

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

ФИЗИЧЕСКИЙ
ИНСТИТУТ
имени
П.Н.Лебедева



Ф И А Н

ПРЕПРИНТ

3

И.Г.ЛЕБО

**ПРОГРАММА «ТЕПОЛ» ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО
МОДЕЛИРОВАНИЯ ЛАЗЕРНОГО ОТЖИГА
ТОНКИХ ПЛЕНОК**

МОСКВА 2005

ПРОГРАММА «ТЕПОЛ» ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО
МОДЕЛИРОВАНИЯ ЛАЗЕРНОГО ОТЖИГА ТОНКИХ ПЛЕНОК.

И. Г. Лебо

Аннотация.

Дано описание физико-математической модели и двумерной программы «ТЕПОЛ» для расчета лазерного отжига сегнетоэлектрических гетероструктур. Приводятся примеры таких расчетов. Обсуждается возможность улучшения однородности нагрева образцов за счет использования прозрачного покрытия.

THE NUMERICAL CODE “TEPOL” FOR MODELING OF LASER
ANNEALING OF THIN FILMS.

I.G. Lebo

Abstract.

The physical-mathematical model and 2D code “TEPOL” are developed to simulate the laser annealing of thin electroceramic samples. The results of test problem calculations have been presented in this paper. We have discussed the opportunity to improve the homogeneity of sample heating by using the transparent layer for laser beam.

Введение.

Современная полупроводниковая индустрия остро нуждается в новых диэлектрических материалах в виде многослойных пленок. «Титанат-барий-стронций (BST)» - гетероструктуры являются главным кандидатом на использование в перспективной микро- и нанотехнологиях в качестве материала с высокой диэлектрической проницаемостью. Использование новых сегнетоэлектрических материалов в микроэлектронике (в частности, в монолитных интегральных схемах) требует выхода за рамки традиционных технологий и решения ряда проблем связанных с осаждением пленок, кристаллизацией и их микроструктурированием. В процессе продолжительной тепловой обработки многослойных образцов в печи возникают негативные диффузионные процессы, трудно контролируемое формирование кристаллических зерен и нежелательных фаз и т.д. Использование лазера позволяет обеспечить кратковременный строго дозируемый нагрев образца. В процессе облучения на масштабах времени 1-10 нс можно менять интенсивность лазера на порядки величины. Благодаря высокой когерентности излучения можно формировать на поверхности образца интерференционные структуры с расстояниями между максимумами интенсивности $\sim 0,25$ мкм (при использовании КгF-лазера). Локализация температурного поля позволяет минимизировать негативные процессы, связанные с диффузией отдельных компонентов, а широкие возможности изменения скорости поступления энергии в образец позволяют проводить исследования физических процессов в «режиме реального времени» и

управлять процессом кристаллизации в тонкопленочных сегнетоэлектрических структурах. Лазерное излучение позволяет также обрабатывать образцы в атмосфере воздуха или инертных газов в широком диапазоне начальных давлений (вплоть до условий глубокого вакуума).

Поскольку речь идет о развитии субмикронной технологии, когда управление нагревом образцов должно происходить на масштабах времен порядка 10 нс и менее, важное значение приобретает разработка физико-математических моделей и программ, позволяющих с высокой степенью точности описывать физические явления в фокусе лазерного луча и сравнивать данные натурального и вычислительного экспериментов.

Известно несколько работ, посвященных проблеме лазерного отжига электрокерамических пленок и моделирования этих процессов на ЭВМ (смотри, например [1-3]). Так в [1] приводятся результаты экспериментов по облучению KrF-лазером BST образцов, а в [2] результаты двумерных расчетов по нагреву многослойных образцов лазером.

В [3] приведены предварительные результаты по облучению таких образцов на установке «ГАРПУН» в Физическом институте им. П.Н. Лебедева. Это мощный KrF-лазер, генерирующий импульсы длительностью 100 нс и энергией вплоть до 100 Дж. Для анализа и интерпретации экспериментальных данных, возможности планировать новые эксперименты и прогнозировать их результаты была разработана двумерная программа «ТЕПОЛ» (температурные поля) в цилиндрических координатах (r,z) .

1. Описание программы «ТЕПОЛ».

