

Vilniaus universiteto  
Fizikos fakulteto  
Lazerinių tyrimų centras

Laura Tauraitė

SILICIO PAVIRŠIAUS AMORFIZAVIMAS FEMTOSEKUNDINIAIS ŠVIESOS IMPULSAIS

Magistrantūros studijų baigiamasis darbas

Lazerinių technologijų  
studijų programa

Studentė

Darbo vadovas

Centro direktorė

Laura Tauraitė

Dr. Prof. Domas Paipulas

Dr. Dalia Kaškelytė

Vilnius 2024

## Turinys

|   |           |
|---|-----------|
| <b>1. Įžanga.....</b>   | <b>3</b>  |
| <b>2. Teorinis įvadas .....</b>                                     | <b>4</b>  |
| 2.1. Ultratrumpųjų impulsų sąveika su puslaidininkiais .....        | 4         |
| 2.2. Ultratrumpųjų impulsų sąveika su siliciu .....                 | 5         |
| <b>3. Tyrimo metodika .....</b>                                     | <b>8</b>  |
| 3.1. Eksperimento schema .....                                      | 8         |
| 3.2. Eksperimente naudoti bandiniai .....                           | 9         |
| 3.3. Fokusuoto Gauso pluošto skersmens ant bandinio matavimas ..... | 9         |
| 3.4. Pažeidimų skersmens matavimas .....                            | 11        |
| <b>4. Tyrimo rezultatai ir jų aptarimas .....</b>                   | <b>12</b> |
| 4.1. Impulsų voros parametrų įtaka silicio amorfizacijai .....      | 12        |
| 4.2. Bangos ilgio įtaka silicio amorfizacijai .....                 | 17        |
| 4.3. Silicio amorfizacijos skaitmeninis modeliavimas .....          | 20        |
| <b>5. Pagrindiniai rezultatai ir išvados .....</b>                  | <b>28</b> |
| <b>6. Literatūra .....</b>  | <b>29</b> |
| Santrauka .....   | 32        |
| Summary.....  | 33        |

## 1. Įžanga

Tiesioginis lazerinis rašymas ultratrumpaisiais impulsais yra jau seniai vykdomas procesas ir vienas universaliausių būdų apdirbti bandinio paviršių ar tūrį, modifikuojant jo optines, chemines arba mechanines savybes [1-3]. Ultratrumpieji impulsai yra vertinami dėl tikslumo, minimalių šiluminių efektų medžiagoje aplink poveikio vietą bei aukšto intensyvumo, leidžiančio efektyviai apdirbti ne tik metalus ir puslaidininkius, bet ir dielektrikus, skaidrias medžiagas [4].

Silicis yra viena svarbiausių medžiagų technologijų pramonėje, todėl šis elementas jau kelis dešimtmečius yra itin patrauklus mokslinių tyrimų subjektas [5]. Silicį apdirbant ultratrumpaisiais impulsais, bandinyje vyksta įvairūs procesai prieš pasiekiant abliacijos ribą – oksidacija, lydymasis, amorfizacija ir rekristalizacija [6-8]. Silicio amorfizacija lazeriniais impulsais vyksta išsilydžiusiai medžiagai vėstant sparčiau nei juda rekristalizacijos frontas. Tuomet silicio gardelė neturi pakankamai laiko atstatyti tvarkingą kristalinę gardelę ir lieka amorfinės būsenos [9].

Amorfinės būsenos silicis pasižymi didesniu lūžio rodikliu ir atsparumu cheminiam ėsdinimui lyginant su kristalinės būsenos siliciu, todėl gali būti pritaikomas litografijai be ekspozicinės kaukės [10] arba bangolaidžių gamyboje [11]. Deja, dabar pasiekiamas amorfinio silicio sluoksnis naudojant impulsus yra per plonas, kad būtų pritaikomas telekomunikacijose naudojamiems bangos ilgiams [12]. Silicio amorfizacija priklauso nuo daugelio parametru, įskaitant silicio optines savybes, spinduliuotės bangos ilgį, impulsų energiją, skaičių ir trukmę. Visų parametru įtaka silicio modifikacijai dar nėra pilnai iširta.

Šio darbo tikslas – iširti bangos ilgio ir ultratrumpųjų impulsų voros parametru įtaką silicio amorfizacijai femtosekundiniais impulsais.

Tikslui įgyvendinti iškeltos užduotys:

- Eksperimentiškai iširti amorfinio silicio sluoksnio formavimosi sąlygas ir tendencijas, keičiant impulsų voros parametrus ir naudojamos spinduliuotės bangos ilgį, skirtingos kristalinės orientacijos bandiniams.
- Skaitmeninio modeliavimo pagalba sumodeliuoti silicio atsaką į femtosekundius impulsus ir palyginti modeliavimo rezultatus su eksperimentu.

## 2. Teorinis įvadas

### 2.1. Ultratrumpųjų impulsų sąveika su puslaidininkiais

Optiniam terpės pažeidimui yra būtinas krentančios spinduliuotės fotonų energijos perdavimas, jų sugertis. Metaluose valentinė ir laidumo juosta persidengia, todėl elektronai iš dalies užpildo laidumo juostą. Kiekvienas tokio laisvojo elektrono sugertas fotonas padidina jo energiją ir perkelia ją į aukštesnį lygmenį laidumo juostoje. Kadangi lygmenys laidumo juostoje yra išsidėstę beveik ištiesai, tai laisvieji elektronai gali sugerti fotonus nuo labai mažos energijos, iki tokios, kuri atitinka laidumo juostos plotį [13].

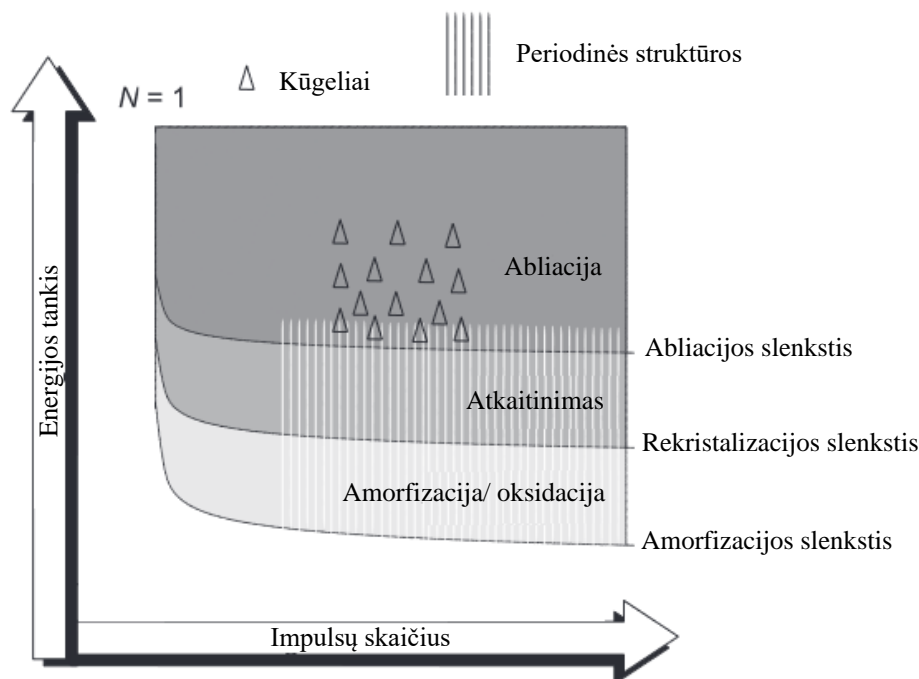
Puslaidininkiuose laidumo juosta yra atsiskyrusi nuo valentinės, tačiau draustinė juosta yra pakankamai siaura. Dėl šios priežasties puslaidininkiuose taip pat pasireiškia laisvųjų krūvininkų sugertis, nors laisvųjų elektronų skaičius yra mažas lyginant su metalais. Kitaip nei metaluose, puslaidininkiuose vyksta tarpjuostinė sugertis. Krentančio fotono energijai viršijus draustinės juostos tarpą, jis gali būti sugertas, o sužadintasis elektronas pereina į laidumo juostą iš valentinės, kurioje lieka teigiamo krūvio skylė [13].

Naudojant ultratrumpuosius impulsus, priklausomai nuo krentančios spinduliuotės energijos tankio, paveiktoje bandinio vietoje gali vykti skirtingi procesai [14]:

- Esant mažam krentančios spinduliuotės energijos tankiui, sugertos energijos neužtenka suardyti bandinio kristalinės gardelės ir ją išlydyti. Sužadinti elektronai relaksuoja perduodami didžiąją savo sugertos energijos dalį gardelei per Auger rekombinaciją, kurios metu vienos elektrono-skylės poros rekombinacijos išskirta energija yra perduodama kitai porai.
- Medžiagos gardelei sugėrus pakankamai energijos yra pasiekama lydymosi temperatūra, o, impulsui pasibaigus, išsilydžiusi medžiaga atvėsta ir sukietėja. Priklausomai nuo vėsimo spartos, sukietėjusi medžiaga gali persikristalizuoti ir grįžti į pradinę būseną arba sukietėti amorfinėje būsenoje. Toks šiluminis lydymosi procesas dominuoja naudojant ilgesnius nei 20 ps trukmės impulsus [15].
- Pakėlus krintančios spinduliuotės energijos tankį, bandinys gali būti išlydomas ne dėl energijos perdavimo elektronų relaksacijos metu. Esant intensyviai spinduliuotei, bandinyje sugeneruojama elektronų-skylių plazma, dėl kurios yra nutraukiami kristalinę gardelę jungiantys kovalentiniai ryšiai ir bandinys išsilydo nešiluminiu būdu [16]. Šis lydymosi procesas įvyksta per mažiau nei 1 ps, daug greičiau nei šiluminis lydymas, trunkantis kelias pikosekundes.
- Pasiekus tam tikrą energijos tankio slenkstį, prasideda medžiagos abliacija, kai medžiaga užverda ir yra išgarinama nuo bandinio paviršiaus.

## 2.2. Ultratrumpųjų impulsų sąveika su siliciu

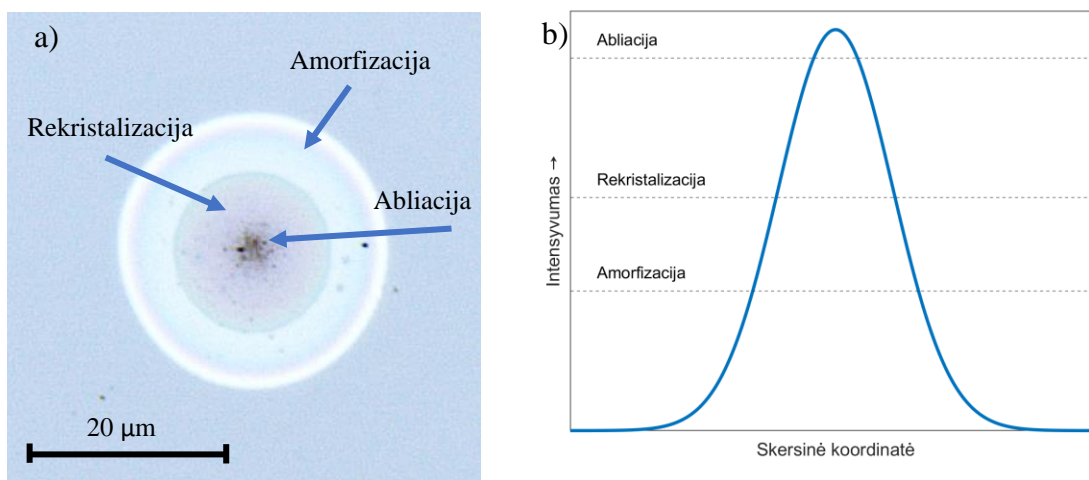
Silicį, kaip ir kitus puslaidininkius, veikiant ultratrumpaisiais impulsais, medžiagoje vyksta įvairūs procesai, turintys savo slenkstines energijos tankio vertes: lydymasis, amorfizacija, rekristalizacija ir abliacija. Taip pat, darant pažeidimus keliais impulsais, silicio paviršiuje galima gauti ir sudėtingesnes periodines ar kūgines struktūras, kurios taip pat turi savo slenkstines energijos tankio vertes (1 pav.) [17-19].



1 pav. Femtosekundiniais impulsais paveikto silicio paviršiaus skirtingų pažeidimų morfologijos schema. Adaptuota pagal [6].

Slenkstinės skirtingų būsenų vertės priklauso nuo eksperimente naudojamo bandinio optinių savybių ir spinduliuotės parametrų:

- Jeschke grupė [20] gavo, jog abliacijos slenkstis naudojant 25 ir 400 fs impulsus yra apie  $0,17 \text{ J/cm}^2$  ir  $0,28 \text{ J/cm}^2$  atitinkamai (Ti:safyro lazeris,  $\lambda = 780 \text{ nm}$ ).
- Wang grupė [21] palygino ilgesnius impulsus ir rado, jog naudojant 10 ps, 10 ns ir 1 ms trukmės impulsus, abliacijos slenkstis yra  $0,7 \text{ J/cm}^2$ ,  $4,8 \text{ J/cm}^2$  ir  $127,2 \text{ J/cm}^2$  atitinkamai (Nd:YAG lazeris,  $\lambda = 1064 \text{ nm}$ ).
- Izawa grupė [22] ištyrė amorfizacijos slenksčio kitimą keičiant bangos ilgį. Naudojant 400 nm ir 800 nm bangos ilgio impulsus gauti amorfizacijos slenksčiai  $0,06 \text{ J/cm}^2$  ir  $0,18 \text{ J/cm}^2$  atitinkamai (Ti-safyro lazeris,  $\tau_{imp} = 100 \text{ fs}$ ), o naudojant 1560 nm bangos ilgio impulsus gautas amorfizacijos slenkstis -  $0,56 \text{ J/cm}^2$  (erbiu legiruotas šviesolaidinis lazeris,  $\tau_{imp} = 870 \text{ fs}$ ).



