

# Исследование тепловых и термоупругих полей в полупроводниках при лазерной обработке.

В.И.Мажукин , В.В.Носов<sup>(1)</sup>, Ульрих Земмлер<sup>(2)</sup>

<sup>1)</sup>*Институт Математического Моделирования РАН, Россия, Москва, Миусская пл. 4а.*

<sup>2)</sup>*Общество Научно-технического и Производственного Развития, Шмалькалден, Кемnitz, Германия*

## Аннотация

Лазерная обработка полупроводников является современной альтернативой традиционным технологиям. При применении импульсного режима воздействия в мишени вследствие больших температурных градиентов возникают сильные тепловые напряжения. Температуропроводность рассматриваемых полупроводниковых материалов германия и кремния с ростом температуры значительно уменьшаются, что приводит к дополнительной концентрации тепла в зоне теплового воздействия. Рассматриваемая задача включает нелинейное уравнение теплопроводности и квазистационарную задачу термоупругости на фиксированные моменты времени. Распределения температуры и тепловые напряжения рассчитаны с помощью комбинированного конечно-разного/конечно-элементного методов. При этом конечно-разностный и конечно-элементный подходы используют различные сетки (разбиения), поэтому при стыковке методов выполняется интерполяция значений с одной сетки на другую. Расчеты показали, что при нагреве образцов вплоть до температуры плавления, максимальные термонапряжения на поверхности германия примерно на 40% превышает значения термонапряжения на поверхности кремния.

## Analysis of Temperature and Thermal Stress Fields in Laser Treated Semiconductors

Ulrich Semmler<sup>(1)</sup>, Vladimir I. Mazhukin<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup>*Society of Production Engineering and Development, Schmalkalden/Chemnitz, Germany*

<sup>(2)</sup>*Institute of Mathematical Modelling of the Russian Academy of Sciences, Miusskaja sq. 4a, Moscow, Russia*

## Abstract

Laser treatment of semiconductors is a modern alternative to conventional technology. In pulsed mode laser processing high temperature gradients leads to high compressive thermal stresses. The thermal diffusivity of the considered semiconducting materials germanium and silicon decreases considerably with temperature increase, which leads to additional heat built-up in the thermal affected zone. The considered axisymmetric thermomechanical problem consists of non-linear and non stationary heat conduction and quasi-stationary thermoelasticity at fixed times. The temperature distribution and the thermal stresses are calculated by a hybrid Finite Difference / Finite Element method. The finite-difference and finite-element meshes are not the same, and, the interpolation interface between to two methods transform the values from on mesh to another. The performed modeling have shown that at heating up the target to melting temperature, maximum thermal stresses on the surface of germanium approximately on 40 % exceeds values on the surface of silicon.

## Введение

Интенсивное применение концентрированных источников энергии (лазерный, электронный, или ионный лучи) в таких областях, как переплавка, нанесение покрытий, модификация геометрии поверхности (текстурирование) полупроводников стимулирует исследование термомеханических процессов в зоне облучения.

Особенность обработки полупроводников концентрированным источником энергии состоит в возникновении высоких по сравнению с металлами полей напряжения. Эти напряжения, с одной стороны, могут стать причиной возникновения трещин и поврежденной поверхности полупроводника. С другой стороны, контролируемое поле напряжений может применяться для получения поверхности с заданной текстурой [1].

Помимо механических явлений, большие тепловые напряжения приводят также к появлению дефектов решетки, что вызывает существенное изменение электрофизических свойств полупроводникового материала и, в частности, абnormally высокую диффузию легирующих элементов.

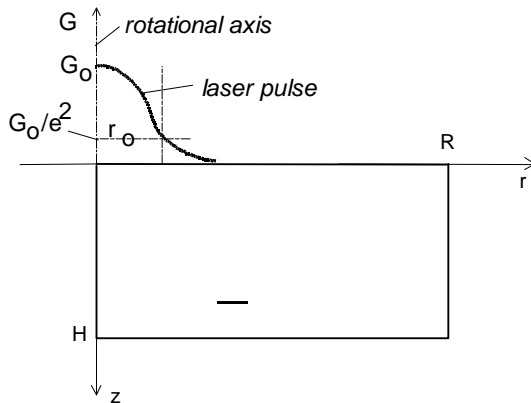


Рисунок 1. Схема задачи.

