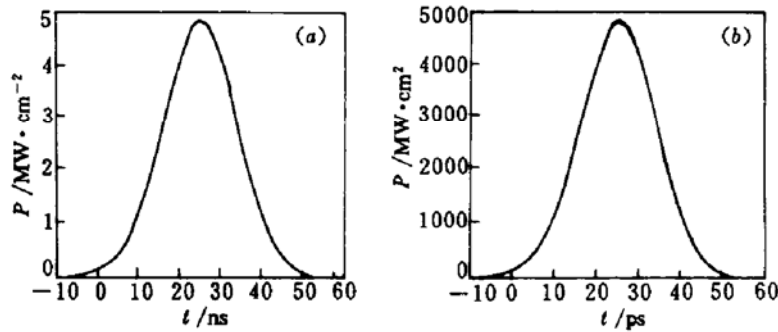


图 2 脉冲波形

(a) 纳秒脉冲; (b) 皮秒脉冲

Fig. 2 The wave form of laser pulses

(a) a nanosecond laser pulse; (b) a picosecond laser pulse

表 1 晶体硅的参量

Table 1 The parameters for crystalline silicon

$\alpha_{int} / \text{cm}^{-1}$	$D_a / \text{cm}^2/\text{s}$	τ_A / ps	τ_e / ps	$\rho / \text{g/cm}^3$	$C_p / \text{J/g} \cdot \text{K}$
500	2	6	1	2.33	0.88

图 3 (a) 和 (b) 分别为纳秒脉冲和皮秒脉冲作用下载流子浓度的变化。从图中可以看出虽

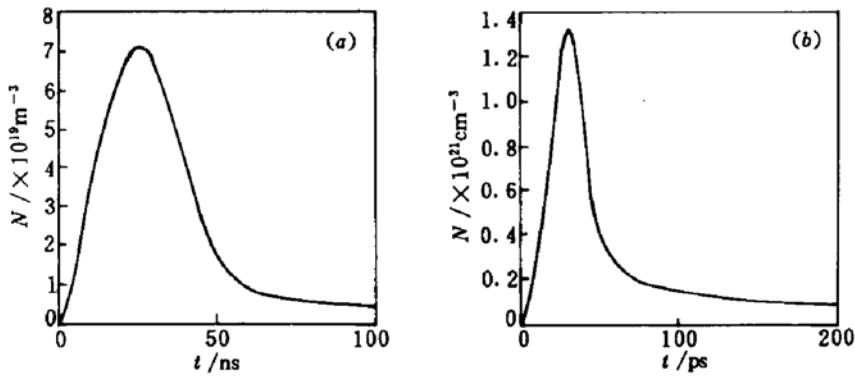


图 3 载流子浓度随时间变化曲线
(a) 纳秒脉冲; (b) 皮秒脉冲

Fig. 3 Carrier density changes vs time

(a) a nanosecond laser pulse; (b) a picosecond laser pulse

然入射激光能量密度相同,但对于纳秒激光脉冲,其载流子浓度峰值大约为 $7.2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$,而皮秒脉冲激光作用下的载流子浓度峰值达到 $1.3 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ 。一般来讲,当载流子浓度超过 10^{20} cm^{-3} 时,其效应才比较明显。因此,对于纳秒脉冲激光其载流子效应可以不考虑,但对于皮秒激光脉冲就必须考虑载流子效应。这一点从我们对硅材料表面的反射系数计算结果也可以看出来,如图 4 所示。在纳秒脉冲激光作用下,硅材料表面的反射系数基本不变化,而在皮秒脉冲激光作用下,由于高浓度载流子的吸收,材料表面的反射系数有一下降过程,这与实验结果是完全一致的^[9]。

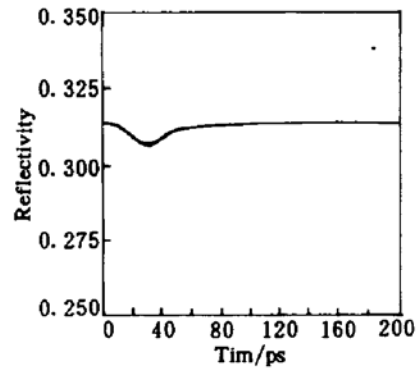


图 4 皮秒脉冲作用下反射率的变化

Fig. 4 Reflectivity vs delay time in the case of picosecond pulsed laser irradiation

图 5 是两种激光脉冲激光作用下,载流子温度和晶格温度的变化情况。纳秒脉冲作用下,晶格的温度与载流子的温度同步上升,且在整个作用过程中两者温度几乎相等;而皮秒脉冲作用下晶格的温升明显延迟于载流子的温升,且在脉冲作用过程中晶格温度比载流子温度低几倍。这是由于晶格和载流子系统的能量弛豫时间是皮秒量级的。在纳秒脉冲作用期间,载流子系统在吸收激光能量的同时,很快将能量传给晶格,使晶格温度始终保持与载流子同步上升;而对于皮秒