Система уравнений, описывающих облучение и нагрев многослойного

$$\begin{aligned} c(\rho, T) \frac{\partial T}{\partial t} &= -\operatorname{div} \vec{q}_T + \frac{\partial q_L}{\partial z} \\ \frac{\partial q_L}{\partial z} &= -\chi(\rho, T) q_L \\ \vec{q}_T &= -\kappa(\rho, T) \operatorname{grad} T \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь $c(\rho, T)$, $\kappa(\rho, T)$, $\chi(\rho, T)$, – теплоемкость, теплопроводность и коэффициент поглощения лазерного излучения, T - температура, ρ - плотность, q_L , q_T – лазерный и тепловой потоки. Поскольку в процессе нагрева образца температура меняется в широком диапазоне (от комнатной до тысяч градусов), то учитывается возможная зависимость этих величин от плотности и температуры и в программе используется методика, позволяющая решать нелинейное уравнение теплопроводности (смотри [4]). Система уравнений (1) решается методом конечных разностей в двумерной цилиндрической геометрии (предполагалась симметрия относительно оси OZ) в многослойной области. Генератор сеток позволяет формировать неравномерные разностные сетки в каждой подобласти так, чтобы в местах наибольшего нагрева и контактных границ между подобластями пространственный шаг был достаточно малым, а затем, по мере удаления от этих подобластей он плавно возрастает (по геометрической прогрессии).

Вопрос о значениях коэффициентов $c(\rho, T)$, $\kappa(\rho, T)$, $\chi(\rho, T)$ – является не вполне ясным. Так в [5], приводятся таблицы значений теплоемкости и теплопроводности в зависимости от температуры для соединения Ti_2O_3 , на

основе которого разрабатываются соединения BST, но нет данных непосредственно для BST-соединений, да и не ясно, - насколько приведенные данные будут подходить для случая тонких пленок. В [2] - не приведены значения этих физических параметров, что не позволило автору статьи непосредственно провести сравнительные расчеты. Возможно, эти данные - «know-how», что является дополнительным аргументом в пользу развития собственной программы численного моделирования экспериментов по лазерному отжигу.

В простейшем случае можно полагать, что теплоемкость металлов удовлетворяет закону Дюлонга-Пти, а теплопроводность слабо меняется от температуры. Тогда решается квазилинейное двумерное уравнение теплопроводности. В более общем случае значения задаются в виде линейной интерполяции табличных данных. При этом, поскольку

$c(T) = \frac{\partial E}{\partial T}$, где E- есть удельная внутренняя энергия, то она представляется

в виде квадратичной функции от температуры. В программе имеется возможность учесть и другие модели. В том случае, когда температура превосходит 3000°K, полагается, что вещество превращается в идеальный газ. Затраты энергии на сублимацию вещества пока не учтены.

Для нахождения коэффициента поглощения В.Д. Зворыкин с помощью спектрометра измерил пропускание тонких пленок с толщиной 150 и 300 нм, нанесенных на прозрачную подложку. Пропускание составило приблизительно 6% в первом случае и 0.15% - во втором для длины волны

$\lambda=0,248$ мкм. Таким образом, ультрафиолетовое излучение эффективно поглощается в TBS- пленке и значение коэффициента поглощения приближенно равно $\chi \approx 10^{+7} \text{ м}^{-1}$.

2. Результаты численных расчетов.

С помощью программы «ТЕПОЛ» было сделано три серии расчетов, моделирующих облучение и распространение тепла в многослойных образцах. Теплоемкость в расчетах была задана в виде таблицы из [5]. Параметры лазерного импульса соответствовали установке «ГАРПУН», то есть длительность импульса 100 нс, трапециидальная временная форма с моментами времени при основаниях 0., 20, 80 и 100 нс при длине волны излучения $\lambda=0,248$ мкм. Пятно фокусировки представляло из себя круг с радиусом 0,5 см.

В первой серии энерговклад составлял $2,56 \text{ Дж/см}^2$, что приблизительно соответствовало тем значениям, которые были реализованы в экспериментах [3]. Расчетная область имела размеры $0Z \times 0R = 0,07 \times 2$ см и состояла из трех слоев вдоль направления 0Z: верхний слой – тонкая BST- пленка толщиной 600 нм (с плотностью $3.96 \times 10^3 \text{ кг/м}^3$), далее платиновая подложка толщиной 50 нм и плотностью $21.45 \times 10^3 \text{ кг/м}^3$ и, наконец, кварцевое стекло толщиной 600 мкм и плотностью $2.25 \times 10^3 \text{ кг/м}^3$.