Определение тепловых полей и полей напряжения представляет собой несомненно важную задачу. Рассматриваемые в данной статье термонапряжения в кремнии и германии возникают под действием тепловых полей, описываемых и рассчитываемых в приближении нелинейной нестационарной теплопроводности. Исследование временных и пространственных зависимостей температуры и тепловых напряжений представляет интерес для совершенствования и оптимизации производства и применения полупроводниковых материалов.

Целью работы является определение и исследования тепловых полей и термонапряжений в кремнии и германии под действием лазерных импульсов высокой интенсивности. Предполагается, что температура поверхности образца не достигает температуры плавления, поэтому возникновение жидкой и значительной парообразной фаз не рассматривается.

Выбор материалов (кремний и германий) обусловлен тем фактом, что для обоих материалов теплофизические свойства сильно зависят от температуры. При изменении температуры от комнатной  $T_0$  до температуры плавления  $T_m$  коэффициент температуропроводности сильно уменьшается (Рис. 2), что вызывает дополнительную концентрацию тепла в зоне теплового воздействия.

## 2. Постановка задачи

Рассмотрим осесимметричный лазерный импульс (Рис.1), характеризующийся следующими распределениями по пространству времени (режим TEM<sub>00</sub>)

$$G(r, t) = g(t) e^{-(r/r_0)^2}, \quad g(t) = G_0 \tau \frac{1}{3} e^{-\frac{2}{9}(\tau-1)^2}, \quad \tau = t/t_0 \quad (1)$$

со значениями параметров  $G_0=5 \cdot 10^4 \text{ Вт/см}^2$ ,  $r_0=20 \text{ мкм}$ ,  $t_0=333,3 \text{ мкс}$ . График функции  $g(t)$  представлен на рис. 2.

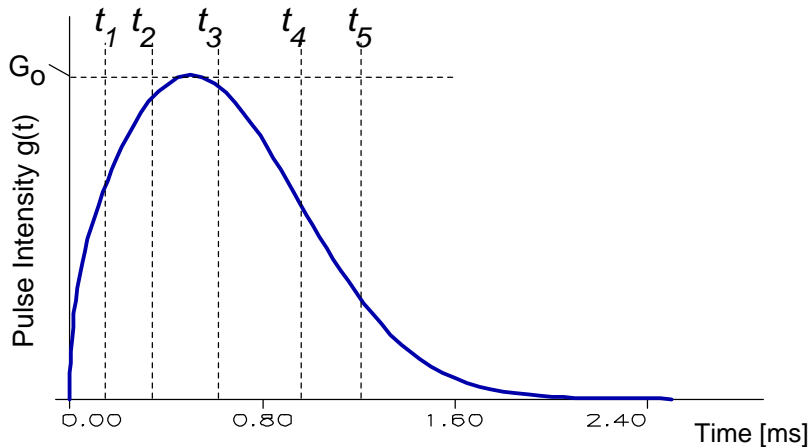


Рисунок 2. Временная развертка интенсивности лазерного импульса  $g(t)$

Экспериментально полученные зависимости теплофизических параметров германия и кремния представлены на рисунках 3,4.