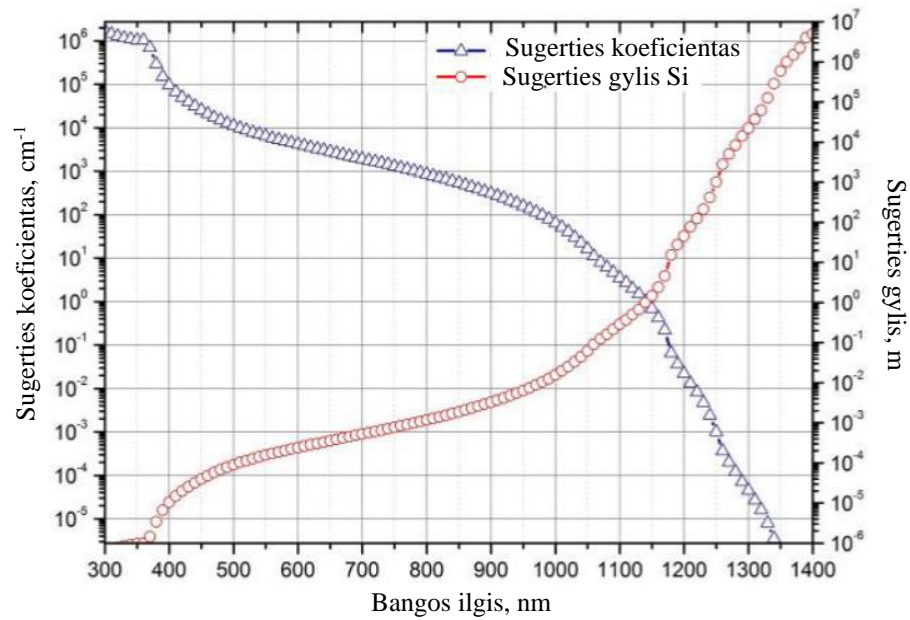
2 pav. (a) Silicio bandinio paviršiuje femtosekundiniu impulsu padaryto pažeidimo nuotrauka su nurodytomis skirtingų modifikacijų sritimis. Pažeidimas padarytas „CARBIDE“ lazeriu ( $\lambda = 1030 \text{ nm}$ ,  $\tau_{imp} = 112 \text{ fs}$ ,  $N = 1$ ,  $F = 0,8 \text{ J/cm}^2$ ); (b) aiškinamasis Gauso pluošto intensyvumo profilio grafikas su pažymėtais modifikacijų slenksčiais.

Tipinė Gauso pluoštu gauto pažeidimo ant silicio paviršiaus morfologija yra pavaizduota 2 pav. (a). Nors pažeidimas paveikslėlyje yra padarytas Gauso pluoštu, jis nėra tolydus, žiedo viduje yra prasidėjusi abliacija, aplink matosi persikristalizavusi zona, kurią supa šviesesnis išorinis žiedas, sudarytas iš amorfinės būsenos silicio. Šis išorinis žiedas susidaro vykstant amorfizacijos ir oksidacijos procesams, bet kadangi šių procesų slenkstinės vertės yra labai arti viena kitos, atskirų zonų praktiškai neįmanoma atskirti [6]. Amorfinio silicio lūžio rodiklis yra didesnis nei kristalinio silicio, pavyzdžiui, artimųjų infraraudonųjų bangos ilgių spektro dalyje amorfinio silicio lūžio rodiklis yra maždaug 0,3 didesnis nei kristalinio silicio [11]. Dėl didesnio lūžio rodiklio amorfinis silicis pasižymi didesniu atspindžiu nei kristalinis silicis, todėl yra aiškiai matomas.

Yra priimta, jog amorfinis silicis susidaro išlydytos ir kietos medžiagos sandūros frontui judant greičiau nei tam tikras kritinis greitis, kuris gali būti nuo kelių iki kelių dešimčių metrų per sekundę, priklausomai nuo silicio gardelės kristalinės orientacijos [23,24]. Jeigu šis kietėjimo frontas juda lėčiau, gardelė turi pakankamai laiko persiorganizuoti į tvarkingą kristalinę arba polikristalinę struktūrą. Lėtesnis kietėjimo fronto greitis yra pasiekiamas naudojant didesnio energijos tankio impulsus, nes tuomet pažeidimo vieta yra sugėrusi daugiau energijos, kuriai reikia ilgesnio laiko difunduoti.

Amorfinio silicio sluoksnio storis priklauso nuo naudojamos spinduliuotės bangos ilgio, nes skirtingi bangos ilgiai į bandinio tūrį prasiskverbia nevienodą atstumą [22,25]. Skverbties gylis priklauso nuo silicio sugerties spektro (3 pav.). Iš jo galima matyti, jog silicis yra neskaidrus UV ir regimojoje spektro srityje, o artimojoje infraraudonojoje srityje praskaidrėja. Sugerties gylis yra

atvirkščiai proporcingas sugerties koeficientui, tai reiškia, kad UV ir regimojoje srityje spinduliuotė į medžiagą prasiskverbia mažiau nei infraraudonųjų bangos ilgių srityje. Tai reiškia, kad naudojant trumpesnius bangos ilgius, pačiame silicio paviršiuje yra sugerama daugiausiai krintančio pluošto energijos.



3 pav. Silicio sugerties koeficiento ir sugerties gylio spektras. Paveikslėlis adaptuotas iš [26].

### 3. Tyrimo metodika

Silicio amorfizacija priklauso nuo daugelio parametru, kuriu įtaka dar nėra pilnai žinoma. Dėl šios priežasties buvo išsikelti darbo tikslai eksperimentiškai ir skaitmeninio modeliavimo pagalba ištirti impulsu voros parametru ir naudojamos spinduliuotės bangos ilgio įtaką silicio amorfizacijai.

Pirmojoje darbo dalyje silicio bandiniai buvo veikiami paleidžiant vieną arba kelis impulsus į tą pačią vietą. Keičiant impulsu energiją, buvo tiriama impulsu skaičiaus bei trukmės tarp atskiru impulsu įtaka silicio amorfizacijai.

Antrojoje dalyje bandiniai buvo veikiami vienu impulsu, trimis lazerio spinduliuotės harmonikomis (1030nm, 515nm ir 343nm bangos ilgiu spinduliuote). Keičiant energijos tanki, buvo tiriama skirtingu bangos ilgiu įtaka silicio amorfizacijai.

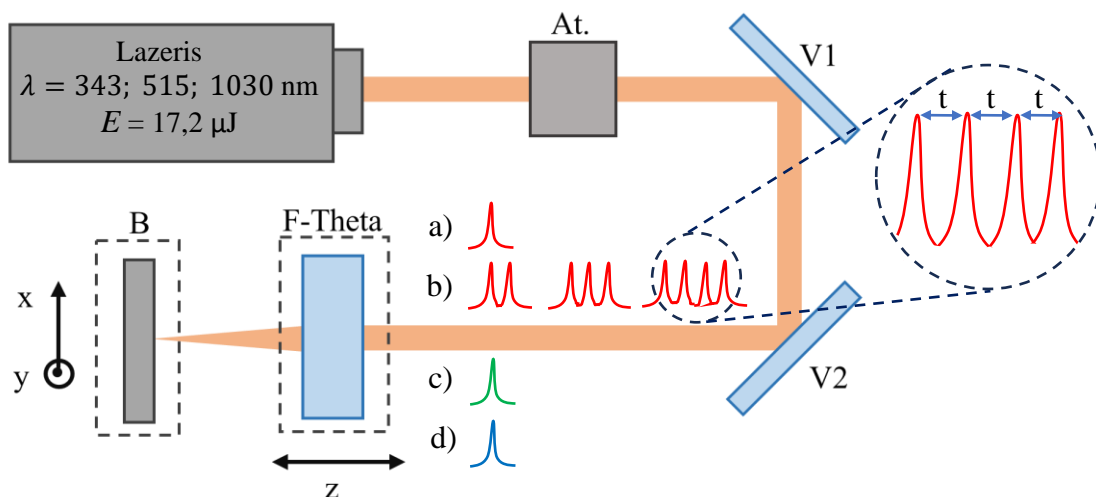
Trečiojoje darbo dalyje skaitmeninio modeliavimo pagalba buvo analizuojami femtosekundiniais impulsais gauti pažeidimai lyginant rezultatus su eksperimentiniais rezultatais.

#### 3.1. Eksperimento schema

Eksperimento metu pažeidimai ant silicio bandiniu buvo daromi naudojant 4 pav. pavaizduotą lazerinę sistemą. Principinė schema buvo vienoda visiems eksperimentams, tik pagal naudojamą bangos ilgi buvo keičiami optiniai elementai, veikiantys tam bangos ilgiui. Šioje sistemoje buvo naudojamas femtosekundinis „CARBIDE“ lazeris (UAB „Light Conversion“). Lazerio impulsu trukmė nuo 211 fs iki 10 ps, maksimali galia 40 W, pasikartojimo dažnis iki 1 Mhz. Iš lazerio išeina tiesinės poliarizacijos Gauso pluoštas, kurio kokybė yra  $M^2 = 1,2$  esant 1030 nm ir  $M^2 = 1,3$  esant 515 nm ir 343 nm bangos ilgiams. Šiame darbe bandiniai buvo veikiami naudojant 211 fs trukmės impulsus esant 1030 nm bangos ilgiui ir 300 fs trukmės impulsus - 515 nm ir 343 nm bangos ilgiams. Pluošto galia buvo valdoma motorizuotu atenuatoriumi. Išėjęs pluoštas buvo sufokusuotas ant bandinio paviršiaus F-Theta lęšiu ( $f = 100$  mm) pritvirtintu prie z ašimi judančios sistemos „ANT 130“ (Aerotech Ltd.). Bandinys – silicio plokštelė – buvo padedami ant staliuko „ANT 180“ (Aerotech Ltd.), galinčio judėti  $xy$  kryptimis. Eksperimento automatizavimas buvo atliekamas programa „DMC“ (UAB „Direct Machining Control“).

Šiame darbe naudoti 2 skirtingi režimai padaryti pažeidimui bandinyje: pažeidimas darytas vienu 1030 nm, 515 nm ir 343 nm bangos ilgio impulsu (4 pav. a,c,d) arba pažeidimas darytas 1030 nm bangos ilgio impulsu vora, sudaryta iš 2-4 impulsu, vienas nuo kito atskirtu 400 ps arba 16 ns laiko tarpu (4 pav. b). Dėl tikslumo, naudojant kiekvieną parametru ir energijos tankio kombinaciją, buvo padaryta po 3 pažeidimus.





4 pav. Principinė eksperimento optinė schema: femtosekundinis „CARBIDE“ lazeris; motorizuotas atenuatorius; dielektriniai veidrodžiai V1 ir V2; F-Theta lęšis ( $f = 100$  mm) pluošto fokusavimui ant  $z$  ašimi judančios sistemos; bandinys padėtas ant  $xy$  ašimis judančio staliuko. Darbe naudoti režimai: (a) 1030 nm, vienas impulsas; (b) 1030 nm, impulsų vora, sudaryta iš 2-4 impulsų, atskirtų  $t = 400$  ps arba  $t = 16$  ns; (c) 515 nm, vienas impulsas; (d) 343 nm, vienas impulsas.

### 3.2. Eksperimente naudoti bandiniai

Eksperimentinėje darbo dalyje buvo naudoti 6 skirtingi silicio bandiniai, kurie yra pateikti 1 lentelėje.

1 lentelė. Eksperimente naudotų bandinių parametrai.

| Bandinio tipas                          | Gardelės orientacija  | Savitoji varža, $\Omega\text{cm}$ |
|---|-----------------------|-----------------------------------|
| Nelegiruota silicio plokštelė           | $\langle 100 \rangle$ | 100 - 3000                        |
| N-tipo silicio plokštelė (P priemaišos) | $\langle 100 \rangle$ | $10^{-3}$ - 40                    |
| P-tipo silicio plokštelė (B priemaišos) | $\langle 100 \rangle$ | $10^{-3}$ - 40                    |
| Nelegiruota silicio plokštelė           | $\langle 111 \rangle$ | 100 - 3000                        |
| N-tipo silicio plokštelė (P priemaišos) | $\langle 111 \rangle$ | $10^{-3}$ - 40                    |
| P-tipo silicio plokštelė (B priemaišos) | $\langle 111 \rangle$ | $10^{-3}$ - 40                    |

### 3.3. Fokusuoto Gauso pluošto skersmens ant bandinio matavimas

Spinduliuotės energijos tankiui apskaičiuoti yra būtina žinoti ant bandinio krentančio pluošto skersmenį. Šiame darbe buvo naudotas Gauso pluoštas, kurio skersmuo ant bandinio paviršiaus buvo apskaičiuotas pagal metodą aprašytą Liu [27].

Naudojant Gauso pluoštą, jo energijos tankio erdvinis skirstinys yra proporcingas šiuo pluoštu daromų pažeidimų skersmenų augimui. Sąryšis tarp pažeidimo skersmens  $D$  ir impulso energijos tankio  $F$ :

$$D^2 = 2\omega_0^2 \ln\left(\frac{F}{F_{sl}}\right) \quad (1)$$

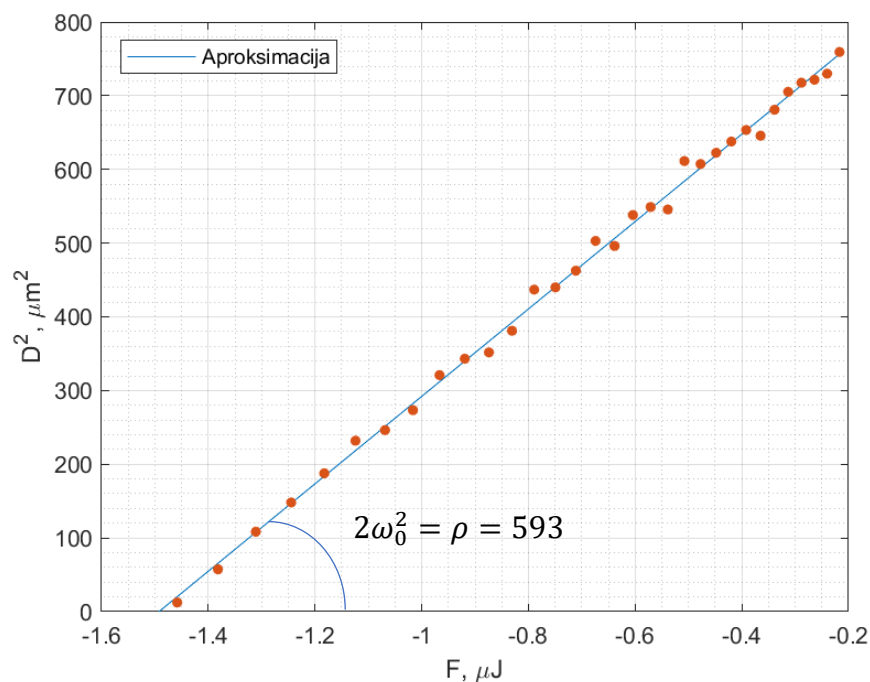
čia  $F_{sl}$  - pažeidimo slenksčio energijos tankio vertė,  $\omega_0$  - pluošto radiusas.

