

毫秒脉冲激光辐照硅基PIN的温度场应力场数值分析

魏智 金光勇 彭博 张喜和 谭勇[†]

(长春理工大学理学院, 长春 130022)

(2014年1月18日收到; 2014年3月17日收到修改稿)

为了研究毫秒脉冲激光辐照硅基PIN多层结构产生的温度场和应力场的特点, 本文基于热传导理论和弹性力学理论, 利用等效比热容法处理相变潜热, 考虑多个热源, 尤其是底层铝电极反射的影响, 并考虑硅基PIN探测器每层材料参数的非线性影响, 采用有限元模拟软件COMSOL Multiphysics, 对毫秒脉冲激光辐照硅基PIN多层结构的过程进行了二维数值模拟, 得到了材料表层及内部各层的瞬态温度场与应力场的时空分布和变化规律. 结果表明, 底层铝电极对激光的反射, 使得在底层铝电极处及附近硅层的温度都略有升高. 在此基础上, 分析了毫秒脉冲激光辐照硅基PIN的硬破坏机理, 即熔融前力学损伤导致硅基PIN探测器的功能失常.

关键词: 毫秒脉冲激光, 热应力, 相变潜热, 多层结构

PACS: 42.62.-b, 85.60.Dw, 44.10.+i

DOI: 10.7498/aps.63.194205

1 引言

硅基PIN光电探测器以其优异的性能在工业领域和研究领域中具有广泛的应用价值, 但硅基PIN光电探测器在受到激光辐射时, 通常会产热应力损伤、光学击穿和熔融破坏等效应, 对探测器的性能产生不利的影响. 所以, 研究激光辐照硅基PIN热应力的作用机理和物理规律, 以便提高其在激光领域的应用性能, 具有十分重要的价值. 长期以来, Watkins等研究了探测器的形态学损伤、深度缺陷和它们对电气参数的影响^[1]. Moeglin又对Watkins的研究结果进行了深入研究, 发现损伤阈值不是一个确定的值, 而是呈现一个连续下降的趋势^[2]. Arora和Dawar发现硅层最先发生热应力损伤^[3]. Li发现紫外激光辐照可以改变二氧化硅和硅-二氧化硅界面层的电学和光学性能, 从而使引起CCD中的PIN单元工作异常, 性能退化^[4].

上述研究大多是关于高功率、短脉冲激光, 这种激光辐照时会导致空气击穿, 等离子体吸收激光能量, 形成不透明的介质层, 激光束的一部分不能到达靶材表面, 所以短脉冲激光通常用来烧蚀介质层^[5-9]. 而毫秒激光虽然辐照时间比纳秒、飞秒激光长, 但功率密度低, 在与物质相互作用过程中可以减少以上提到的现象. 综上所述, 已有的实验研究多为连续和短脉冲对光电探测器的损伤, 而对长脉冲激光辐照硅基光电探测器的研究, 针对构成PIN的某一种材料的模拟仿真较多, 并且也仅考虑硅层材料参数的非线性影响^[10], 对于毫秒量级的长脉冲激光对硅基PIN多层材料的热应力损伤研究, 还未见报道.

本文主要针对毫秒脉冲激光辐照硅基PIN多层结构产生的温度场和热应力损伤进行数值模拟和损伤机理分析, 指出了底层铝电极反射对损伤的影响, 并考虑了硅基PIN探测器每层材料参数的非线性影响.

[†] 通讯作者. E-mail: laser95111@126.com

2 计算模型

当脉宽为毫秒量级的长脉冲激光对硅基PIN光电探测器作用时,器件吸收激光能量且有足够的时间转化成热能,因此对长脉冲激光作用硅基PIN光电探测器的理论处理必须考虑材料的热传导问题.假设各层结构之间满足温度连续和热流平衡条件;激光辐照过程中未出现气化现象;模型足够大,因而在激光辐照过程中,热能不会传导到边界;各边界绝热,忽略边界热对流和热辐射的影响;通过控制激光能量,暂不存在塑性应力和塑性形变,并假定入射激光束具有轴对称分布,且垂直照射在圆板形硅基PIN多层材料的表面,建立二维轴对称热传导模型.PIN模型结构如图1所示,其中硅层厚度为300 μm,长度为1000 μm;二氧化硅增透膜层厚度为0.1 μm,长度为800 μm;铝电极层厚度为0.7 μm^[11].