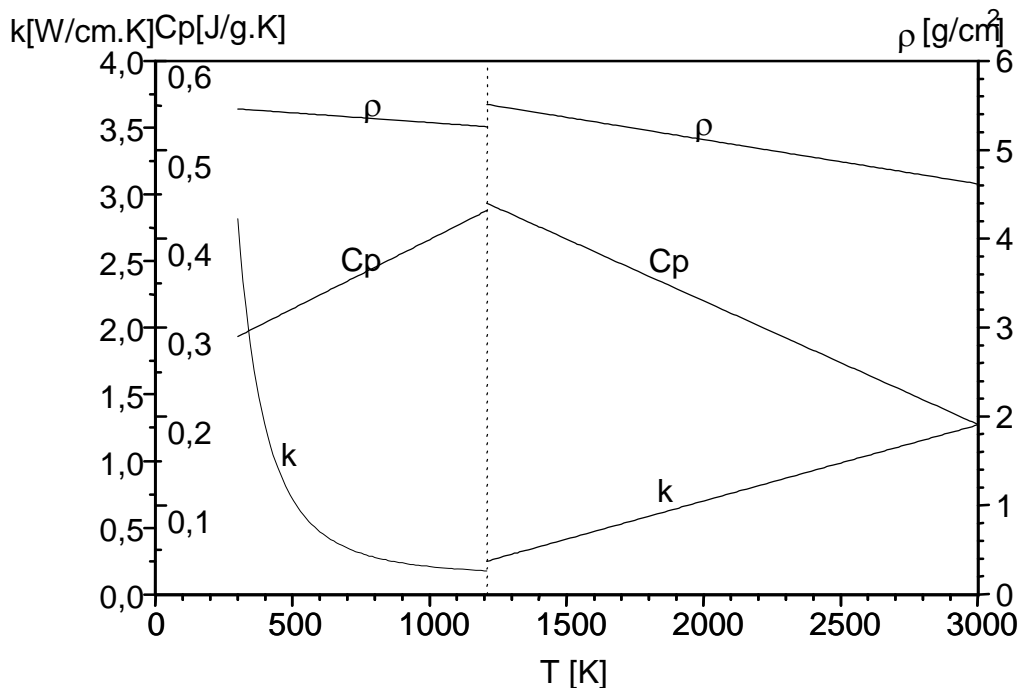


Рисунок 3. Теплофизические параметры германия.

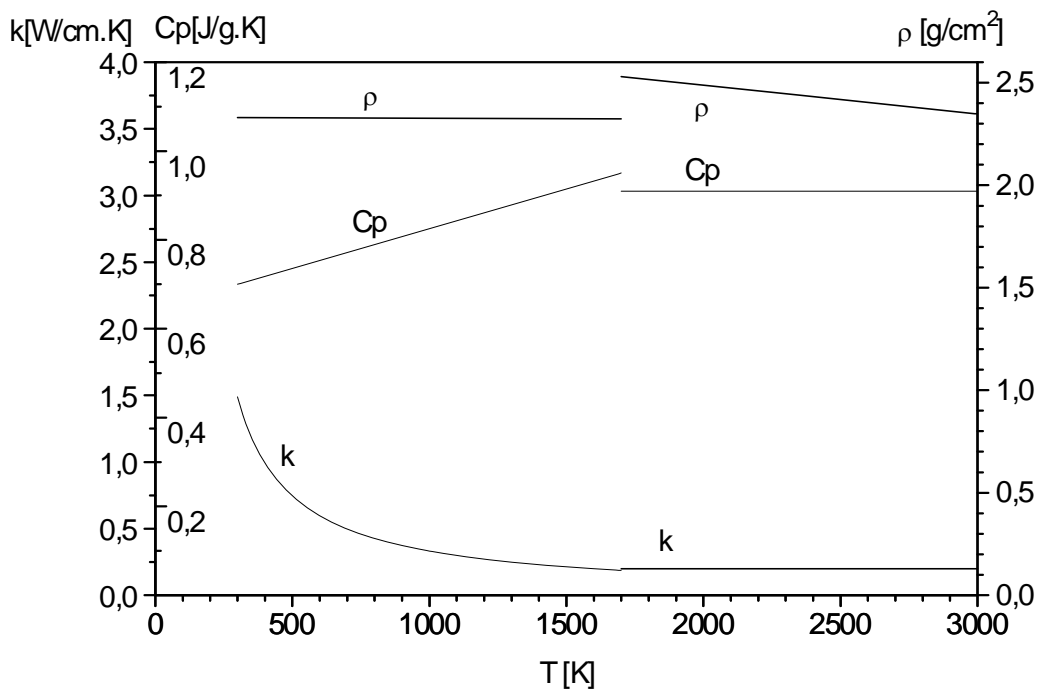


Рисунок 4. Теплофизические параметры кремния.