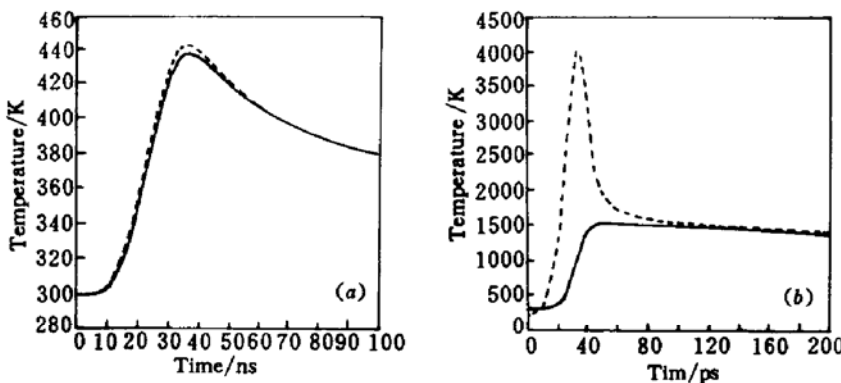


图 5 载流子温度和晶格温度随时间的变化曲线

(a) 纳秒脉冲; (b) 皮秒脉冲

Fig. 5 Carrier temperature and lattice temperature change vs time

(a) a nanosecond laser pulse; (b) a picosecond laser pulse

激光脉冲来讲,在激光作用期间,只有一小部分能量传给晶格,大部分能量储存在载流子系统中,当激光作用结束后,这部分能量才通过弛豫过程继续传递给晶格。因此,对于脉冲激光与硅等元素半导体材料的热作用过程,在皮秒脉冲作用下,应该考虑载流子效应,采用包括晶格温度和载流子温度的双温模型来模拟硅半导体材料的加热过程。而在纳秒脉冲作用下,可以忽略载流子效应,用单纯的单温热传导方程来模拟。

参 考 文 献

- 1 Li Haoping, Wang Li, Cai Qingkui. A laser heating analytical model. *Laser Technology* (激光技术), 1991, 15 (2):122~125 (in Chinese)
- 2 M. K. El-Adawi, E. F. El-Shehawey. Heating a slab induced by a time-dependent laser irradiance -An exact solution. *J. Appl. Phys.*, 1986, 60(7):2250~2255
- 3 Shen Zhonghua, Lu Jian, Ni Xiaowu. An analytical solution to the problem of laser-induced heating and melting of semiconductors. *Chinese J. Lasers* (中国激光), 1998, A25(7):632~636 (in Chinese)
- 4 Wei Zaifu, Cha Hongkui, Wang Runwen. Physical analysis of the laser-induced temperature field. *Acta Optica Sinica* (光学学报), 1994, 14(4):355~359 (in Chinese)
- 5 Tao Yingxue, Shen Rongjun, Guan Jieli *et al.*. Numerical simulation. *Chin. J. Computational Physics* (计算物理), 1996, 13(1):14~20 (in Chinese)
- 6 Zhonghua Shen, Jian Lu, Xiaowu Ni. Simulation of temperature rise in silicon irradiated by high-power laser pulse. *SPIE*, 1996, 2888:271~274
- 7 M. von Allmen. Coupling of beam energy to solids, *Laser and electron beam processing of materials*. New York: Academic Press, 1979. 6
- 8 M. von Allmen, translated by Qi Haibin *et al.*. *Laser-beam Interactions with Materials: Physical Principles and Applications*. Beijing: Science Press, 1994. 201
- 9 D. von der Linde, N. Fabricius. Observation of electronic plasma in picosecond laser annealing of silicon. *Appl. Phys. Lett.*, 1982, 41(10):991~993

Study of the Heating Mechanism of a Semiconductor Irradiated by Picosecond and Nanosecond Laser Pulses

Shen Zhonghua Lu Jian Ni Xiaowu

(Department of Applied Physics, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094)

Abstract Based on the absorption mechanism of the semiconductor, the laser energy transition process in the semiconductor has been studied and a double-temperature model has been adopted to calculate the heating process in silicon irradiated by picosecond and nanosecond laser pulses respectively with the same energy density. A conclusion can be drawn from the calculated results that the carrier effect can be neglected and the heating process can be simulated through a single thermal conduction in the case of nanosecond pulse laser irradiation while the carrier effect must be take into consideration and a double-temperature model can be adopted in the case of picosecond pulsed laser irradiation.

Key words laser-semiconductor interaction, double-temperature model, carrier effect