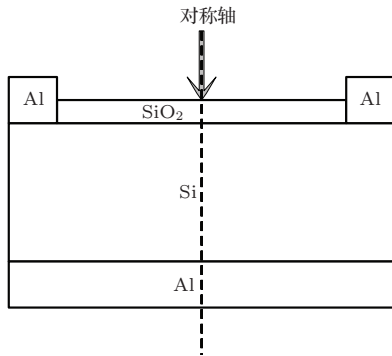


图1 靶材的模型结构

毫秒脉冲激光辐照光敏面, Fourier瞬态热传导方程依据相变情况,分为不包含相变和包含相变的两类热传导方程,可写为^[12]

$$\rho_i c_i \frac{\partial T_i(r, z, t)}{\partial t} = k_i \left(\frac{\partial^2 T_i(r, z, t)}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T_i(r, z, t)}{\partial r} + \frac{\partial^2 T_i(r, z, t)}{\partial z^2} \right) + Q_i, \quad (1a)$$

$$\rho_i c_i \frac{\partial T_i(r, z, t)}{\partial t} = k_i \left(\frac{\partial^2 T_i(r, z, t)}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T_i(r, z, t)}{\partial r} + \frac{\partial^2 T_i(r, z, t)}{\partial z^2} \right) + \rho_i c_i L_i \frac{\partial f_{si}}{\partial t} + Q_i, \quad (1b)$$

其中, ρ_i , C_i , k_i , Q_i , L_i , f_{si} 分别为第 i 层材料的密

度、比热、热导率、热源项、熔融相变潜热、固相率; T_i 为 t 时刻第 i 层材料的温度. 本文针对非稳态方程 (1), 采用初始温度为 298 K 和表面绝热的边界条件.

由于二氧化硅减反层对波长 1064 nm 光的吸收系数很小, 可以忽略其吸收的光能, 本文认为硅层虽然吸收了大部分激光能量, 但是不能忽略铝电极层的反射, 则激光热源项包括入射热源项 Q_λ 和反射热源项 $Q_{反}$, 以及下层铝电极热源项 $Q_{铝}$:

$$Q_{Si}(T, z, r, t) = Q_\lambda(T, z, r, t) + Q_{反}(T, z, r, t), \quad (2)$$

$$Q_\lambda(T, z, r, t) = I_0(1 - R(T))\alpha(T, z) \times \exp(-2r^2/a_0^2) \exp(-\alpha(T, z)), \quad (3)$$

$$Q_{反}(T, z, r, t) = I_0(1 - R(T))R(T)R_{Al}(T)\alpha(T, z) \times \exp(-2r^2/a_0^2) \times \exp(-\alpha(T, z)(2d - z)), \quad (4)$$

$$Q_{铝}(T, z, r, t) = I_0(1 - R(T))(1 - R_{Al}(T))\alpha(T, z) \times \exp(-2r^2/a_0^2) \exp(-\alpha(T, z)d), \quad (5)$$

其中, I_0 是单脉冲激光的中心能量密度; d 为硅片的厚度; $R(T)$ 是硅表面的反射率; $R_{Al}(T)$ 是铝表面的反射率; $\alpha(T, z)$ 是硅的吸收系数.

与热传导方程耦合的热弹性基本方程为^[12]

$$\begin{aligned} \nabla^2 u_{rj} - \frac{u_{rj}}{r^2} + \frac{1}{1 - 2\mu_j} \frac{\partial \varepsilon_j}{\partial r} - \frac{2(1 + \mu_j)}{1 - 2\mu_j} \beta_j \frac{\partial T_j}{\partial r} &= 0, \\ \nabla^2 u_{zj} + \frac{1}{1 - 2\mu_j} \frac{\partial \varepsilon_j}{\partial z} - \frac{2(1 + \mu_j)}{1 - 2\mu_j} \beta_j \frac{\partial T_j}{\partial z} &= 0, \end{aligned} \quad (6)$$

其中 u_{rj} 和 u_{zj} 分别表示位移在 r, z 方向上的分量; ε_j , μ_j 和 β_j 分别表示材料的体应变, 泊松比和热膨胀系数. 本文针对非稳态方程 (6), 采用初始时刻位移为 0, 速度为 0 的初始条件和除底面边界沿 z 方向位移为零外, 其余边界都为自由边界的边界条件.