Измерение температурных зависимостей для механических параметров: модуля Юнга E, коэффициента Пуассона  $\eta$  и линейного коэффициент теплового расширения  $\alpha$  представляет значительные трудности, поэтому для вычислений брались следующие постоянные значения [2] ( $\Delta T = T_0 - T$ ):

$$\text{Si} : E = 82000 \text{ МПа}, \quad \eta = 0.3, \quad \alpha = (2.6 + 0.0025 \Delta T \text{ К}^{-1}) \cdot 10^{-6} \text{ К}^{-1}$$

$$\text{Ge} : E = (160000 - 30 \Delta T \text{ К}^{-1}) \text{ МПа}, \quad \eta = 0.3, \quad \alpha = (5.6 + 0.0043 \Delta T \text{ К}^{-1}) \cdot 10^{-6} \text{ К}^{-1}$$

### 3. Математическая модель.

#### 3. Теплоперенос

Как следствие осевой симметрии задачи, перенос тепла можно описывать уравнением теплопроводности в цилиндрической системе координат в области, представляющей цилиндр высоты H и радиуса R:

$$\rho(T) c_p(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r k(T)) \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial z} \left( k(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (2)$$

со следующими начальными и граничными условиями

$$z = 0 : -k \frac{\partial T}{\partial z} = G(r, t), \quad (3)$$

$$z = H : \frac{\partial T}{\partial z} = 0, \quad (4)$$

$$r = 0, r = R : \frac{\partial T}{\partial r} = 0, \quad (5)$$

$$t = 0: T(r, z, 0) = T_0 \quad (T_0 = 300 \text{ K}), \quad (6)$$

а  $G(r, t)$  задается в виде (1).

### 3.2. Термоупругость

В отсутствии внутренних и внешних сил условие равновесия, записанное в цилиндрической системе координат, имеет вид

$$\partial^T \sigma = 0, \quad \sigma^T = (\sigma_r, \sigma_z, \sigma_\varphi, \tau_{rz}) \quad (7)$$

где  $\sigma$  обозначает вектор напряжений, а  $\partial$  - дифференциально-алгебраический оператор

$$\partial^T = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial r} & 0 & \frac{1}{r} & \frac{\partial}{\partial z} \\ 0 & \frac{\partial}{\partial z} & 0 & \frac{\partial}{\partial r} \end{bmatrix}$$

Для малых деформаций соотношение между смещением и деформацией имеет вид

$$\varepsilon = \partial u, \quad u^T = (u_r, u_\varphi), \quad \varepsilon^T = (\varepsilon_r, \varepsilon_z, \varepsilon_\varphi, \gamma_{rz}) \quad (8)$$

$\varepsilon$  - вектор компонент деформации. Для случая упругих деформаций закон Гука для изотропного материала может быть записан в виде

$$\sigma = -\beta \theta a + D \varepsilon, \quad \theta = T - T_0, \quad a^T = (1, 1, 1, 0) \quad (9)$$

$$D = \begin{bmatrix} \lambda + 2G & \lambda & \lambda & 0 \\ \lambda & \lambda + 2G & \lambda & 0 \\ \lambda & \lambda & \lambda + 2G & 0 \\ 0 & 0 & 0 & G \end{bmatrix}$$

где  $\lambda$  обозначает константу Ламе,  $G$  - модуль сдвига,  $\beta$  - коэффициент тепловых напряжений. Соотношения, выражающие эти величины через модуль Юнга  $E$ , коэффициент Пуассона  $\eta$ , и линейный коэффициент теплового расширения  $\alpha$ , имеют вид

$$\lambda = \frac{2G\eta}{1-2\eta}, \quad G = \frac{E}{2(1+\eta)}, \quad \beta = \frac{E\alpha}{1-2\eta}$$

Система уравнений (7)-(9), дополненная начальными и граничными условиями

$$z = 0: \quad \sigma_z = 0$$

$$r = 0: \quad u_r = 0, \quad (10)$$

$$r = R, z = H: \quad u_r = u_z = 0$$

включает систему эллиптических дифференциальных уравнений второго порядка относительно вектора смещения  $u^T = (u_r, u_\varphi)$ , но в нее, кроме того, входят простые алгебраические уравнения для третьей и четвертой компонент деформации  $\varepsilon_\varphi$  и напряжения  $\sigma_\varphi$ , имеющие вид

$$\varepsilon_\varphi = \frac{u_r}{r}, \quad \sigma_\varphi = 2G \varepsilon_\varphi + \frac{2G\eta}{1-2\eta} (\varepsilon_r + \varepsilon_z + \varepsilon_\varphi - \beta\theta)$$

## 4. Метод решения

### 4.1. Объединение конечно-разностного и конечно-элементного блоков.

Для одновременной численной реализации задач теплопроводности и термоупругости предлагается использовать комбинацию методов конечных разностей и конечных элементов.