Eksperimentiškai (1) sąryšis yra taikomas nubrėžiant priklausomybės  $D^2$  nuo  $\ln(F)$  grafiką. Šią priklausomybę aproksimavus tiese, tos tiesės polinkis  $\rho$  bus lygus  $2\omega_0^2$ :

$$2\omega_0^2 = \rho \rightarrow \omega_0 = \sqrt{\frac{\rho}{2}} \quad (2)$$

Šiame eksperimente 1030 nm bangos ilgio impulsais padarytų pažeidimų aproksimacija yra pateikta 5 pav. Pagal (2) formulę ir apskaičiuotą aproksimuotos tiesės polinkį ( $\rho = 593$ ), pluošto skersmuo bandinio paviršiuje:

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{\rho}{2}} = \sqrt{\frac{593,03}{2}} = 17,2 \mu\text{m} \quad (3)$$



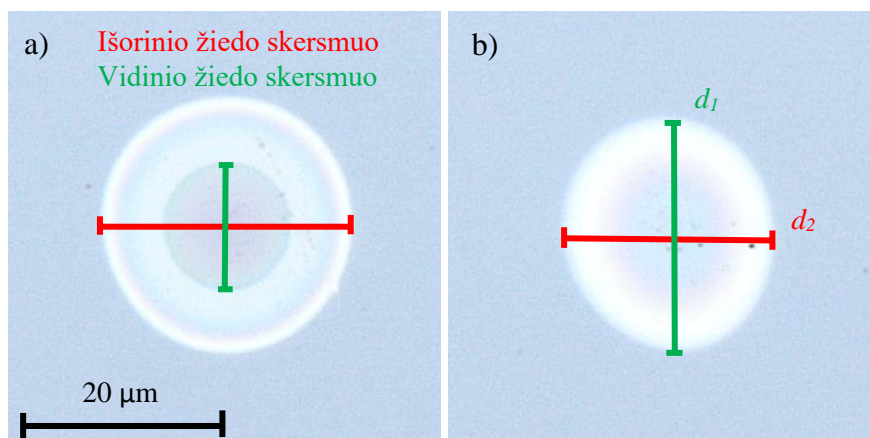
5 pav. 1030 nm bangos ilgio impulsais ant <111> nelegiruoto silicio bandinio padarytų pažeidimų skersmenų  $D$  kvadratų priklausomybė nuo impulsų energijos tankio  $F$  logaritminėje skalėje.

Pagal aprašytą metodą buvo apskaičiuoti pluošto diametrai bandinio paviršiuje eksperimente naudotiems bangos ilgiams: esant 1030nm bangos ilgio spinduliuotei, pluoštas buvo sufokusuotas į 34,2  $\mu\text{m}$  dėmę (ties  $1/e$ ), 515nm – 21,2  $\mu\text{m}$ , 343nm – 21,8  $\mu\text{m}$ .

### 3.4. Pažeidimų skersmens matavimas

Pažeidimų nuotraukos buvo padarytos optiniu mikroskopu LEXT OLS5100 (EVIDENT) naudojant 100x didinantį objektyvą ir apdorotos „imageJ“ programa. 1030 nm bangos ilgio impulsais gautų pažeidimų išorinio žiedo bei persikristalizavusios centrinės zonos skersmenys buvo išmatuoti pagal 6 pav. (a). Dėl prastesnės pluošto kokybės 515 nm ir 343 nm bangos ilgių spinduliuote gauti pažeidimai nėra visiškai simetriškos formos, todėl diametrai buvo matuoti pagal 6 pav. (b) pavaizduotą schemą. Pagal pamatuotus skersmenis, pažeidimo skersmenys  $D$  buvo apskaičiuojami pagal formulę:

$$D = (d_1 + d_2)/2. \quad (4)$$



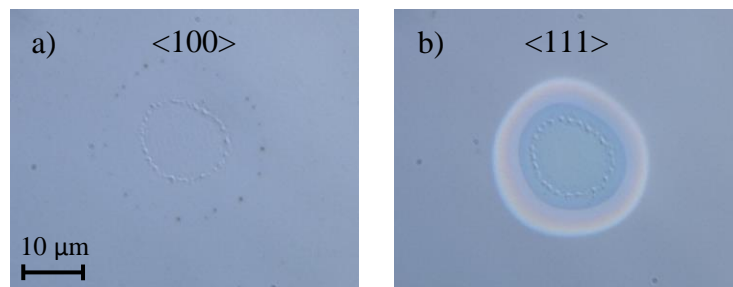
6 pav. Pažeidimo vaizdas su nurodytais pažeidimo skersmenimis: (a) 1030 nm bangos ilgio režime; (b) 515 ir 343 nm bangos ilgių režimuose.

## 4. Tyrimo rezultatai ir jų aptarimas

### 4.1. Impulsų voros parametrų įtaka silicio amorfizacijai

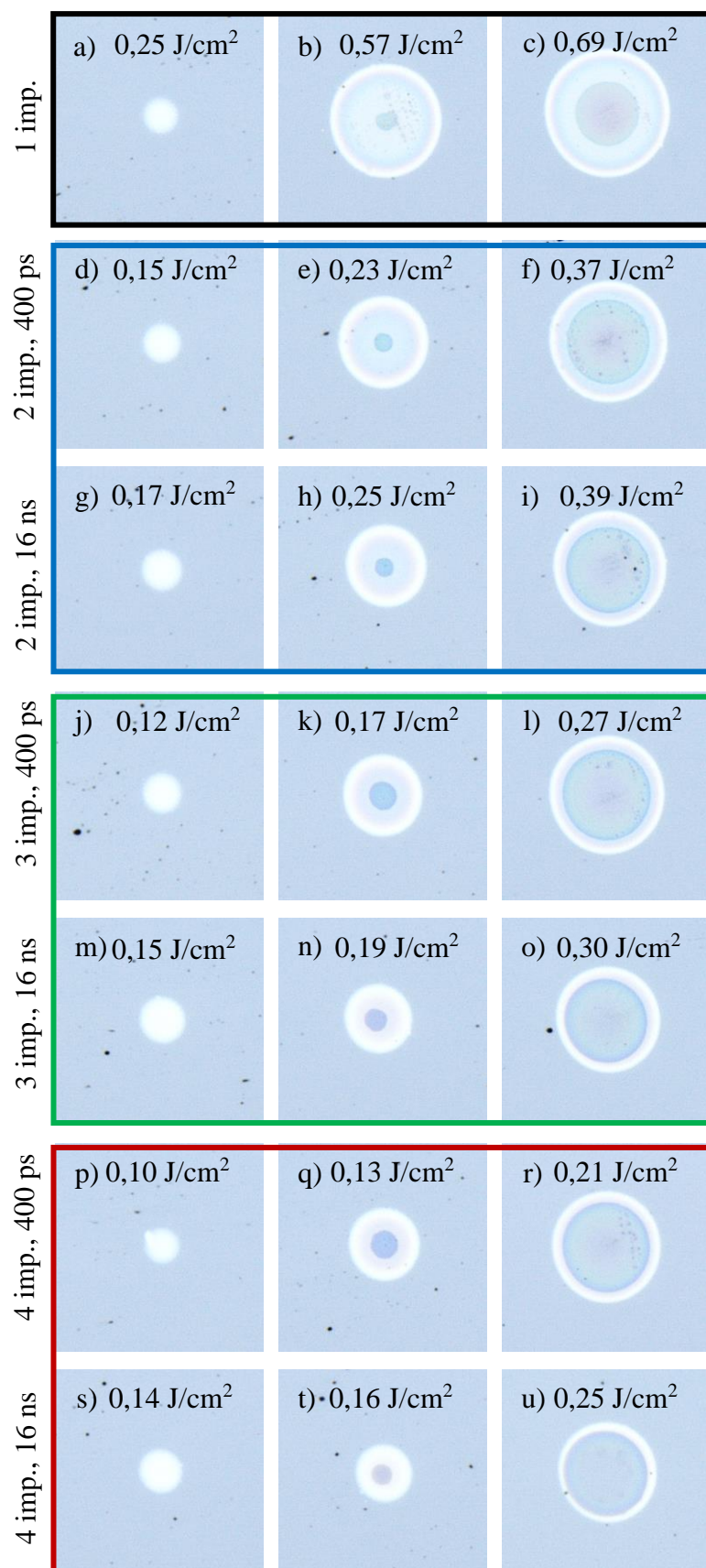
Pirmojoje darbo dalyje buvo tiriama impulsų skaičiaus bei trukmės tarp atskirų impulsų įtaka silicio bandinių amorfizacijai. Naudojant 4 pav. pateiktą optinę schemą ant visų silicio bandinių buvo padarytos pažeidimų matricos didinant impulsų energiją ir naudojant 1 impulsą arba 2-4 impulsų vorą, kurioje impulsai vienas nuo kito buvo atskirti 400 ps arba 16 ns - iš viso buvo padarytos 7 pažeidimų matricos. Vidutinė visos impulsų voros energija buvo keliami nuo pažeidimo slenksčio iki abliacijos slenksčio. Kaip minėta 3.2 skyrelyje, dėl tikslumo kiekviena energija buvo padaryta po 3 pažeidimus. Vidutiniai pažeidimų skersmenų nuokrypiai – 0,09  $\mu\text{m}$  išorinio žiedo skersmeniui ir 0,11  $\mu\text{m}$  vidinio žiedo skersmeniui. Darant pažeidimus keliais impulsais, energijos tankis buvo skaičiuojamas darant prielaidą, kad voroje energija tarp impulsų pasidalina po lygiai.

Ant  $\langle 100 \rangle$  orientacijos bandinių padarytų pažeidimų kontrastas buvo itin mažas (7 pav. a). Toliau šioje darbo dalyje buvo analizuojami tik pažeidimai ant  $\langle 111 \rangle$  orientacijos bandinių.



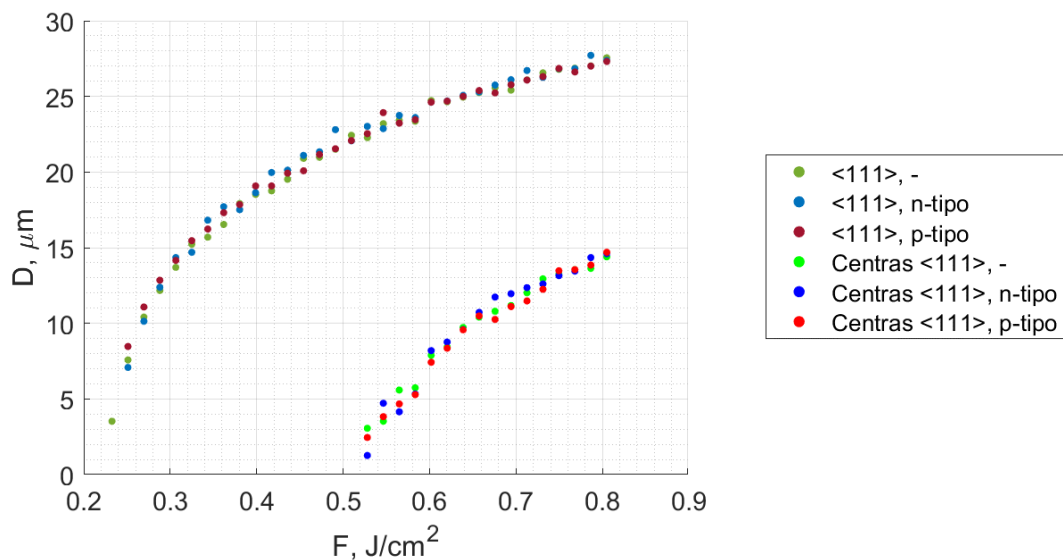
7 pav. Pažeidimų vaizdas ant p-tipo  $\langle 100 \rangle$  orientacijos bandinio (a) ir p-tipo  $\langle 111 \rangle$  orientacijos bandinio (b).  $\lambda = 1030 \text{ nm}$ ,  $F = 0,7 \text{ J/cm}^2$ .

Pažeidimų vaizdas didėjant spinduliuotės energijos tankiui yra pateiktas 8 pav. Kaip matoma iš nuotraukų, ant  $\langle 111 \rangle$  kristalinės orientacijos bandinių visų impulsų skaičiaus kombinacijų atveju pažeidimai seka įprastą eigą didėjant impulsų energijos tankiui – pasiekus pažeidimo slenkstį atsiranda amorfinės medžiagos sritis (8 pav. pirmas stulpelis), kuri plečiasi didinant impulso energiją, o pasiekus tam tikrą slenkstį srities centre atsiranda persikristalizavusi zona (8 pav. antras stulpelis). Toliau didėjant impulsų energijai, persikristalizavusi zona auga greičiau nei amorfinis žiedas, todėl esant dideliame energijos tankiui žiedas pasidaro siauras (8 pav. trečias stulpelis).