由硅基PIN光电探测器各层材料的物理化学性质可知, 金属铝电极层材料熔点为 933 K, 熔化潜热为 386.9 J/g; 基底硅层材料的熔点为 1687 K,

熔化潜热为1800 J/g; 二氧化硅增透膜层材料的熔点为1973 K, 它们是判断温度场拐点的关键参数. 另外, 考虑每层材料的非线性参数影响, 非线性参数包括硅、二氧化硅、铝的热导率, 密度, 比热, 反射率, 吸收系数, 泊松比, 热膨胀系数, 杨氏模量.

3 结果与分析

3.1 温度场结果与分析

以 $I_9 = 318 \text{ J/cm}^2$ 的激光辐照硅基PIN为例, 考察硅基PIN的温度分布, 如图2所示. 可见, 表面及很浅一层区域内温度很高, 并且温度等温线变化明显. 还可看出, 底层一定深度内温度略有升高.

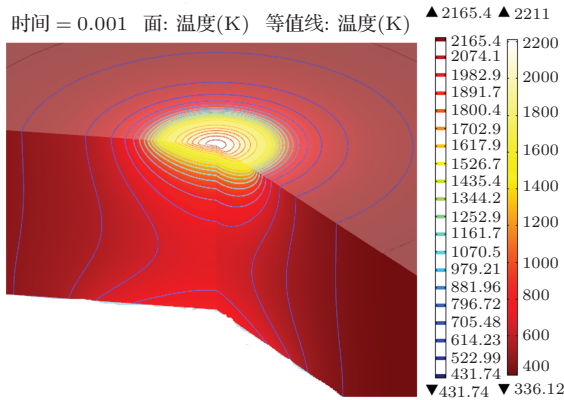


图2 (网刊彩色) $I_9 = 318 \text{ J/cm}^2$ 的入射能量辐照下, 1 ms时温度云图

3.1.1 不同入射能量条件下, 温度场随时间的变化情况

单脉冲激光的中心能量密度分别为 $I_1 = 80 \text{ J/cm}^2$, $I_2 = 111 \text{ J/cm}^2$, $I_3 = 137 \text{ J/cm}^2$, $I_4 = 143 \text{ J/cm}^2$, $I_5 = 175 \text{ J/cm}^2$, $I_6 = 207 \text{ J/cm}^2$, $I_7 = 239 \text{ J/cm}^2$, $I_8 = 271 \text{ J/cm}^2$, $I_9 = 318 \text{ J/cm}^2$ 时硅层辐照中心点 ($r = 0, z = 0.7 \mu\text{m}$) 的温度随时间的变化情况, 如图3所示. 可见, 不同激光能量密度的温升曲线, 在达到熔融温度1687 K前, 其斜率都随时间逐渐增大, 即温升速度逐渐加快. 出现这一现象有两方面的原因: 1) 吸收系数随温度升高而增大; 2) 热传导系数随温度升高而减小. 从曲线#4—#5可以看出, 当入射激光能量能够使硅层辐照中心点温度达到熔融温度却无法使其继续温升时, 曲线出现熔融相变平台期, 而且随着入射能量的增加, 达到熔融温度所需时间减少, 平台期时间变长. 从曲线#6—#9可以看出, 随着作用激光能量的增加,

熔融相变平台期迅速减小, 并且由#9可看出, 平台区几乎消失, 只能看到温升突变的拐点. 本文认为造成这种现象的原因是由于相变, 硅的吸收率从0.67突降到0.28, 导致硅基底吸收的激光能量大幅减小, 则硅在达到熔融温度时, 吸收的能量锐减, 使得温升缓慢, 同时由于热扩散和固液相变吸收潜热, 进一步使得温升更加缓慢, 所以在作用激光能量密度较低时, 能看到固液相变的动态平衡平台期; 当激光能量密度增加到一定程度, 平衡被打破, 平台期消失, 温升得以继续. 对于激光作用结束后的降温过程, 也能看到液固相变回凝平台期, 并且作用激光能量越大, 平台期越长.