Метод конечных разностей очень эффективен для задач нелинейного нестационарного теплопереноса в геометрических простых областях и обеспечивает высокую эффективность вычислений. Существуют также методы эффективного решения получающихся систем линейных уравнений, которые учитывают специальные вид этих систем.

С другой стороны, метод конечных элементов получил значительное развитие применительно к задачам упругости и пластичности. Эти классы задач эффективно реализованы в ряде специализированных и универсальных программных продуктах. В данной работе была использована основанная на методе конечных элементов программа FERAS [3], оснащенная специальным блоком интерфейса для стыковки с модулем расчета теплопереноса. В случае использования различных сеток для конечно-разностных и конечно-элементных вычислений рассчитанные значения температуры переинтерполировались.

### 4.2 Метод конечных разностей для уравнения теплопроводности.

Используя неравномерную сетку с шагом  $h_i$  по радиальной и  $l_j$  по осевой координатам, уравнение теплопроводности на момент времени  $t=t_{n+1}$  принимает вид

$$A_{ij} T_{i-1,j}^{n+1} - C_{ij} T_{i,j}^{n+1} + B_{ij} T_{i+1,j}^{n+1} + \bar{A}_{ij} T_{i,j-1}^{n+1} + \bar{B}_{ij} T_{i,j+1}^{n+1} = -F_{i,j}^n \quad (11)$$

Выражения для коэффициентов  $A_{ij}$ ,  $B_{ij}$ , ... используются стандартные выражения, приведенные, например, в [4]. Решение системы уравнений (11) осуществляется методом сопряженных градиентов с IC обуславливающей процедурой???

### 4.3 Метод конечных элементов для расчета термонапряжений.

В расчетной области  $\Omega$  с конечными элементами  $\Omega_e$ ,  $e=1,2,\dots,L$  и базисными функциями  $N_i(r,z)$ ,  $i=1,2,\dots,M$  в узлах конечных элементов  $P_i=(r_i, z_i)^T$  система конечно-элементных уравнений имеет вид

$$K \bar{u} = \bar{f}, \quad \bar{u}^T = (u_1, u_2, \dots, u_M), \quad \bar{f}^T = (f_1, f_2, \dots, f_M), \quad K = [K_{ij}]_{i,j=1,\dots,M}$$

$$u_i^T = (u_r(P_i), u_z(P_i)), \quad f_i^T = (f_r^i, f_z^i), \quad K_{ij} = \sum_e K_{ij}^e, \quad f_i = \sum_e f_i^e \quad (12)$$

$$K_{ij}^e = \int_{\Omega_e} (\partial N_i)^T D (\partial N_j) d \Omega_e, \quad f_i^e = \int_{\Omega_e} \beta \Theta \Delta N_i d \Omega_e,$$

$$\Delta^T = \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

## 5. Результаты расчетов

Рассмотрим цилиндрическую область радиуса  $R=100\text{мкм}$  и высотой  $H=50\text{мкм}$ . Сетка метода конечных элементов состоит из 576 биквадратных элементов с 8 узлами каждый и 1825 узлов (Рис. 5). Поле механических напряжений рассчитано на моменты времени  $t_1=150\text{мкс}$ ,  $t_2=375\text{мкс}$ ,  $t_3=650\text{мкс}$ ,  $t_4=1000\text{мкс}$  и  $t_5=1250\text{мкс}$ . Максимальное значение температуры достигается на момент  $t_3=650\text{мкс}$ . Характеристики импульса подобраны так, чтобы максимальная температура оставалась меньше температуры плавления.

На рисунках 6, 7 показаны графики температуры на поверхности на моменты времени  $t_1-t_5$ . Распределение напряжений на те же моменты времени показаны на рисунках 8, 9.