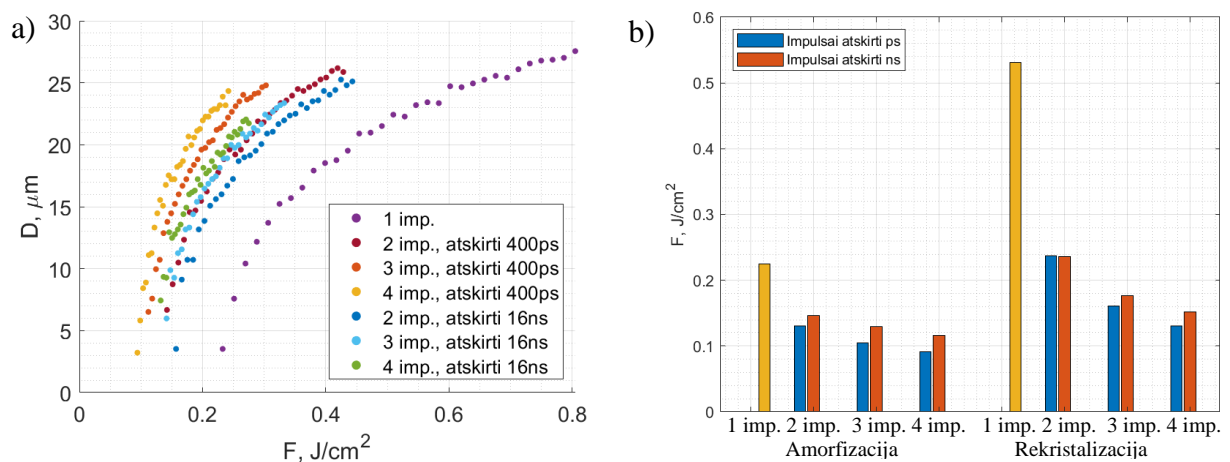
8 pav. Pažeidimų vaizdas trimis skirtingais pažeidimo etapais ant  $\langle 111 \rangle$  orientacijos nelegiruoto silicio bandinio: (a-c) 1 impulsas; (d-f) 2 impulsai, atskirti 400 ps; (g-i) 2 impulsai, atskirti 16 ns; (j-l) 3 impulsai, atskirti 400 ps; (m-o) 3 impulsai, atskirti 16 ns; (p-r) 4 impulsai, atskirti 400 ps; (s-u) 4 impulsai, atskirti 16 ns.

Analizuojant rezultatus buvo palygintos pažeidimų skersmenų priklausomybės nuo energijos tankio visiems trimis  $\langle 111 \rangle$  gardelės orientacijos bandiniams (nelegiruotas, n-tipo ir p-tipo), tačiau žymaus skirtumo tarp pažeidimų nebuvo pastebėta. Vienu impulsu gautų pažeidimų amorfinio žiedo ir persikristalizavusios centrinės zonos skersmenų priklausomybė nuo impulsų energijos tankio yra pateikta 9 pav.



9 pav. Vienu impulsu gautų pažeidimų išorinio žiedo ir persikristalizavusios centrinės zonos skersmenų  $D$  priklausomybė nuo impulsų energijos tankio  $F$ .

Pažeidimų skersmenų  $D$  priklausomybė nuo spinduliuotės energijos tankio  $F$  (a) bei amorfizacijos ir persikristalizavimo slenksčiai (b) ant  $\langle 111 \rangle$  nelegiruoto silicio bandinio yra pateikta 10 pav.

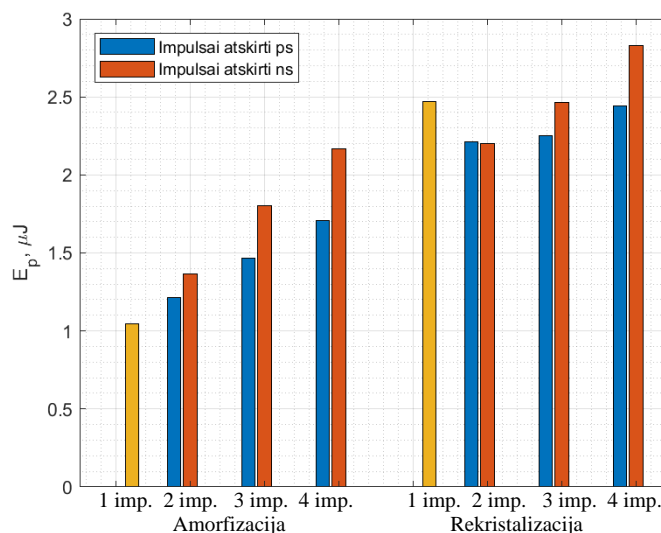


10 pav. Pažeidimų išorinio žiedo skersmens  $D$  priklausomybė nuo spinduliuotės energijos tankio  $F$  (a); amorfizacijos ir rekristalizacijos slenksčiai (b).  $\langle 111 \rangle$  orientacijos nelegiruoto silicio bandinys, naudojant 1030nm bangos ilgio impulsus.

Iš 10 pav. (a) matoma, jog naudojant vieną impulsą silicio pažeidimo slenkstinė energijos tankio vertė yra akivaizdžiai didžiausia, o didinant impulsų skaičių voroje, tolygiai mažėja. Taip pat, esant tam pačiam impulsų skaičiui, slenkstinė energijos tankio vertė yra mažesnė lyginant kai voros impulsai yra atskirti 400 ps nei kai voros impulsai yra atskirti 16 ns.

Tos pačios tendencijos matomos ir 10 pav. (b) grafike, kuriame taip pat yra matomas amorfizacijos intervalo (energijos tankių vertės virš pažeidimo slenksčio, bet dar neprasidėjus pažeidimo centro rekristalizacijai) mažėjimas didinant impulsų skaičių. Lyginant su vienu impulsu, naudojant kelis impulsus rekristalizacijos slenkstis nukrenta daugiau nei 2 kartus, žymiai daugiau nei amorfizacijos slenkstis. Amorfizacijos intervalas taip pat yra mažesnis, kai voros impulsai yra atskirti 16 ns, lyginant su tuo pačiu skaičiumi impulsų, atskirtų 400 ps. Tai rodo, jog medžiaga yra labiau linkusi rekristalizuotis naudojant impulsų voros režimą.

10 pav. (b) grafike buvo vertinami amorfizacijos ir rekristalizacijos slenkščiai imant vieno impulso energijos tankį. Vertinant bendros kritusios energijos amorfizacijos ir persikristalizavimo slenkščius (11 pav.) matoma, kad kuo daugiau impulsų yra voroje, tuo amorfizacijos slenkščio vertė didėja lyginant su vieno impulso amorfizacijos slenkščiu. Kai impulsai voroje yra atskirti 400 ps, amorfizacijos slenkstis kyla mažiau nei kai impulsai yra atskirti 16 ns. Lyginant impulsus, atskirtus ns ir ps, 2 impulsų režime amorfizacijos slenkstis pakilo ~12,3%, 3 impulsų režime - ~23,2% ir 4 impulsų režime - ~26,8%.



11 pav. Pažeidimų ant <111> orientacijos nelegiruoto silicio bandinio naudojant 1030nm bangos ilgio impulsus amorfizacijos ir persikristalizavimo slenkstinės energijos vertės.

Rekristalizacijos slenkstis taip pat kyla daugėjant impulsų skaičiui voroje, tačiau šios slenkstinės vertės yra mažesnės arba panašios į rekristalizacijos slenkščio vertę vieno impulso atveju. Kaip ir amorfizacijos slenkščio vertės, rekristalizacijos slenkščio vertės yra didesnės, kai voros

impulsai yra atskirti 16 ns, o ne 400 ps, išskyrus voroje esant 2 impulsams. Šis išsiskyrimas galimai atsirado dėl pažeidimų skersmens matavimo paklaidos. Rekrystalizacijos slenkstis sumažėjo ~0.3% 2 impulsų režime ir pakilo ~9,3% - 3 impulsų režime bei ~15,6% - 4 impulsų.

Amorfizacijos slenkstis didėja didinant impulsų skaičių voroje dėl to, kad bandinys yra šildomas mažesnės energijos impulsais, per laiką tarp impulsų dalis sužadintų elektronų relaksuoja ir medžiaga pradeda vėsti, todėl reikia didesnės bendros energijos pasiekti ir palaikyti lydymosi temperatūrą pažeidimo vietoje. Kuo ilgesnis laiko tarpas tarp impulsų, tuo ilgiau medžiagai leidžiama vėsti ir reikia dar daugiau energijos pasiekti lydymosi temperatūrą.

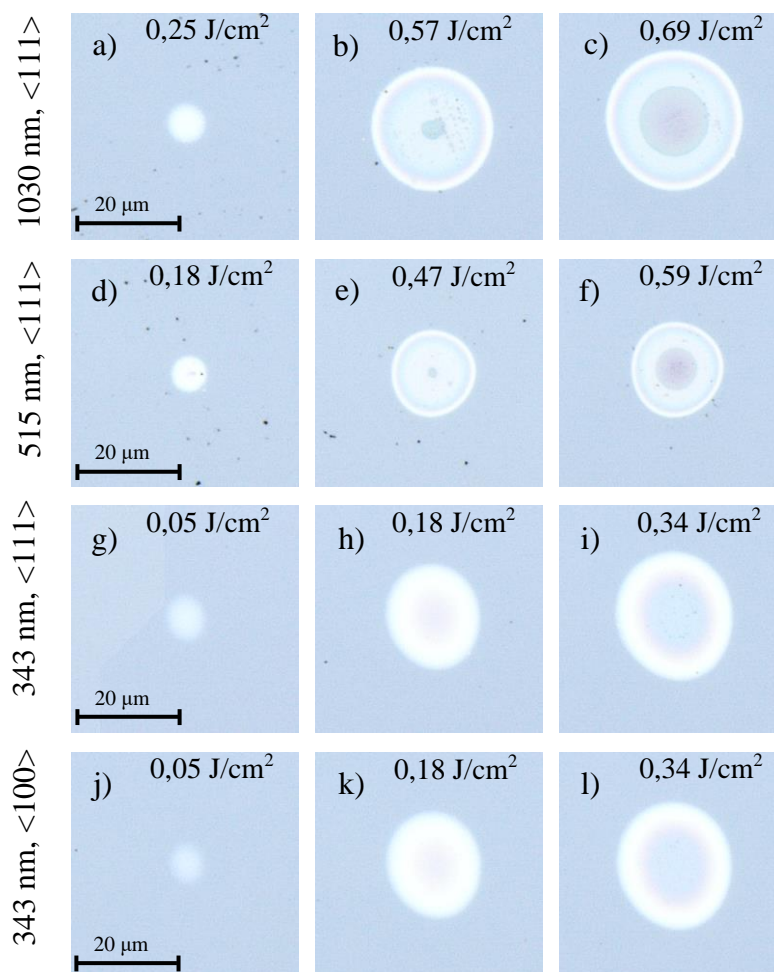
Naudojant daugiau impulsų voroje žymiai sumažėja amorfizacijos intervalas prieš medžiagai persikristalizuojant. Taip pat egzistuoja pastebimas išsiskyrimas tarp modifikacijų slenksčių ir didesnis amorfizacijos intervalo sumažėjimas, kai impulsai yra atskirti nanosekundėmis, o ne pikosekundėmis. Pagal 11 pav. pateiktas vertes, lyginant vieną impulsą su keturių impulsų vora, amorfizacijos slenkstis sumažėja 49% esant pikosekundiniam vėlinimui, ir 56% - nanosekundiniam. Šie skirtumai atsiranda dėl kiekvieno sekančio impulso sąveikavimo su jau pakitusia medžiaga, kurios sugertis bus taip pat pakitusi. Pirmu impulsu poveikio vietoje yra sugeneruojama plazma, kuri gyvuoja iki 30 ns [28]. Kadangi impulsai voroje yra atskirti arba 400 ps, arba 16 ns, tai reiškia, jog abejais atvejais kiekvienas sekantis impulsas sąveikauja su susidariusia plazma, kuri yra vis ilgiau palaikoma. Pagal gautus rezultatus galima spręsti, jog kuo ilgiau plazma yra palaikoma, tuo labiau medžiaga yra linkusi greičiau persikristalizuoti.



## 4.2. Bangos ilgio įtaka silicio amorfizacijai

Antrojoje darbo dalyje buvo tiriama silicio amorfizacijos priklausomybė nuo spinduliuotės bangos ilgio. Šiame darbe bandiniams paveikti buvo palyginti trys bangos ilgiai: 1030 nm, 515 nm bei 343 nm. Pažeidimai buvo daromi naudojant 4 pav. pavaizduotą sistemą, vienu impulsu, tolygiai keliant impulso energiją nuo pažeidimo slenksčio iki abliacijos slenksčio. Kaip ir pirmojoje darbo dalyje, kiekviena energija buvo padaryta po 3 pažeidimus. Pažeidimus darant 515 nm bangos ilgio spinduliuote, gauti vidutiniai pažeidimų skersmenų nuokrypiai – 0,14  $\mu\text{m}$  išorinio žiedo skersmeniui ir 0,12  $\mu\text{m}$  vidinio žiedo skersmeniui, o naudojant 343 nm spinduliuotę – 0,03  $\mu\text{m}$  išorinio žiedo skersmeniui.

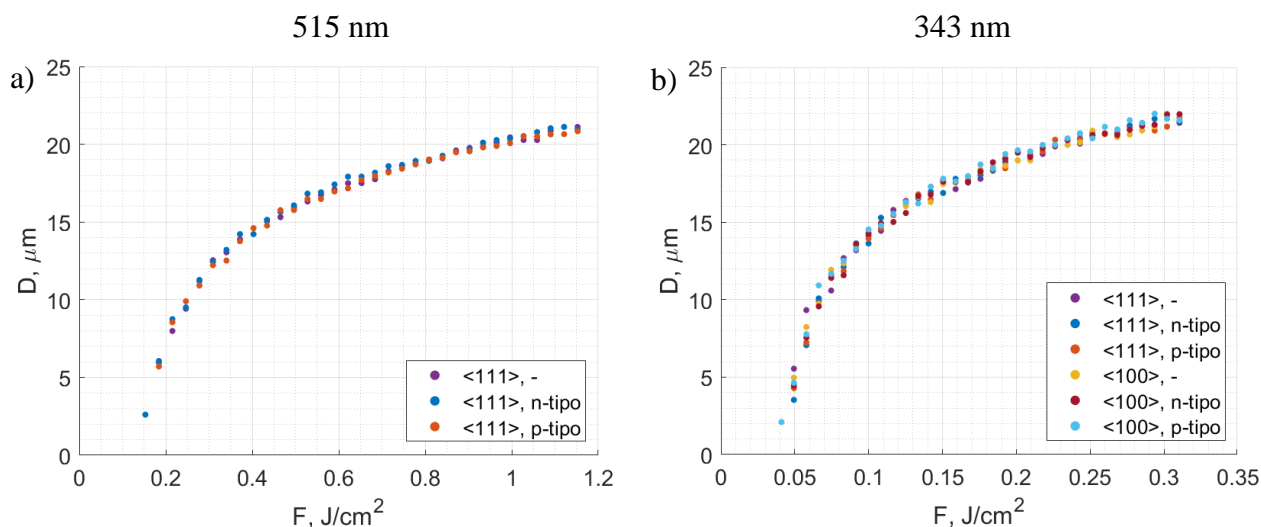
12 pav. yra pateiktos pažeidimų nuotraukos tik pasiekus amorfizacijos slenkstį (pirmas stulpelis), tik atsiradus persikristalizavusiai centrinei zonai (antras stulpelis) bei jai padidėjus (trečias stulpelis).