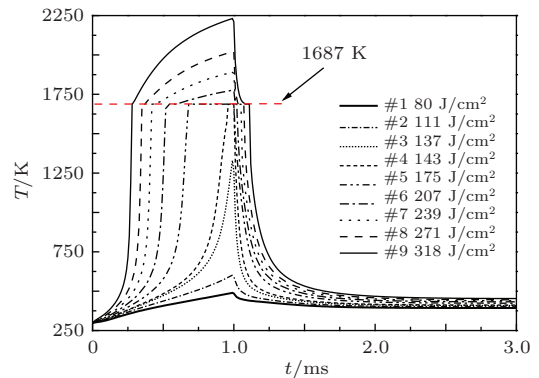


图3 不同入射能量辐照下, 硅层辐照中心点的温度随时间的变化情况

3.1.2 不同入射能量条件下, 温度场随空间的变化情况

不同入射能量条件下, 径向温度随空间的变化情况如图4所示. 可见, 随着入射能量的增加, 靶材径向温度升高, 而随着径向距离增加, 温升下降, 且随径向距离减小的变化趋势基本相同, 表现为类高斯分布, 与作用激光的空间分布类似.

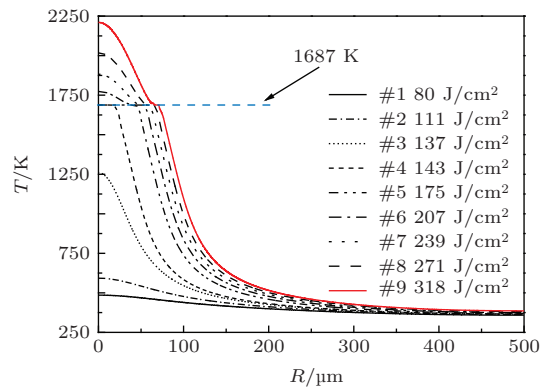


图4 不同能量下径向温度随空间的变化 ($t = 1 \text{ ms}$)

不同入射能量条件下, 轴向温度随空间的变化情况如图 5 所示. 可见随着入射能量的增加, 靶材中心轴向的温升增加, 而随着轴向距离的增加, 温升下降, 且不同能量下轴向距离的温度变化趋势基本相同. 特别观察到, 由于考虑了底层铝电极对激光的反射, 虽然随着轴向距离的增加, 温升下降, 但是在底层铝电极处及附近的硅层 (200 μm 以后) 温度都略有升高.

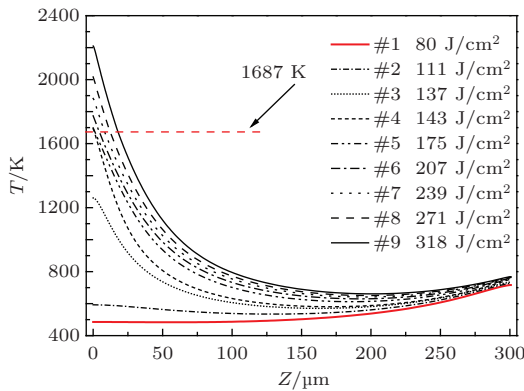


图 5 不同能量下轴向温度随空间的变化 ($t = 1 \text{ ms}$)

3.2 应力结果与分析

对于 PIN 各层材料来说, 考虑熔融之前的应力场.

图 6 为 $I_3 = 137 \text{ J/cm}^2$ 的入射能量辐照下, 辐照 1 ms 时应力图. 由于 Si 层的热膨胀系数比 SiO_2 层高近一个数量级, 可知最大等效应力出现在硅层表面, 即等效应力的最大值出现在二氧化硅层与硅层之间, 由图可知, 应力最大点出现在硅铝交界点.