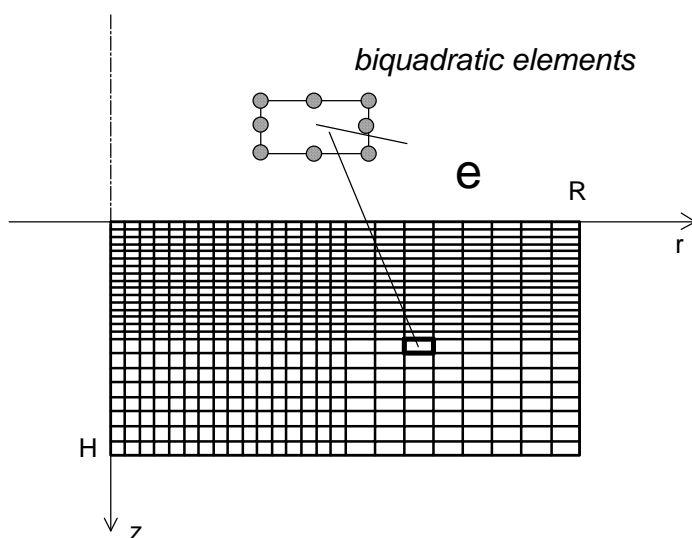


Рисунок 5. Сетка метода конечных элементов для расчета тепловых напряжений.

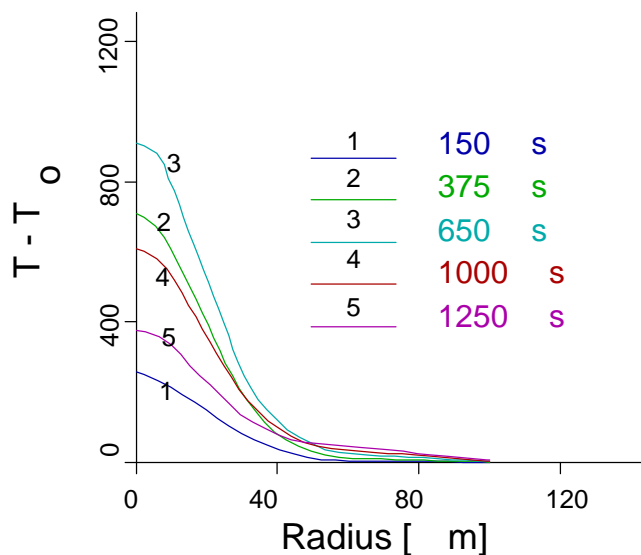


Рисунок 6. Распределение температуры поверхности германия на несколько моментов времени.

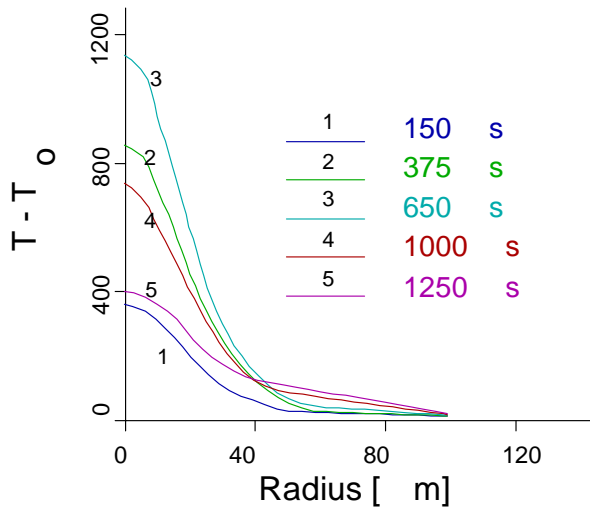


Рисунок 7. Распределение температуры поверхности кремния от радиуса на несколько моментов времени (кремний).

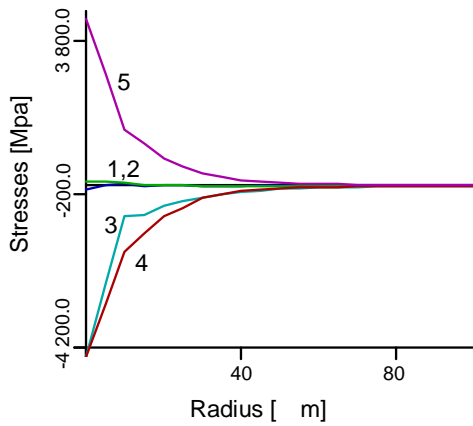


Рисунок 8. Распределение напряжения на поверхности германия на момент времени  $t_3=650\mu\text{s}$  (1- $\sigma_z$ , 2- $\gamma_{Tz}$ , 3- $\sigma_z$ , 4- $\sigma_\phi$ , 5- $\sigma_{\text{eff}}$ ).