На рис. 1а показано распределение температуры (изолинии температуры) на момент времени 1 мкс. Нагретый слой представляет тонкую пленку

диаметром порядка 1 см и толщиной несколько сот микрометров даже к моменту времени в 10^4 раз превосходящей длительность лазерного импульса. На рис. 1b – значения температуры вдоль оси OZ на моменты времени 0.1 и 1 мкс. мкс.

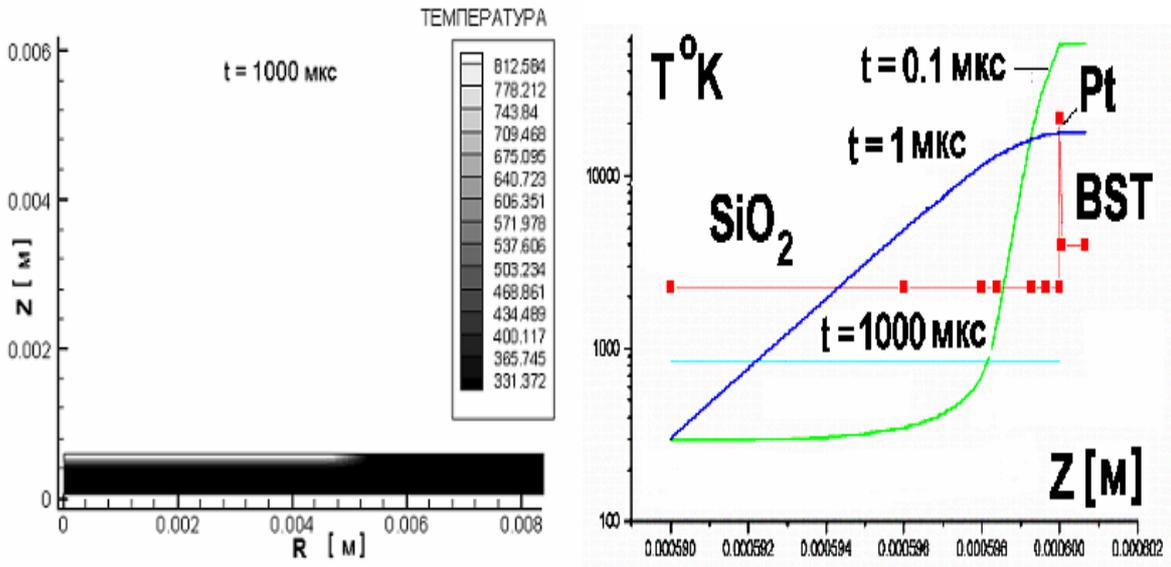


Рис.1. Изолинии температуры на момент времени 1 мкс (а).
 Распределение температуры вдоль оси OZ на моменты времени 0,1 и 1 мкс. Линия с «квадратиками» показывает плотности материалов в образце.

Видно, что во время действия лазерного импульса температура достигает очень больших величин (более 5000 градусов!). Ясно, что в этом случае внешние слои образца будут испаряться и разлетаться (что пока что не учитывается в программе). Поэтому значения температуры в расчете получились завышенными.

Во второй серии расчетов энерговклад был понижен на порядок величины и составлял $0,256 \text{ Дж/см}^2$. На рис.2 показаны распределения температуры к моментам времени 100 нс (конец лазерного импульса) и 1 мкс.