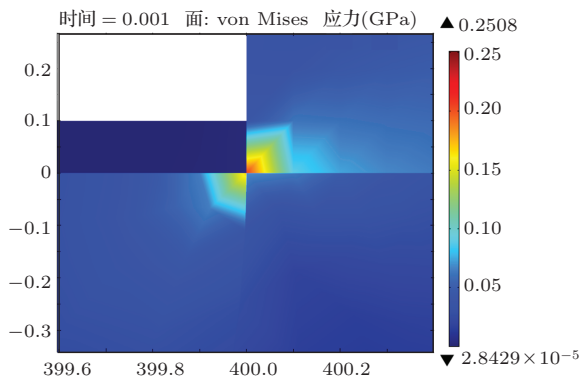


图 6 (网刊彩色) $I_3 = 137 \text{ J/cm}^2$ 的入射能量辐照下, 1 ms 时应力图

对于应力来说, 考虑某一点上的力没有意义, 所以本文选取应力最大点所在的硅层上表面来研

究应力场随空间的变化情况. 由于硅的抗压强度是 120 MPa, 可知当单脉冲的中心能量密度为 $I_1 = 80 \text{ J/cm}^2$, 辐照 1 ms 时已经超过了其抗压强度, 可能发生层裂. 1 ms 时, 硅层上表面的应力场随空间的变化情况如图 7 所示. 由图可知, 应力主要集中在二氧化硅层至硅层的一定深度范围内, 由图 7(a) 可知, 硅层表面上的径向应力先表现为拉应力, 并逐渐减小, 后转变为压应力, 并逐渐增大, 在 400 μm (硅层和铝电极层接触点) 附近达到最大值, 并且其压应力值已超过其抗压强度 (硅的抗压强度是 120 MPa), 后发生突变, 变为拉应力, 并达到最大, 后逐渐减小. 对于径向应力来说, 这表明在整个二氧化硅层和硅层层间出现层间断裂或者鼓包现象. 由图 7(b) 可知, 硅层表面上的轴向应力也在 400 μm (硅层和铝电极层接触点) 发生振荡, 但其强度较小. 对于轴向应力来说, 在临近硅铝接触点的微小区域内, 硅层表面的轴向应力超过其抗压强度, 这表明在该微小区域内出现断裂、凸起等. 由图 7(c) 可知, 硅层表面上的环向应力先表现为拉应力, 并逐渐减小, 在 400 μm (硅层和铝电极层接触点) 附近突变为压应力, 并达到最大值, 且其压应力值已超过其抗压强度 (硅的抗压强度是 120 MPa), 后变为拉应力, 并达到最大, 后逐渐减小. 对于环向应力来说, 这表明在整个硅层表面上出现了沿环向展开的裂纹. 所以可知, 表面径向、轴向和环向应力这三个方向的应力分布都有可能引起层状结构的层间结合强度下降. 还可以看出, 表面径向压应力比环向和轴向压应力高得多, 由此可知, 径向压应力在层状结构的层间结合强度下降现象中起到主要作用, 则径向压应力首先引起硅层表面达到应力极限, 引起层间结合强度下降. 因此, 表面径向压应力是导致变形的起因.

1 ms 时, $R = 400 \mu\text{m}$ 的轴上在 $I_1 = 80 \text{ J/cm}^2$ 条件下的应力场随空间的变化情况如图 8 所示. 由图可知, $R = 400 \mu\text{m}$ 的轴上径向应力, 在上面铝电极层 (0—0.7 μm) 内, 表现为拉应力并逐渐增大, 后在硅层 (0.7—300.7 μm) 内, 拉应力逐渐减小, 后变为压应力并达到最大值, 后逐渐减少, 在底层铝电极层 (300.7—300.14 μm) 内, 压应力又逐渐增大. 对于径向应力来说, 这表明在上面铝电极层和硅层层间出现层间断裂或者鼓包现象. $R = 400 \mu\text{m}$ 的轴上环向应力, 在上面铝电极层 (0—0.7 μm) 内, 表