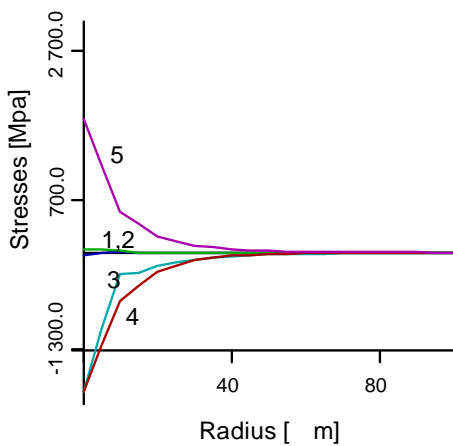


Рисунок 9. Распределение напряжения на поверхности на момент времени  $t_3=650\mu\text{s}$  в кремнии (1- $\sigma_z$ , 2- $\gamma_{Tz}$ , 3- $\sigma_z$ , 4- $\sigma_\phi$ , 5- $\sigma_{\text{eff}}$ ).



## 6. Обсуждение

В рассматриваемой задаче параметры лазерного импульса были выбраны так, чтобы температуры материала оставались ниже температуры плавления. При этом на фиксированные моменты времени на основе решения задачи нелинейной теплопроводности были рассчитаны распределения напряжений.

Хотя максимальные значения термонапряжений на малом временном интервале примерно в 1 мс, для вычислений мы использовали модели термоупругости. Такой подход с одной стороны основывается на том, что экспериментально для рассматриваемых режимов значительные пластические деформации не наблюдаются. С другой стороны, для модели пластической деформации нет достоверных параметров материала для кремния и германия.

Так как в рассматриваемой задаче возникают только сжимающие напряжения, вероятность возникновения и распространения трещины мала. Однако этот факт должен быть проверен экспериментально. Несмотря на то, что максимальная температура, достигаемая на кремнии, выше, чем на германии, максимальные напряжения в нем получаются на 40 процентов меньше.

Для более высокой энергии импульса лазерного излучения, при которых обработка сопровождается появлением жидкой фазы (нанесение покрытий, переплавка, получение сплавов), поведение твердой фазы окажется схожим, однако достигаемые температуры будут более высокими (равными температуре плавления), а время воздействия – более длительным.

Хотя при коротко-импульсной обработке полупроводников не возникает значительных пластических деформаций и, следовательно, остаточных напряжений, они встречаются в современной технологии. Например, пластические деформации под действием нормальных напряжений и соответствующие остаточные растягивающие напряжения используются для управляемой формовки листов металла [5]. Эта технология, называемая лазерной формовкой или лазерным изгибанием, является очень эффективным для прототипирования. Хотя лазерная формовка внедряется с большой скоростью, этот вопрос требует проведения математических (численных) исследований.

Помимо рассмотренной задачи, комбинированный подход, основанный на совместном использовании конечно-разностного и конечно-элементного подхода, может применяться для других задач, включая задачи с подвижными фазовыми границами и конвекции в ванне расплава. Интерфейс между конечно-разностным и конечно-элементным блоками допускает взаимную интерполяцию значений от одной сетки к другой. В обоих методах узлы сеток не являются фиксированными, конечно-разностные методы на динамически адаптивных сетках и конечные элементы со свободной внешней границей могут быть объединены.

## Список литературы

- [1] Duley W.W., *Laser Processing and Analysis of Materials* (Academic Press, London, 1976).
- [2] *Physical Parameters (Handbook)* (Energoatomizdat, Moscow, 1992) (in Russian).
- [3] Weber H., Leopold J., Semmler U., Hoyer K., *Finite-Elemente-Programmsystem FEPAS* (Wiss. Schriftenreihe der TU Karl-Marx-Stadt, No. 11, 1986).
- [4] Samarskii A.A., *Theorie der Differenzenverfahren* (Fachbuchverlag Leipzig, 1984)
- [5] Vollertsen F., Geiger M., *Blech Rohre Profile* **40** (1993) 9, 666-670