12 pav. Pažeidimų vaizdas trimis skirtingais pažeidimo etapais: (a-c) 1030 nm bangos ilgis,  $\langle 111 \rangle$  orientacijos nelegiruotas silicis; (d-f) 515 nm bangos ilgis,  $\langle 111 \rangle$  orientacijos nelegiruotas silicis; (g-i) 343 nm bangos ilgis,  $\langle 111 \rangle$  orientacijos nelegiruotas silicis; (j-l) 343 nm bangos ilgis,  $\langle 100 \rangle$  nelegiruotas silicis.

Kaip matoma iš 12 pav., 1030nm ir 515nm bangos ilgių spinduliuote gauti pažeidimai vizualiai yra panašūs, ryškūs kraštai, esant didesniai energijos tankiui centre aiškiai matosi persikristalizavusi zona. Kaip ir 1030 nm atveju (žr. 7 pav. a), 515 nm bangos ilgio impulsais gauti pažeidimai ant  $\langle 100 \rangle$  orientacijos bandinių buvo itin mažo kontrasto net esant dideliems energijos tankiams, todėl buvo analizuojami tik ant  $\langle 111 \rangle$  orientacijos bandinių padaryti pažeidimai. 343nm bangos ilgio impulsais gauti pažeidimai (12 pav. g-l) ryškiai matosi ant abiejų gardelės orientacijos bandinių ( $\langle 100 \rangle$  ir  $\langle 111 \rangle$ ), tačiau pažeidimų kraštai yra išblukę, neįmanoma tiksliai išskirti, kur prasideda persikristalizavusi zona.  $\langle 100 \rangle$  orientacijos bandiniams kritinis paviršinis greitis yra didesnis nei  $\langle 111 \rangle$  orientacijos bandiniams [9], todėl šios gardelės orientacijos bandiniai yra atsparesni amorfizacijai. Pažeidimai ant  $\langle 100 \rangle$  orientacijos bandinių galimai matosi dėl didelės 343 nm bangos ilgio silicio sugerties (žr. 3 pav.), bandinio paviršiuje yra sugerama daugiau energijos, todėl yra sukuriama pakankama temperatūrų gradientas, tinkamas išlaikyti amorfizacijai reikalingą kietėjimo fronto greitį.

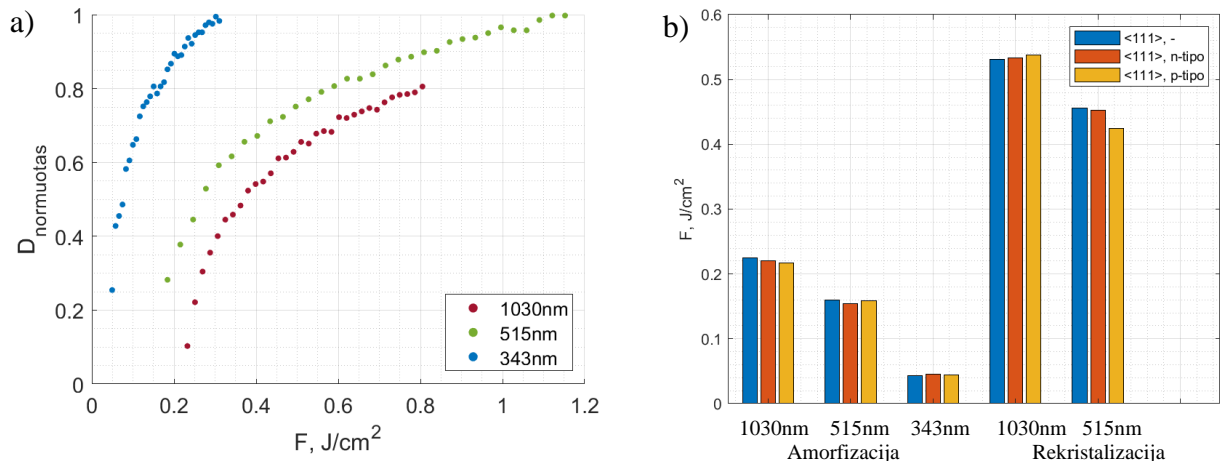
Kaip ir pirmoje darbo dalyje, buvo palygintos pažeidimų skersmenų priklausomybės nuo energijos tankio visiems  $\langle 111 \rangle$  orientacijos silicio bandiniams (nelegiruotas, n-tipo ir p-tipo) ir, papildomai 343nm bangos ilgio atveju, visiems  $\langle 100 \rangle$  bandiniams (nelegiruotas, n-tipo ir p-tipo). Kaip ir naudojant 1030nm spinduliuotę, kitiems bangos ilgiams žymaus skirtumo tarp pažeidimų ant skirtingų bandinių nebuvo pastebėta. Pažeidimų skersmenų priklausomybė nuo impulsų energijos tankio naudojant 515 nm ir 343 nm bangos ilgio spinduliuotę yra pateikta 13 pav.



13 pav. Išorinio žiedo skersmenų  $D$  priklausomybė nuo impulsų energijos tankio  $F$ : (a) naudojant 515 nm spinduliuotę, visiems  $\langle 111 \rangle$  silicio bandiniams; (b) naudojant 343 nm spinduliuotę, visiems silicio bandiniams.

Kadangi darant pažeidimus skirtingais bangos ilgiais buvo naudojami skirtingo diametro pluoštai, tiesiogiai lyginti pažeidimų skersmenų priklausomybę nuo impulsų energijos tankio būtų

nekorektiška, todėl pažeidimų skersmenys buvo sunormuoti padalinant juos iš naudoto pluošto skersmens. Normuotų pažeidimų skersmenų  $D_{normuotas}$  priklausomybė nuo spinduliuotės energijos tankio  $F$  visiems naudotiems bangos ilgiams (a) bei energijos tankio slenkstinės vertės visiems bangos ilgiams (b) yra pateikta 14 pav.



14 pav. Pažeidimų, padarytų ant <111> orientacijos nelegiruoto silicio, normuoto išorinio žiedo skersmens  $D_{normuotas}$  priklausomybė nuo spinduliuotės energijos tankio  $F$  (a) ir pažeidimų, padarytų ant visų tinkamų bandinių, amorfizacijos ir rekristalizacijos slenkščiai (b), naudojant 1030 nm, 515 nm ir 343 nm bangos ilgio impulsus.

Iš 14 pav.(a) matoma, jog naudojant 343 nm impulsus pažeidimai atsiranda esant mažiausiam energijos tankiui ir kyla didėjant naudojamam bangos ilgiui.

Amorfizacijos ir rekristalizacijos slenkščiai, pavaizduoti 14 pav. (b), skirtingiems bangos ilgiams žymiai skiriasi, lyginant 1030 nm su 515 nm slenkstinė energijos tankio vertė sumažėja ~1,4 karto (nuo 0,23  $J/cm^2$  iki 0,16  $J/cm^2$ ), o lyginant 1030 nm su 343 nm - ~5,5 karto (nuo 0,22  $J/cm^2$  iki 0,04  $J/cm^2$ ). Amorfizacijos slenkščių vertės atrodo yra glaudžiai susijusios su skirtingų bangos ilgių sugertimi silicyje (žr. 3 pav.) – kuo didesnė sugertis, tuo mažesnis amorfizacijos slenkstis. Didžiausias 1030 nm bangos ilgio spinduliuotės slenkstis taip pat galimai priklauso nuo to, jog šio bangos ilgio fotonų energija yra mažesnė už silicio draustinės juostos tarpą, todėl reikia intensyvesnės spinduliuotės, kad pasireikštų netiesinė dvifotonė sugertis ir būtų sugerta pakankamai energijos pasiekti lydymosi temperatūrą. Įdomu pastebėti, kad amorfizacijos langas 1030 ir 515 nm bangos ilgių spinduliuotei yra lygus.

### 4.3. Silicio amorfizacijos skaitmeninis modeliavimas

Paskutinėje darbo dalyje buvo atliktas silicio amorfizacijos femtosekundiniais impulsais skaitmeninis modeliavimas. Modeliavimui buvo naudotas Matlab R2021b programinis paketas.

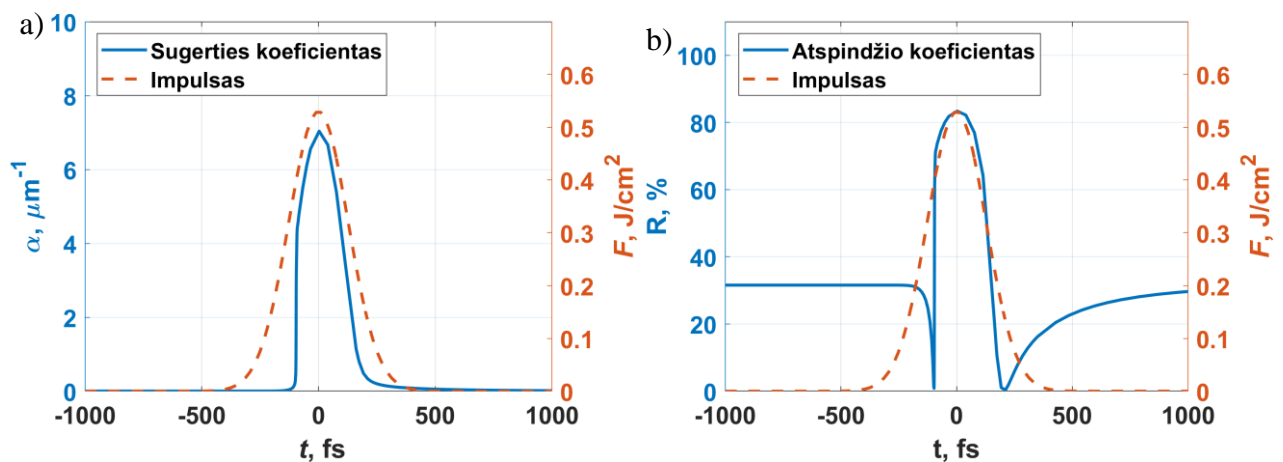
Norint įvertinti silicio atsaką į femtosekundinius impulsus, atliekant skaitmeninį modeliavimą buvo naudojamas idealus Gauso pluoštas, krentantis į bandinį (16 pav. a). Krentančio pluošto energija yra sugerama bandinio paviršiuje ir tūryje. Silicyje – puslaidininkyje - impulso metu sužadintų ir išlaisvintų elektronų tankis gali keliomis eilėmis skirtis nuo nesužadinto bandinio, tai reiškia, jog impulso metu kinta bandinio lūžio rodiklis, taigi ir atspindys bei sugertis [8]. Bandinio kompleksinio lūžio rodiklis  $\tilde{n}$  bei sugerties koeficiento  $\alpha$  ir atspindžio koeficiento  $R$  priklausomybės nuo jo yra aprašomos šiomis išraiškėmis:

$$\tilde{n} = \sqrt{\tilde{\epsilon}_s - \frac{Ne^2}{\epsilon_0 \omega^2 m_{opt}^* (1 + \frac{i}{\omega \tau_c})}}, \quad (5)$$

$$\alpha = \frac{2\omega}{c} \text{Im}[\tilde{n}], \quad (6)$$

$$R = \frac{|\tilde{n}-1|^2}{|\tilde{n}+1|^2}, \quad (7)$$

čia  $N$  – laisvųjų elektronų koncentracija,  $\tilde{\epsilon}_s$  – savitoji dielektrinė skvarba,  $m_{opt}^* = m_e^* + m_s^*$  - bendra elektronų ir skylių optinė efektinė masė,  $\tau_c = 1/\nu_c$  – elektronų ir skylių susidūrimo su gardele efektinis periodas,  $\nu_c$  – elektronų ir skylių susidūrimo su gardele dažnis. Sugerties koeficiento ir atspindžio koeficiento kitimas laike yra pateiktas 15 pav. Iš šių grafikų matoma, jog prasidėjus impulsui, tiesinė sugertis smarkiai išauga dėl sąveikos metu sugeneruotų naujų laisvųjų krūvininkų, o atspindžio koeficientas nukrenta ir taip pat staigiai išauga.



15 pav. Tiesinės sugerties koeficiento  $\alpha$  (a) ir atspindžio koeficiento  $R$  (b) kitimas laike impulso ir medžiagos sąveikos laikotarpiu. Impulso trukmė – 211 fs.