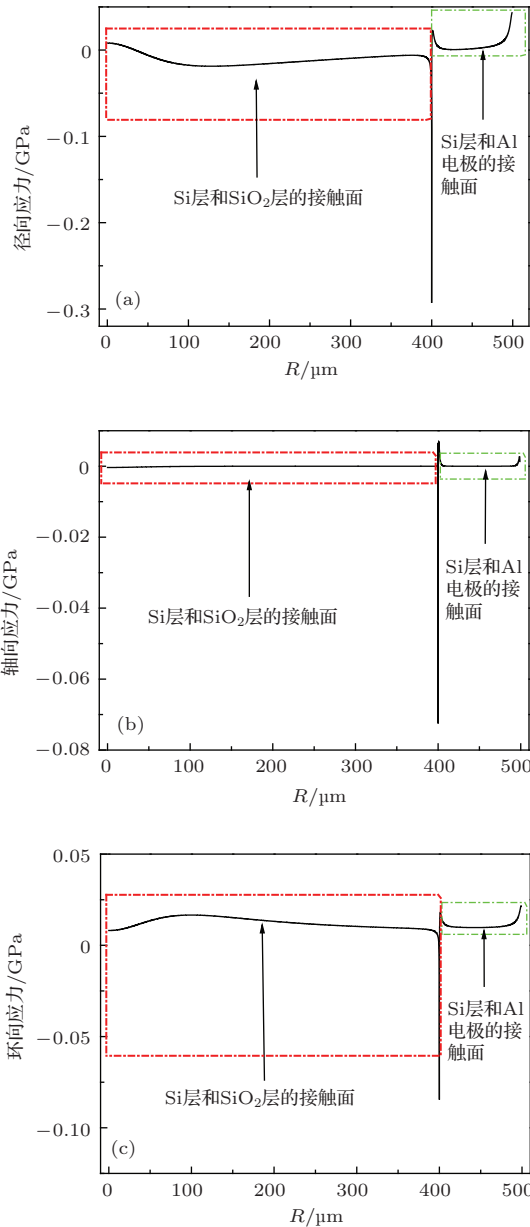


图7 硅层上表面在 $I_1 = 80 \text{ J/cm}^2$ 条件下的应力场随空间的变化情况 (a) 径向应力; (b) 轴向应力; (c) 环向应力

现为压应力并逐渐减小, 后在硅层 ($0.7\text{--}300.7 \mu\text{m}$) 内, 转变为拉应力并逐渐减小, 在底层铝电极层 ($300.7\text{--}301.4 \mu\text{m}$) 内, 又转变为压应力并逐渐增大. 对于环向应力来说, 这表明在整个 $R = 400 \mu\text{m}$ 的轴上出现了沿环向展开的裂纹. $R = 400 \mu\text{m}$ 的轴上轴向应力在上面铝电极层 ($0\text{--}0.7 \mu\text{m}$) 内, 表现为拉应力并逐渐减小, 后在硅层 ($0.7\text{--}300.7 \mu\text{m}$) 内, 转变为压应力, 达到最大值后逐渐减小. 对于轴向应力来说, 在临近硅铝接触点的微小区域内, $R = 400 \mu\text{m}$ 的轴上轴向应力超过其抗压强度, 这表明在该微小区域内出现断裂、凸起等. 所以可知,

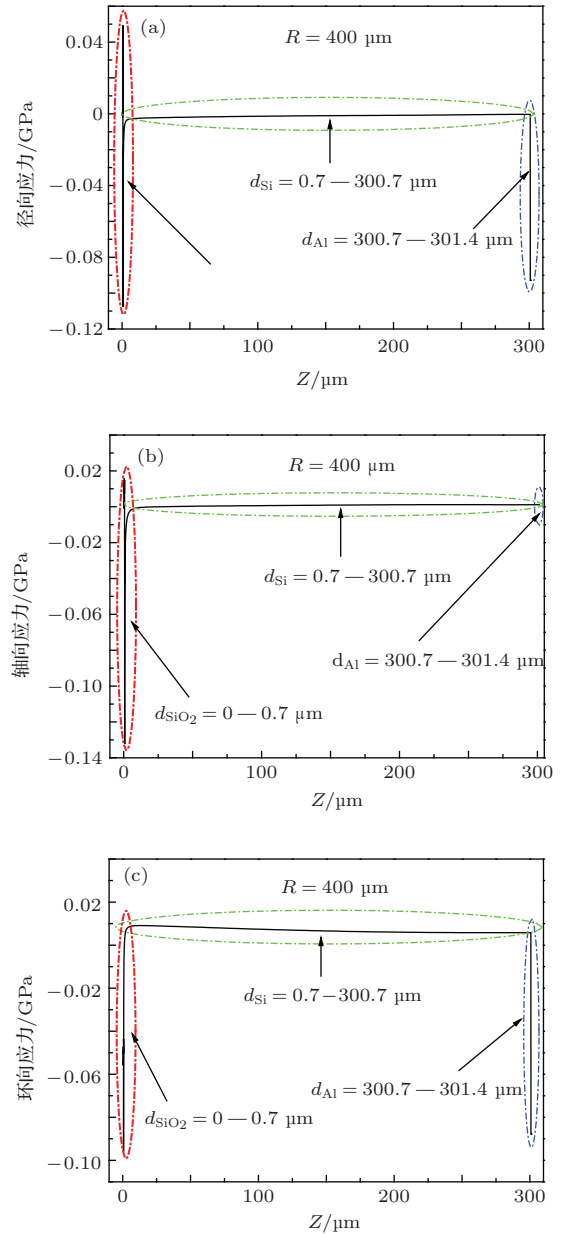


图8 $R = 400 \mu\text{m}$ 的轴上在 $I_1 = 80 \text{ J/cm}^2$ 条件下的应力场随空间的变化情况 (a) 径向应力; (b) 轴向应力; (c) 环向应力

$R = 400 \mu\text{m}$ 的轴上径向、轴向和环向应力这三个方向的应力分布都有可能引起层状结构的层间结合强度下降.