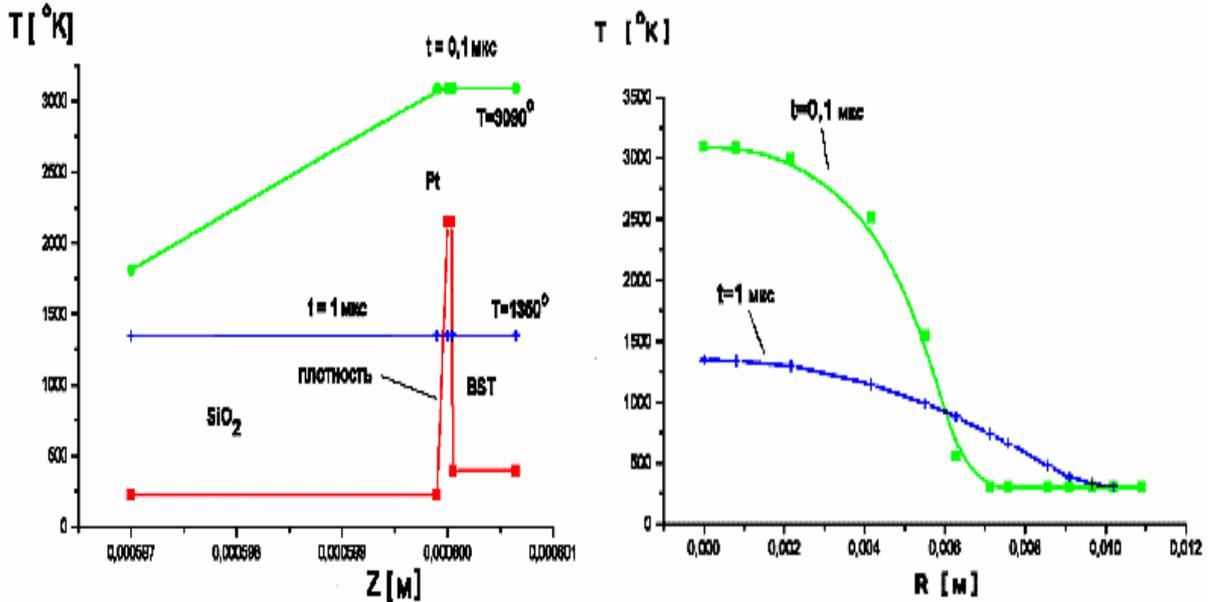
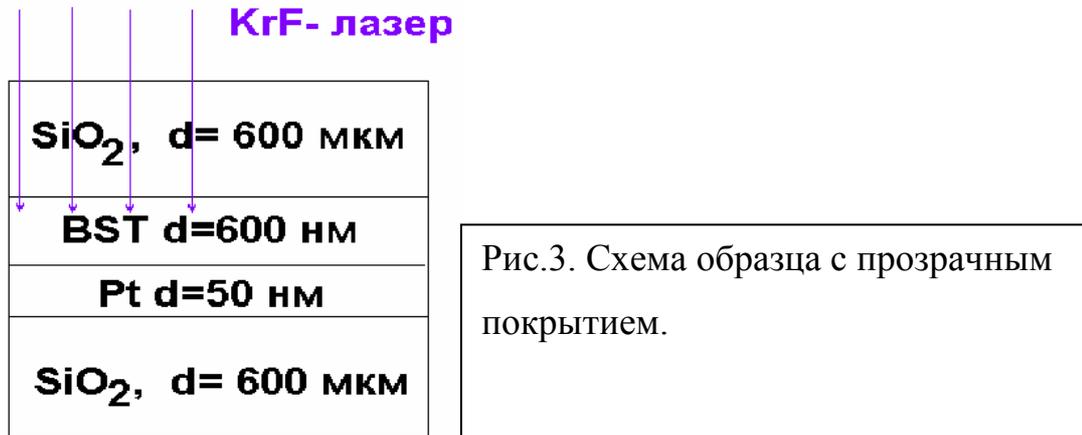


Рис.2. Распределения температуры вдоль оси OZ на моменты времени 0.1 и 1 мкс при энерговкладе $0,256 \text{ Дж/см}^2$ (а). Распределение температуры вдоль радиуса на поверхности образца в моменты времени 0.1 и 1 мкс.

В этом случае температуры заметно ниже, чем в первой серии. Тем не менее, из-за больших термических напряжений возможно появление отколов и деформаций в керамических пленках. Поэтому в третьей серии расчетов рассматривалась следующая конструкция образца (см. рис.3): снаружи помещается прозрачный слой. Это может быть стекло или вода. Лазерное излучение проходит через этот слой и поглощается в слое BST.

Дополнительный слой выполняет двоякую функцию, - он снижает тепловые нагрузки за счет распространения тепла в двух направлениях и уменьшает опасность откола пленки BST.



На рис.4а,b показаны распределения температуры в слое BST на моменты времени 0,1 и 1 мкс.