Apskaičiavus sugerties kitimą per laiką, galima sumodeliuoti koks krentančio pluošto energijos tankis bus sugertas bandinyje. Silicyje sugertam energijos tankiui įvertinti yra naudojamas supaprastintas lazerinės spinduliuotės ir medžiagos sąveikos modelis [8,26]. Modelį sudaranti lygčių sistema:

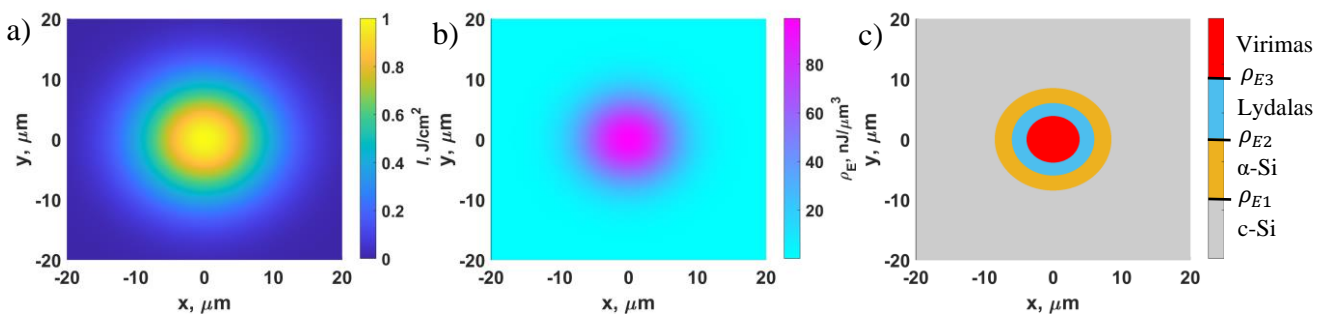
$$\frac{\partial I}{\partial z} = -\alpha I - \beta I^2, \quad (8)$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{\alpha_{VFS}}{\hbar\omega} I + \frac{\beta}{2\hbar\omega} I^2 + \delta N - \frac{N}{\tau_R} - \gamma N^3, \quad (9)$$

čia  $I$  yra impulso intensyvumas,  $\alpha$  – tiesinės sugerties koeficientas,  $N$  – laisvųjų elektronų koncentracija,  $\alpha_{VFS}$  – vienfotonės sugerties koeficientas,  $\beta$  – dvifotonės sugerties koeficientas,  $\hbar\omega$  – fotono energija,  $\delta$  – smūginės jonizacijos koeficientas,  $\tau_R$  – elektronų koncentracijos relaksacijos trukmė, o  $\gamma$  – Auger rekombinacijos koeficientas. Modelyje yra įvertinama vienfotonė ir dvifotonė sugertis, smūginė jonizacija, krūvininkų relaksacija ir Auger rekombinacija. Šilumos difuzija nėra įtraukta, nes femtosekundinio impulso metu šiluma į medžiagą difunduoja tik apie 4 nm [26]. Lyginant su mikrometrų eilės pluošto skersmeniu ant bandinio paviršiaus, šilumos difuzijos įtaka impulso metu yra itin maža, todėl į modelį ji nebuvo įtraukta.

Turint (8) ir (9) lygčių sprendinius, galima apskaičiuoti silicio sugertą energijos tankį  $\rho_E$ :

$$\rho_E(r, z) = -\frac{\partial F}{\partial z} = \int_{-\infty}^{\infty} (\alpha I + \beta I^2) dt. \quad (10)$$



16 pav. (a) Į bandinio paviršių krentančio Gauso pluošto intensyvumo skirstinys; (b) sugerto energijos tankio  $\rho_E$  skirstinys; (c) skirtingų medžiagos būsenų grafikas.  $\alpha$ -Si – amorfinės būsenos silicis, c-Si – kristalinės būsenos silicis.

Kaip buvo minėta 2.2. skyrelyje, amorfinio silicio žiedas ir persikristalizavęs vidinis žiedas susidaro dėl skirtingų kietėjimo greičių pažeidimo centre ir toliau nuo jo. Šio darbo modelyje yra daroma prielaida, jog šis greičių skirtumas atsiranda būtent dėl skirtingo sugerto energijos tankio pasiskirstymo impulso metu. Tokiu atveju, sugertas energijos tankis  $\rho_E$  turi tris kritines vertes  $\rho_{E1}$ ,  $\rho_{E2}$ , ir  $\rho_{E3}$  [26]. Norint apskaičiuoti šias kritines vertes, reikia sužinoti kaip kyla medžiagos temperatūra priklausomai nuo sugerto energijos tankio. Iš termodinamikos žinoma, jog medžiagai gavus tam tikrą šilumos kiekį  $Q$ , jos temperatūra pakinta per  $dT$  pagal šią išraišką:

$$mCdT = Q, \quad (11)$$

čia  $C$  – savitoji šiluminė talpa, kuri gali būti apskaičiuojama iš  $C = \frac{C_M}{M}$ , kur  $C_M$  – molinė savitoji šiluminė talpa,  $M$  – molinė masė. Žinant, jog medžiagos masė  $m = \rho V$ , (11) išraišką galima perrašyti šitaip:

$$\rho CdT = \frac{Q}{V} = d\rho_E, \quad (12)$$

kur  $d\rho_E$  – sugertas energijos kiekis. Iš (12) išraiškos galime surasti sugertą energijos tankį  $\rho_{E1}$ , reikalingą silicio temperatūrą pakelti nuo kambario temperatūros  $T_0$  iki lydymosi temperatūros  $T_L$ :

$$\rho_{E1} = \rho \int_{T_0}^{T_L} C dT = 2,987 \text{ nJ}/\mu\text{m}^3. \quad (13)$$

Pasiekus lydymosi temperatūrą medžiagai reikia suteikti papildomos šilumos pilnai išsilydyti -  $\rho_{EL} = \frac{\rho L}{M} = 4,171 \text{ nJ}/\mu\text{m}^3$ . Antroji apskaičiuota kritinė energijos tankio vertė -  $\rho_{E2} = \rho_{E1} + \rho_{EL} = 7,158 \text{ nJ}/\mu\text{m}^3$ . Trečioji kritinė sugerto energijos tankio vertė žymi ribą, kai medžiaga pasiekia virimo temperatūrą. Ši vertė gaunama įvertinus, kokio sugerto energijos tankio reikia norint pasiekti virimo temperatūrą:

$$\rho_{E3} = \rho_{E1} + \rho \int_{T_L}^{T_V} C dT = 11,334 \text{ nJ}/\mu\text{m}^3. \quad (14)$$

Laikoma, kai  $\rho_{E1} > \rho_E$  - silicis yra tik šildomas ir nepasiekia lydymosi temperatūros, kai  $\rho_{E2} > \rho_E > \rho_{E1}$  - silicis poveikio vietoje pradeda lydytis ir vėsdamas sukietėja amorfinėje būsenoje, kai  $\rho_{E3} > \rho_E > \rho_{E2}$  – medžiaga pilnai išsilydo, gaunamas lydalas ir vėsdama medžiaga sukietėja kristalinėje būsenoje, o kai  $\rho_E > \rho_{E3}$  – medžiaga pradeda virti, vyksta abliacija. Skirtingų medžiagos būsenų aiškinamasis paveikslėlis yra pateiktas 16 pav. (c).

Visi skaitmeninio modeliavimo metu naudoti parametrai ir jų vertės yra pateikti 2 lentelėje. Silicio molinė savitoji šiluminė talpa  $C_M$  žemiau lydymosi temperatūros yra apskaičiuojama pagal empirinę Shomate lygtį:

$$C_M = A + Bt + Ct^2 + Dt^3 + E/t^2, \quad (15)$$

lygties koeficientai siliciui:  $A = 22,81719$ ,  $B = 3,89951$ ,  $C = -0,08285$ ,  $D = 0,04211$ ,  $E = -0,35406$ ,  $t = \frac{T}{1000}$ ,  $T$  – silicio temperatūra Kelvinais.

Dvifotonės sugerties koeficientas  $\beta$ , elektronų koncentracijos relaksacijos trukmė  $\tau_R$ , smūginės jonizacijos koeficientas  $\delta$ , bei elektronų ir skylių susidūrimo su gardele efektinis periodas  $\tau_c$  nėra tiksliai žinomi siliciui, todėl šiame darbe buvo imti kaip laisvi parametrai.

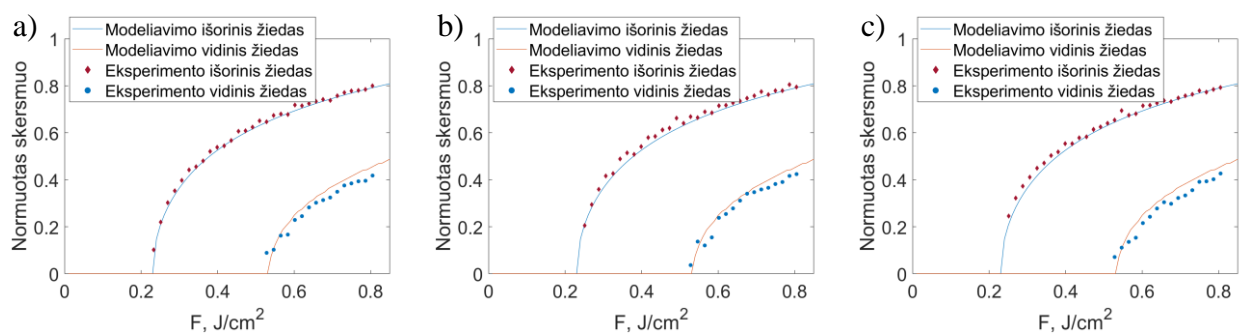
2 lentelė. Skaitmeninio modeliavimo parametrų vertės.

| Parametras  | Simbolis                                       | Vertė  |
|---|--|--|
| Silicio parametrai  |  |  |
| Tankis  | $\rho$   | 2,33 g/cm <sup>3</sup>   |
| Molinė masė [29]  | $M$  | 28,086 g/mol   |
| Kambario temperatūra  | $T_0$  | 300 K  |
| Lydymosi temperatūra  | $T_L$  | 1687 K   |
| Molinė savitoji šiluminė talpa [29]                                 | $C_M (T \leq T_L)$                             | $A + Bt + Ct^2 + Dt^3 + E/t^2$ J/mol·K,<br>čia $t = \frac{T}{1000}$ , $T$ –temperatūra Kelvinais |
|   | $C_M (T > T_L)$                                | 27,196 J/mol·K   |
| Empirinės molinės savitosios šilumos lygties koeficientai [29]      | $A$  | 22,81719   |
|   | $B$  | 3,89951  |
|   | $C$  | –0,08285   |
|   | $D$  | 0,04211  |
|   | $E$  | –0,35406   |
| Skystos-kietos fazės kitimo metu išsiskiriantis šilumos kiekis [30] | $L$  | 50,21 kJ/mol   |
| Savitoji dielektrinė skvarba [31]                                   | $\tilde{\epsilon}_s (\lambda_{1H})$            | $12,709 + 1,715 \times 10^{-3}i$   |
|   | $\tilde{\epsilon}_s (\lambda_{2H})$            | $17,731 + 0,351i$  |
|   | $\tilde{\epsilon}_s (\lambda_{3H})$            | $19,415 + 31,181i$   |
| Elektronų efektinė masė [32]  | $m_e^*$  | $0,26m_e$  |
| Skylių efektinė masė [32]   | $m_s^*$  | $0,37m_e$  |
| Auger rekombinacijos koeficientas [32]                              | $\gamma$                                       | $3,8 \times 10^{-31}$ cm <sup>6</sup> /s   |
| Lazerio parametrai  |  |  |
| Bangos ilgis  | $\lambda_{1H}$                                 | 1030 nm  |
|   | $\lambda_{2H}$                                 | 515 nm   |
|   | $\lambda_{3H}$                                 | 343 nm   |
| Impulso trukmė (FWHM)   | $\tau_{1/2}$ prie $\lambda_{1H}$               | 211 fs   |
|   | $\tau_{1/2}$ prie $\lambda_{2H}, \lambda_{3H}$ | 300 fs   |

Pirmiausiai modelis buvo taikomas 1030 nm bangos ilgio spinduliuotės sąveikai su siliciu, kai yra naudojamas vienas impulsas. Kadangi šio bangos ilgio fotonų energija yra mažesnė už silicio draustinę juostą, laikoma, kad naudojant šios bangos ilgio spinduliuotę, dominuoja dvifotonė sugertis, o smūginės jonizacijos koeficientas yra nykstamai mažas, todėl (9) lygtis buvo pakoreguota į:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{\alpha(0)}{\hbar\omega} I + \frac{\beta}{2\hbar\omega} I^2 - \frac{N}{\tau_R} - \gamma N^3. \quad (16)$$

Modelis geriausiai atitiko eksperimentą, kai  $\beta = 22,2 \text{ cm/GW}$ ,  $\tau_R = 375 \text{ fs}$ ,  $\tau_c = 104,6 \text{ fs}$ . Pagal apskaičiuotus sugertus energijos tankius  $\rho_{E1}$  ir  $\rho_{E2}$  gauti amorfizacijos ir rekristalizacijos slenksčiai  $F_a = 0,229 \text{ J/cm}^2$  ir  $F_r = 0,526 \text{ J/cm}^2$  gerai atitiko eksperimentiškai gautus slenksčius:  $F_a = 0,23 \text{ J/cm}^2$  ir  $F_r = 0,53 \text{ J/cm}^2$ .

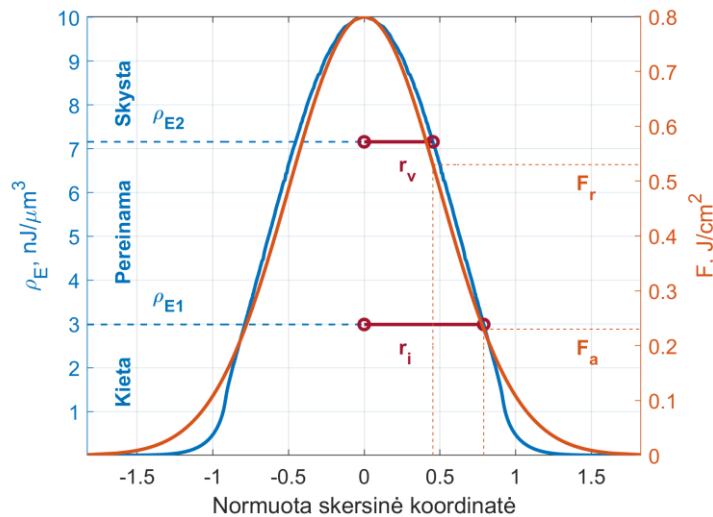


17 pav. Apskaičiuotų išorinio ir vidinio žiedo skersmenų priklausomybė nuo impulso energijos tankio palyginimas su eksperimentiškai gautais rezultatais: (a) nelegiruotas  $\langle 111 \rangle$  orientacijos bandinys; (b) n-tipo  $\langle 111 \rangle$  orientacijos bandinys; (c) p-tipo  $\langle 111 \rangle$  orientacijos bandinys.