4 结 论

本文研究了毫秒脉冲激光辐照硅基 PIN 多层结构时, 材料表层及内部各层的瞬态温度场与应力场在时间和空间上的分布和变化规律, 过程中考虑了硅基 PIN 探测器每层材料参数的非线性和多个热源, 尤其是底层铝电极反射的影响, 获得了温度

场和热应力场的特点及变化规律, 结果表明, 由于考虑了底层铝电极对激光的反射, 随着轴向距离的增加, 温升下降的趋势在底层铝电极处及附近发生了变化, 即轴向 200 μm 以后的硅层温度略有升高. 分析得出, 熔融前硅基 PIN 光电探测器的功能失常, 以力学损伤占主导地位, 力学损伤造成内部断路, 致使器件无法工作. 研究结果为激光辐照硅基 PIN 半导体器件所造成的硬破坏的机理奠定基础.

参考文献

- [1] Watkins S E, Zhang C Z, Walser R M, Becker M F 1990 *Appl. Opt.* **29** 827
- [2] Moeglin J P, Gautier B, Joeckle R, Bolmont D 1998 *SPIE*. **3287** 60
- [3] Arora V K, Dawar A L 1996 *Appl. Opt.* **35** 7061
- [4] Li F M, Nixon O, Nathan A 2004 *IEEE Trans. Electron Devices* **51** 2229
- [5] Engelhart P, Hermann S, Neubert T, Plagwitz H, Grischke R, Meyer R, Klug U, Schoonderbeek A, Stute U, Brendel R 2007 *Prog. Photovoltaics* **15** 521
- [6] Hermann S, Harder N, Brendel R, Herzog D, Haferkamp H 2010 *Appl. Phys. A* **99** 151
- [7] Zhao R, Liang Z C, Han B, Zhang H C, Xu R Q, Lu J, Ni X W 2009 *Chin. Phys. B* **18** 1877
- [8] Cheng T, Li Y J, Meng L M, Li X B 2011 *Chin. Phys. B* **20** 024206
- [9] Li B W, Ishiguro S, Skoric M M 2006 *Chin. Phys.* **15** 2046
- [10] Li Z W, Wang X, Shen Z H, Lu J 2012 *Applied Optics* **51** 2759
- [11] Ouyang X P, Li Z F, Zhang G G, Huo Y K, Zhang Q M, Zhang X P, Song X C, Jia H Y, Lei J H, Sun Y C 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1502 (in Chinese) [欧阳晓平, 李真富, 张国光, 霍裕昆, 张前美, 张显鹏, 宋献才, 贾焕义, 雷建华, 孙远程 2002 物理学报 **51** 1502]
- [12] Liu Q X, Zhong M 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 8535 (in Chinese) [刘全喜, 钟鸣 2010 物理学报 **59** 8535]

Numerical simulation of thermal and stress field in silicon-based positive-intrinsic-negative photodiode irradiated by millisecond-pulsed laser

Wei Zhi Jin Guang-Yong Peng Bo Zhang Xi-He Tan Yong[†]

(School of Science, Changchun University of Science and Technology, Changchun 130022, China)

(Received 18 January 2014; revised manuscript received 17 March 2014)

Abstract

In order to study the thermal and stress fields in the multilayered structure of silicon-based positive-intrinsic-negative(PIN) photodiode irradiated by millisecond(ms)-pulsed laser, we use the thermal elasto-plastic constitutive theory and the equivalent specific heat method, to deal with the phase change latent heat. The multiple-heat-source, especially the influence of reflection from bottom-aluminum-electrode, and the effect of the nonlinearity of material parameters are taken into consideration. A 2-D simulation model is built by means of the finite element simulation software of COMSOL Multiphysics. The surface and the internal each layer showing changes of the transient distribution and evolution of the thermal and stress fields with space and time can be obtained. Because of taking account of the reflection of the aluminum electrode, the temperature of the aluminum electrode rises slightly. On this basis, we analyze the hard failure mechanism of ms-pulsed laser irradiated silicon-based PIN, and the mechanical damage before melting that leads to a malfunction of silicon-based PIN detector.

Keywords: millisecond pulse laser, thermal stress, phase change latent heat, multilayered structure

PACS: 42.62.-b, 85.60.Dw, 44.10.+i

DOI: 10.7498/aps.63.194205

[†] Corresponding author. E-mail: laser951111@126.com