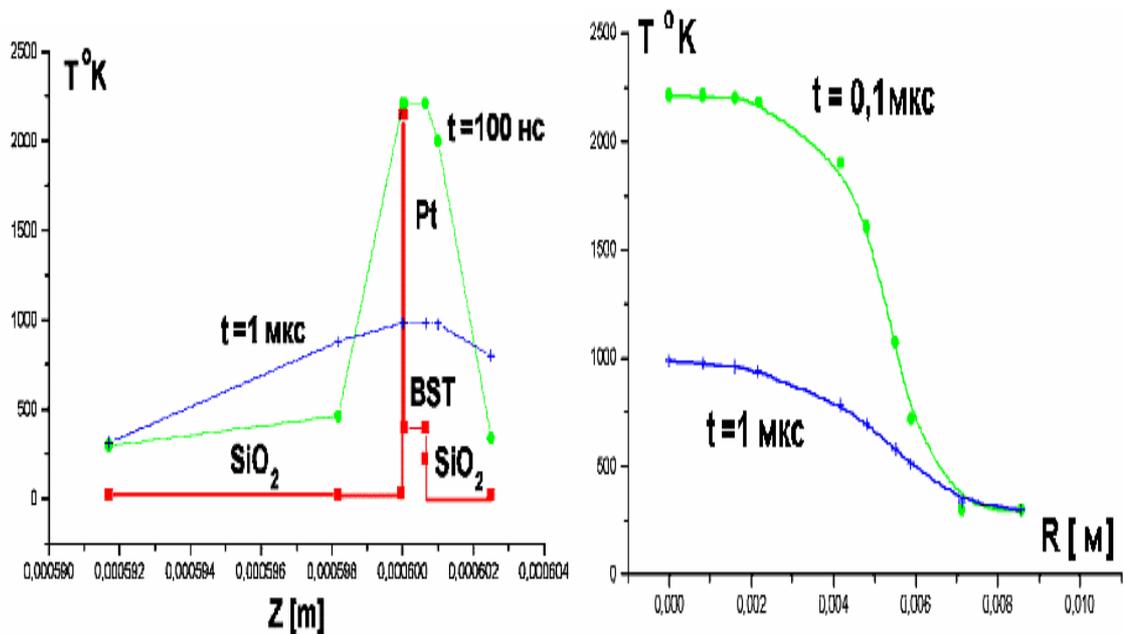


Рис.4. Распределения температуры вдоль оси OZ на моменты времени 0,1 и 1 мкс (а); распределения температуры вдоль радиуса в TBS-слое на те же моменты времени (б).

Заключение.

В работе представлено описание программы и результаты двумерных численных расчетов по облучению тонких многослойных пленок. Получены температурные поля в зависимости от времени для двух случаев энергии в лазерном импульсе. Предложено использовать прозрачное покрытие для снижения теплового напряжения и опасности откола TBS-слоя.

Автор выражает благодарность В.Д. Зворыкину за помощь в работе, студентке МГУ Лебо А.И. за помощь в проведении расчетов и оформлении статьи, а также всем участникам семинара профессора Сигова А.С. (факультет электроники, МИРЭА) за полезные обсуждения.

Список литературы.

1. O. Baldus, W. Krasser, S.Hoffmann, R. Waser, E.Kreutz. Laserannealing Studies of Barium Strontium Titanate Thin Films using Short Laser Pulses. *Integrated Ferroelectrics*, (2000), 30, pp.129-138
2. N. Pirch, O. Baldus, R. Wasser, E. Kreutz. Numerical investigations of laser-induced crystallization and stress development in phase changes of electroceramic materials. *Nanotech*, (2002), 2, pp.340-343.
3. K.A. Vorotilov, V.D. Zvorykin, I.G. Lebo, A.S. Sigov. Laser annealing of thin-film ferroelectric heterostructures. *J. of Russian Laser Research*, (2004), 25,N3,pp.234-238

4. A.B. Iskakov, I.G. Lebo, V.F. Tishkin. 2D numerical simulations of the interaction of high-power laser pulses with plane targets using the “ATLANT-C” Lagrangian code. J. of Russian Laser Research, 21, N3, pp.247-263
5. Справочник «Физические величины», Энергоатомиздат, М., 1991