Kaip matoma 17 pav., apskaičiuoti amorfizacijos ir rekristalizacijos slenksčiai gerai atitiko eksperimentiškai gautus pažeidimo slenksčius visiems  $\langle 111 \rangle$  orientacijos silicio bandiniams.

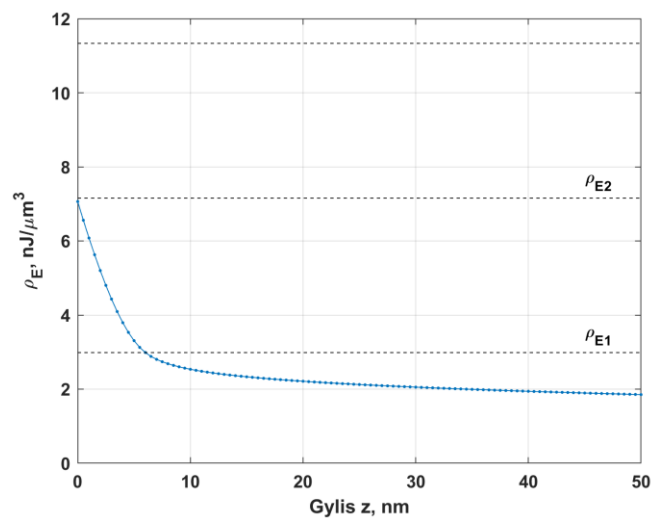
18 pav. yra pateikti sugerto ir krentančio pluošto energijos tankių profiliai nelegiruotam siliciui, kai krentančio pluošto energijos tankis  $F = 0,8 \text{ J/cm}^2$ . Normuoti vidinio ir išorinio žiedo spinduliai  $r_v = 0,454$  ir  $r_i = 0,789$  gerai atitinka eksperimentiškai gautus rezultatus - naudojant 1030 nm bangos ilgio  $F = 0,805 \text{ J/cm}^2$  impulsus, gauti  $r_v = 0,418$  ir  $r_i = 0,8$ .





18 pav. Sugerto energijos tankio (mėlyna) ir krentančio pluošto energijos tankio (oranžinė) profiliai.  $r_v$  ir  $r_i$  žymi atitinkamai vidinio ir išorinio žiedo spindulius.

Modelis taip pat numato, jog maksimalus amorfizacijos gylis prie rekristalizaciją bandinyje yra  $\sim 6$  nm (19 pav.). Ši vertė yra daug mažesnė nei buvo gauta eksperimentuose ( $\sim 65$  nm) [12]. Taip yra todėl, kad šis modelis neįskaito šilumos difuzijos, kuri pluošto kryptimi dar gali vykti ilgai po impulso pabaigos [33]. Dabartinė modelio numatoma vertė yra tik minimalus gylis, kuris bus amorfizuotas dėl sugerto energijos tankio.



19 pav. Apskaičiuota sugerto energijos tankio priklausomybė nuo gylio bandinyje, kai  $F = 0,52 \text{ J/cm}^2$ .

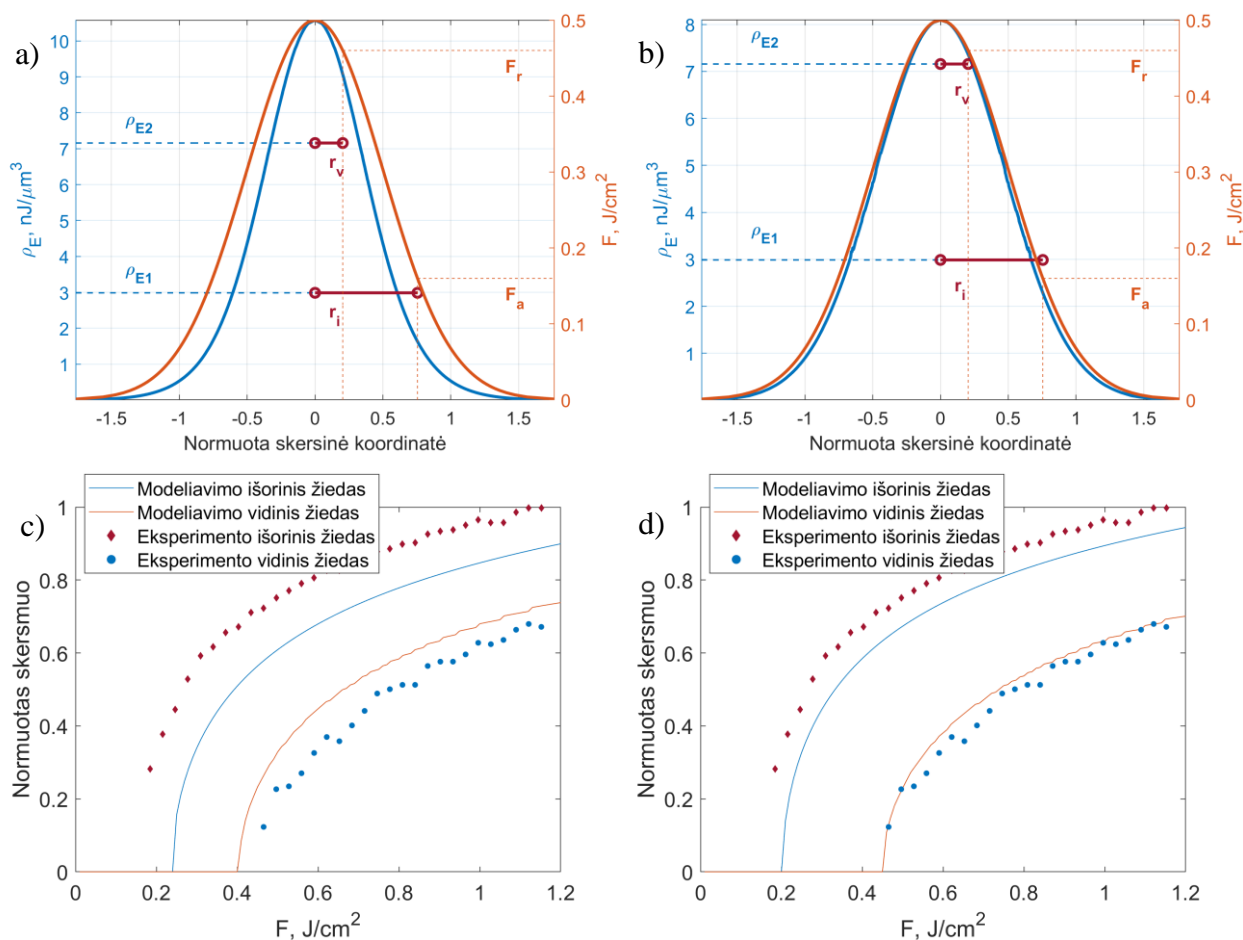
Taikant modelį 515 nm bangos ilgio impulsams pagal tokias pačias sąlygas kaip 1030 nm, iškart buvo pastebėta, jog modelis neatitinka eksperimento. Apskaičiuoti amorfizacijos slenksčiai visiškai neatitiko eksperimentinių rezultatų net ir drastiškai keičiant laisvus parametrus. 20 pav. (a) yra pateikti arčiausiai eksperimentinių rezultatų gauti sugerto ir krentančio pluošto energijos tankių profiliai, kai krentančio pluošto energijos tankis  $F = 0,5 \text{ J/cm}^2$ . Iš eksperimentinių duomenų gautų

vidinio ir išorinio žiedo spindulių  $r_v$  ir  $r_i$  matosi, koks turėtų būti apskaičiuoto sugerto energijos tankio profilis, kad modelis atitiktų eksperimentą. Teorinių ir eksperimentinių rezultatų išsiskyrimas aiškiai matosi ir apskaičiuotų išorinio ir vidinio žiedų skersmenų priklausomybės nuo impulso energijos tankio grafike (20 pav. c).

Kadangi 515 nm bangos ilgio fotonų energija jau viršija silicio draustinės juostos tarpą, buvo padaryta prielaida, jog dvifotonė sugertis šiam bangos ilgiui yra neįdomi, o dominuoja vienifotonė sugertis ir smūginė jonizacija. Pagal šias prielaidas pakeista (9) lygtis atrodo šitaip:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{\alpha(0)}{\hbar\omega} I + \delta N - \frac{N}{\tau_R} - \gamma N^3. \quad (17)$$

Naudojant pakeistą modelio lygtį, gauti rezultatai buvo daug artimesni eksperimentui, nors ir lygių verčių nepavyko pasiekti. Artimiausi apskaičiuoti amorfizacijos ir rekristalizacijos slenksčiai  $F_a = 0,21 \text{ J/cm}^2$  ir  $F_r = 0,46 \text{ J/cm}^2$  (eksperimentiniai slenksčiai  $F_a = 0,16 \text{ J/cm}^2$  ir  $F_r = 0,46 \text{ J/cm}^2$ ). 20 pav. (b) ir (d) grafikuose pateiktame teorinių ir eksperimentinių rezultatų palyginime matoma, jog kai yra daroma prielaida, kad dominuoja vienifotonė sugertis, modelis geriau atitinka eksperimentinius rezultatus nei dominuojančios dvifotonės sugerties atveju (20 pav. a, c).



20 pav. Sugerto energijos tankio (mėlyna) ir krentančio pluošto energijos tankio (oranžinė) profiliai bei skaitmeninio modeliavimo ir eksperimentinių rezultatų palyginimas: darant prielaidą, jog dominuoja dvifotonė sugertis - (a) ir (c) atitinkamai; darant prielaidą, jog dominuoja vienifotonė sugertis - (b) ir (d) atitinkamai.  $r_v$  ir  $r_i$  žymi atitinkamai vidinio ir išorinio žiedo spindulius.

Nors apskaičiuoti modifikacijos slenksčiai yra gana artimi eksperimentui, šiam bangos ilgiui modelis numatė daugiau nei 100 nm gylio amorfizaciją esant  $F = 0,2 \text{ J/cm}^2$  energijos tankiui. Tai visiškai neatitinka eksperimentinių rezultatų (~80 nm) [12] ir rodo, kad ši modelio lygtis nėra pilnai tinkama 515 nm bangos ilgiui.

Norint įvertinti modelio tikslumą naudojant 343 nm bangos ilgio impulsus, buvo naudota (17) modelio lygtis, kaip ir 515 nm bangos ilgio atveju. Daryta ta pati prielaida, jog dėl didelės fotono energijos, dominuoja vienfotonė sugertis ir smūginė jonizacija, o dvifotonė sugertis yra nežymi. Šio bangos ilgio spinduliuote daryti pažeidimai buvo su neryškiais kraštais, todėl nebuvo įmanoma išmatuoti rekristalizacijos slenksčio. Turint tik amorfizacijos slenkstį negalima korektiškai palyginti modelio su eksperimentu. Dėl bendro modelio patikrinimo, lyginimui su eksperimentu buvo sugalvoti keli skirtingi rekristalizacijos slenksčiai ( $F_r = 0,1; 0,2; 0,3 \text{ J/cm}^2$ ). Tokiomis sąlygomis palyginus gautą modelį su eksperimentu paaiškėjo, jog šis modelis 343 nm bangos ilgiui taip pat yra netikslus. Keičiant laisvus parametrus, apskaičiuojami sugertos energijos tankiai beveik nekito, tik iki vieno skaičiaus po kablelio. Tai rodo, jog ši modelio lygtis šiam bangos ilgiui yra nepakankama ir reikia įskaičiuoti papildomus procesus tokius kaip, pavyzdžiui, šilumos difuzija ar grupinio impulso greičio pokytis medžiagoje. Taip pat dėl UV spinduliuotės intensyvios sugerties silicyje, galimai yra nebetinkami darbe imami laisvieji parametrai, kurie šiame darbe yra laikomi konstantomis. Stipriai kintant laisvųjų krūvininkų koncentracijai šie laisvieji parametrai taip pat galimai kinta impulso laikotarpiu.

Šiame darbe nagrinėtas modelis yra geriausiai pritaikytas tik vieno impulso sąveikai su medžiaga. Kaip matoma iš eksperimento rezultatų 4.1. skyrelyje, naudojant daugiau nei vieną impulsą, bandinyje pradeda kauptis šiluma ir vėlesni impulsai voroje jau sąveikauja su pakitusia medžiaga. Kadangi šio darbo modelis neįskaito šiluminės difuzijos ir yra vertinama impulso sąveika tik su nemodifikuotu siliciu, dabartinėje būsenoje šis modelis nėra tinkamas modeliavimui daugiau nei vieno impulso sąveikai su siliciu.

Iš rezultatų galima spręsti, jog šis modelis dabartinėje būsenoje geriausiai yra tinkamas tik vieno impulso sąveikai su siliciu ir tik tų bangos ilgių spinduliuotei, kurioms sąveikaujant su siliciu dominuoja dvifotonė sugertis.

## 5. Pagrindiniai rezultatai ir išvados

- Lyginant su vienu impulsu daromomis modifikacijomis, pažeidimai impulsų voromis mažina amorfizacijos langą dėl pastebimo ženkliaus skirtumo tarp amorfizacijos ir rekristalizacijos slenksčių didėjimo greičio daugėjant impulsų (iki 56% sumažėjimas lyginant vieną impulsą su keturių impulsų vora). Voroje esant nanosekundiniam vėlinimui, pasireiškia didesnis amorfizacijos lango sumažėjimas bei atskirų impulsų ir bendros energijos amorfizacijos slenksčiai yra didesni nei esant tam pačiam impulsų skaičiui su pikosekundiniu vėlinimu.
- Susidaręs amorfinio silicio sluoksnis ant <100> orientacijos bandinių yra ryškūs tik darant pažeidimus 343 nm bangos ilgio impulsais. 515 ir 1030 nm bangos ilgiais gauti pažeidimai ant <100> orientacijos bandinių yra itin žemo kontrasto.
- Silicio modifikacijų skersmenys nepriklauso nuo silicio bandinyje esančių priemaišų naudojant 1030 nm, 515 nm ir 343 nm bangos ilgio femtosekundinius impulsus.
- Naudojant 1030 nm, 515 nm ir 343 nm bangos ilgių spinduliuotę, amorfizacijos slenkstis mažėja trumpėjant bangos ilgiui dėl efektyvesnės sugerties. Apskaičiuoti silicio amorfizacijos slenksčiai darant pažeidimus vienu impulsu: naudojant 1030 nm bangos ilgį  $0,23 \text{ J/cm}^2$ ; 515 nm -  $0,16 \text{ J/cm}^2$ ; 343 nm -  $0,04 \text{ J/cm}^2$ . Eksperimentiškai nustatytas amorfizacijos langas nepakinta regimajai ir IR spinduliuotei, tačiau veikiant UV bangos ilgio spinduliuote ryškios kristalizacijos ribos nepastebima.
- Darbe atliktas skaitmeninis modeliavimas rodo, jog silicio amorfizavimo ir rekristalizavimo procesai gali būti paaiškinami 1030 nm bangos ilgio spinduliuotei įskaičius dvifotonę sugertį be smūginės jonizacijos įtakos, tačiau 515 nm atveju dominuoja smūginė jonizacija ir vienfotonė sugertis. Šiame modelyje įskaičiuojamų parametru kol kas nepakanka UV spinduliuotės pažeidimų modeliavimui.

## 6. Literatūra

- [1] Malinauskas, M., Zukauskas, A., Hasegawa, S., Hayasaki, Y., Mizeikis, V., Buividas, R., Juodkakis, S. (2016). Ultrafast laser processing of materials: from science to industry. *Light Sci. Appl.*, 5, e16133.
- [2] Ahmmed, K., Grambow, C., & Kietzig, A.-M. (2014). Fabrication of Micro/Nano Structures on Metals by Femtosecond Laser Micromachining. *Micromachines*, 5(4), 1219–1253.
- [3] Musgraves, J. D., Richardson, K., & Jain, H. (2011). Laser-induced structural modification, its mechanisms, and applications in glassy optical materials. *Optical Materials Express*, 1(5), 921.
- [4] Garasz, K., Tanski, M., Kocik, M., Iordanova, E., Yankov, G., Karatodorov, S., Grozeva, M. (2016) The Effect of Process Parameters in Femtosecond Laser Micromachining, *Bulg. J. Phys.*, 43, 110-120.
- [5] Chelikowsky, J. (2002). Silicon in All its Forms. *MRS Bulletin*, 27(12), 951–960.
- [6] Bonse, J., Baudach, S., Krüger, J., Kautek, W., & Lenzner, M. (2002). Femtosecond laser ablation of silicon—modification thresholds and morphology. *Applied Physics A*, 74(1), 19–25.
- [7] Borowiec, A., MacKenzie, M., Weatherly, G. C., & Haugen, H. K. (2003). Transmission and scanning electron microscopy studies of single femtosecond- laser-pulse ablation of silicon. *Applied Physics A: Materials Science & Processing*, 76(2), 201–207.
- [8] Rämer, A., Osmani, O., & Rethfeld, B. (2014). Laser damage in silicon: Energy absorption, relaxation, and transport. *Journal of Applied Physics*, 116(5), 053508.
- [9] Florian, C., Fischer, D., Freiberg, K., Duwe, M., Sahre, M., Schneider, S., ... Bonse, J. (2021). Single Femtosecond Laser-Pulse-Induced Superficial Amorphization and Re-Crystallization of Silicon. *Materials*, 14(7), 1651.
- [10] Kiani, A., Venkatakrishnan, K., & Tan, B. (2009). Micro/nano scale amorphization of silicon by femtosecond laser irradiation. *Optics Express*, 17(19), 16518.
- [11] de Dood, M. J. A., Polman, A., Zijlstra, T., & van der Drift, E. W. J. M. (2002). Amorphous silicon waveguides for microphotonics. *Journal of Applied Physics*, 92(2), 649–653.
- [12] Garcia - Lechuga, M., Casquero, N., Wang, A., Grojo, D., & Siegel, J. (2021). Deep Silicon Amorphization Induced by Femtosecond Laser Pulses up to the Mid - Infrared. *Advanced Optical Materials*, 9(17), 2100400.
- [13] Steen, W.M., Mazumder, J. (2010) *Laser Material Processing* (4th edition). Springer – Verlag London.

- [14] Cavalleri, A., Sokolowski-Tinten, K., Bialkowski, J., Schreiner, M., & von der Linde, D. (1999). Femtosecond melting and ablation of semiconductors studied with time of flight mass spectroscopy. *Journal of Applied Physics*, 85(6), 3301–3309.
- [15] Silvestrelli, P. L., Alavi, A., Parrinello, M., & Frenkel, D. (1996). Ab initio Molecular Dynamics Simulation of Laser Melting of Silicon. *Physical Review Letters*, 77(15), 3149–3152.
- [16] Shank, C. V., Yen, R., & Hirlimann, C. (1983). Femtosecond-Time-Resolved Surface Structural Dynamics of Optically Excited Silicon. *Physical Review Letters*, 51(10), 900–902.
- [17] Tsididis, G. D., Stratakis, E., Loukakos, P. A., & Fotakis, C. (2013). Controlled ultrashort-pulse laser-induced ripple formation on semiconductors. *Applied Physics A*, 114(1), 57–68.
- [18] Zorba, V., Boukos, N., Zergioti, I., & Fotakis, C. (2008). Ultraviolet femtosecond, picosecond and nanosecond laser microstructuring of silicon: structural and optical properties. *Applied Optics*, 47(11), 1846.
- [19] Costache, F., Kouteva-Arguirova, S., & Reif, J. (2004). Sub-damage-threshold femtosecond laser ablation from crystalline Si: surface nanostructures and phase transformation. *Applied Physics A*, 79(4-6), 1429–1432.
- [20] Jeschke, H. O., Garcia, M. E., Lenzner, M., Bonse, J., Krüger, J., & Kautek, W. (2002). Laser ablation thresholds of silicon for different pulse durations: theory and experiment. *Applied Surface Science*, 197-198, 839–844.
- [21] Wang, X., Shen, Z.H., Lu, J., Ni, X.W. (2010). Laser-induced damage threshold of silicon in millisecond, nanosecond, and picosecond regimes. *Journal of Applied Physics*, 108(3), 033103.
- [22] Izawa, Y., Izawa, Y., Setsuhara, Y., Hashida, M., Fujita, M., Sasaki, R., ... Yoshida, M. (2007). Ultrathin amorphous Si layer formation by femtosecond laser pulse irradiation. *Applied Physics Letters*, 90(4), 044107.
- [23] Yater, J. A., & Thompson, M. O. (1989). Orientation dependence of laser amorphization of crystal Si. *Physical Review Letters*, 63(19), 2088–2091.
- [24] Bucksbaum, P. H., & Bokor, J. (1984). Rapid Melting and Regrowth Velocities in Silicon Heated by Ultraviolet Picosecond Laser Pulses. *Physical Review Letters*, 53(2), 182–185.
- [25] Jarutis, V., Paipulas, D., Jukna, V. (2023). Thermodynamical Analysis of the Formation of  $\alpha$ -Si Ring Structures on Silicon Surface. *Materials*, 16, 2205.
- [26] Palina, N., Mueller, T., Mohanti, S., & Aberle, A. G. (2011). Laser assisted boron doping of silicon wafer solar cells using nanosecond and picosecond laser pulses. 2011 37th IEEE Photovoltaic Specialists Conference.

- [27] Liu, J. M. (1982). Simple technique for measurements of pulsed Gaussian-beam spot sizes. *Optics Letters*, 7(5), 196.
- [28] Choi, T. Y., & Grigoropoulos, C. P. (2002). Plasma and ablation dynamics in ultrafast laser processing of crystalline silicon. *Journal of Applied Physics*, 92(9), 4918–4925.
- [29] <https://webbook.nist.gov/cgi/inchi?ID=C7440213&Type=JANAFS&Plot=on> (2024 03 09)
- [30] Lide, D. R., (2004). *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. 84th edition. CRC Press.
- [31] <https://refractiveindex.info/?shelf=main&book=Si&page=Schinke> (2024 03 09)
- [32] Van Driel, H. M. (1987). Kinetics of high-density plasmas generated in Si by 1.06- and 0.53- $\mu$ m laser pulses. *Physical Review B*, 35(15), 8166–8176.
- [33] Lipp, V. P., Rethfeld, B., Garcia, M. E., & Ivanov, D. S. (2014). Atomistic-continuum modeling of short laser pulse melting of Si targets. *Physical Review B*, 90(24).

Laura Tauraitė

## SILICIO PAVIRŠIAUS AMORFIZAVIMAS FEMTOSEKUNDINIAIS ŠVIESOS IMPULSAIS

### Santrauka

Silicis yra viena svarbiausių medžiagų technologijų pramonėje, todėl šis elementas jau kelis dešimtmečius yra itin patrauklus mokslinių tyrimų subjektas. Silicį apdirbant ultratrumpaisiais impulsais, bandinyje vyksta įvairūs procesai prieš pasiekiant abliacijos ribą – oksidacija, lydymasis, amorfizacija ir rekristalizacija. Silicio amorfizacija lazeriniais impulsais vyksta išsilydžiusiai medžiagai vėstant sparčiau nei juda rekristalizacijos frontas. Tuomet silicio gardelė neturi pakankamai laiko atstatyti tvarkingą kristalinę gardelę ir lieka amorfinės būsenos.

Amorfinės būsenos silicis pasižymi didesniu lūžio rodikliu ir atsparumu cheminiam ėsdinimui lyginant su kristalinės būsenos siliciu, todėl gali būti pritaikomas litografijai be ekspozicinės kaukės arba bangolaidžių gamyboje. Silicio amorfizacija priklauso nuo daugelio parametrų, įskaitant silicio optines savybes, spinduliuotės bangos ilgį, impulsų energiją, skaičių ir trukmę. Visų parametrų įtaka silicio modifikacijai dar nėra pilnai iširta.

Šio darbo tikslas – iširti bangos ilgio ir ultratrumpųjų impulsų voros parametrų įtaką silicio amorfizacijai femtosekundiniais impulsais.

Pagrindinės darbo išvados:

- Lyginant su vienu impulsu daromomis modifikacijomis, pažeidimai impulsų voromis mažina amorfizacijos langą dėl pastebimo ženklaus skirtumo tarp amorfizacijos ir rekristalizacijos slenksčių didėjimo greičio daugėjant impulsų (iki 56% sumažėjimas lyginant vieną impulsą su keturių impulsų vora). Voroje esant nanosekundiniam vėlinimui, pasireiškia didesnis amorfizacijos lango sumažėjimas bei atskirų impulsų ir bendros energijos amorfizacijos slenksčiai yra didesni nei esant tam pačiam impulsų skaičiui su pikosekundiniu vėlinimu.
- Susidaręs amorfinio silicio sluoksnis ant <100> orientacijos bandinių yra ryškūs tik darant pažeidimus 343 nm bangos ilgio impulsais. 515 ir 1030 nm bangos ilgiais gauti pažeidimai ant <100> orientacijos bandinių yra itin žemo kontrasto.
- Silicio modifikacijų skersmenys nepriklauso nuo silicio bandinyje esančių priemaišų naudojant 1030 nm, 515 nm ir 343 nm bangos ilgio femtosekundinius impulsus.
- Naudojant 1030 nm, 515 nm ir 343 nm bangos ilgių spinduliuotę, amorfizacijos slenkstis mažėja trumpėjant bangos ilgiui dėl efektyvesnės sugerties. Eksperimentiškai nustatytas amorfizacijos langas nepakinta regimajai ir IR spinduliuotei, tačiau veikiant UV bangos ilgio spinduliuote ryškios kristalizacijos ribos nepastebima.
- Darbe atliktas skaitmeninis modeliavimas rodo, jog silicio amorfizavimo ir rekristalizavimo procesai gali būti paaiškinami 1030 nm bangos ilgio spinduliuotei įskaičius dvifotonę sugertį be smūginės jonizacijos įtakos, tačiau 515 nm atveju dominuoja smūginė jonizacija ir vienfotonė sugertis. Šiame modelyje įskaičiuojamų parametrų kol kas nepakanka UV spinduliuotės pažeidimų modeliavimui.



Laura Tauraitė

## AMORPHIZATION OF SILICON SURFACE WITH FEMTOSECOND PULSES

### Summary

Silicon is one of the most important elements in electronics and technology industries which is why it is a particularly popular subject for scientific research. When irradiated by ultrashort laser pulses, interesting phenomena happen in silicon even before reaching the fluence threshold – oxidation, melting, amorphization and recrystallization. Silicon amorphization occurs when the melted material solidifies faster than it can reorder itself back to an organised crystalline state.

Amorphous silicon has a higher refractive index and resistivity to chemical etching which allows it to be used in waveguide production and maskless lithography. Silicon amorphization depends on a great number of parameters, including but not limited to laser wavelength, number of pulses, pulse energy, and duration. Despite the amount of works on the subject, the influence of all the parameters on silicon amorphization is not yet well known.

The aim of this study is to investigate the influence of laser burst mode and wavelength on silicon amorphization using femtosecond pulses.

The main conclusions of the study are:

- Burst mode exhibits up to 56% smaller amorphization window when compared to single pulse amorphization. Nanosecond delay between pulses in burst mode caused a smaller amorphization window and higher amorphization thresholds than picosecond delay.
- Amorphous silicon layer on <100> orientation samples was only clearly visible when using 343 nm pulses. 515 and 1030 nm pulse modifications on the same samples had very poor contrast.
- Silicon modification diameters do not depend on silicon doping when it is irradiated by 1030, 515 or 343 nm femtosecond pulses.
- For 1030, 515 and 343 nm irradiation, the shorter the wavelength, the lower the amorphization and recrystallization thresholds due to more effective absorption. The amorphization window remains the same for IR and visible wavelengths, however there was no visible recrystallization when using UV pulses.
- The numerical model used in the study accurately predicted silicon amorphization and recrystallization processes for 1030 nm pulses, when accounted for two-photon absorption but not impact ionisation. However, in the case of 515 nm pulses, impact ionisation and single-photon absorption were dominant. The processes accounted for in the current state of the model are not sufficient for UV wavelength pulse modelling.