

Численное моделирование лазерного отжига тонкой пленки аморфного кремния для солнечных элементов

А.В. Саенко, А.В. Палий, Е.П. Белоусов, А.Д. Хандыго, А.Н. Малофеев

*Институт нанотехнологий, электроники и приборостроения
Южного федерального университета*

Аннотация: Проведено численное моделирование распределения температуры при нагреве (отжиге) импульсным Nd:YAG лазером пленки аморфного кремния (a-Si) на поверхности AZO-стеклянной подложки. Моделирование осуществлялось на основе численного решения уравнения теплопроводности в программе Matlab для определения плотности энергии лазерного излучения необходимой для кристаллизации пленки a-Si. Для длины волны 1064 нм получено, что температура на поверхности пленки a-Si достигает максимальной величины в момент времени 146 нс при лазерном импульсе с Гауссовой временной формой. Показано, что для кристаллизации пленки a-Si толщиной порядка 800 нм лазерным излучением с наносекундной длительностью импульса оптимальная плотность энергии составляет 600-700 мДж/см², когда температура по толщине пленки a-Si соответствует 550-1250 °С.

Ключевые слова: численное моделирование, лазерный отжиг, распределение температуры, пленка a-Si, солнечный элемент.

Введение

В последние годы постепенно возрастает интерес к использованию лазерного отжига для кристаллизации тонких аморфных полупроводниковых пленок на недорогих не тугоплавких подложках с целью улучшения их структурных, функциональных и электрофизических свойств, а также повышения коэффициента полезного действия (КПД) солнечных элементов на их основе. Причина данного интереса связана с основными преимуществами лазерного отжига по сравнению с другими традиционными методами отжига (муфельная печь). Лазерное облучение материала приводит к кратковременному повышению температуры только внутри облучаемой области, что делает возможным проведение процесса локального отжига. Кроме того, различные материалы обладают разными коэффициентами поглощения на одной длине волны, что способствует большой селективности лазерного нагрева между различными слоями структуры.

Кристаллизация пленок аморфного кремния (a-Si) с применением печных отжига требует температур от 550 °С и выше и времени до десятков часов. Преимущество же поликристаллического Si (pc-Si) над a-Si очевидна – на порядки более высокая подвижность носителей заряда и более стабильные характеристики. В связи с этим одним из перспективных способов кристаллизации пленок a-Si на TCO-стеклянных подложках является образование зародышей кристаллической фазы (нанокристаллов) импульсным лазерным излучением и их дальнейший рост в условиях твердофазной кристаллизации [1-3].

В данной работе проведено численное моделирование распределения температуры при лазерном отжиге (нагреве) пленки a-Si на поверхности TCO-стеклянной подложки. Моделирование лазерного отжига выполнялось для импульсного Nd:YAG лазера с длиной волны излучения 532 нм и 1064 нм и длительностью импульсов 55 нс и 84 нс соответственно на основе численного решения уравнения теплопроводности в программе Matlab с целью определения плотности энергии лазерного излучения необходимой для кристаллизации пленки a-Si. Таким образом, необходимо получить лазерным отжигом пленку pc-Si, которая может функционировать в сочетании с пленкой a-Si в качестве активного слоя солнечного элемента. Для этого должна быть создана более толстая пленка pc-Si, чем пленка a-Si, чтобы обеспечить оптимальное поглощение солнечного излучения [4].

Численная модель лазерного отжига

Для исследования влияния плотности энергии лазерного излучения на кристаллизацию пленки a-Si толщиной 1 мкм (необходимо получить пленку pc-Si толщиной ~ 800 нм и a-Si толщиной ~ 200 нм) структуры солнечного элемента (рис. 1) разработана и представлена одномерная нестационарная численная модель отжига на основе уравнения теплопроводности [4-7]:

$$\rho_i c_i \frac{\partial T(x,t)}{\partial t} - k_i \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2} = (1-R)I_0(t) a_i \exp(-a_i x), \quad (1)$$

где ρ_i – плотность, c_i – удельные теплоемкость, k_i – коэффициент теплопроводности, a_i – коэффициент поглощения слоев a-Si, AZO и стекла, $I_0(t)$ – плотность мощности лазерного импульса во времени, R – коэффициент отражения от поверхности облучаемого слоя.

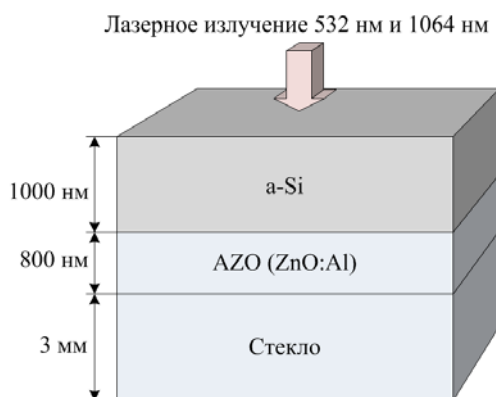


Рис. 1 – Схематичное изображение лазерного отжига пленки a-Si

Моделирование лазерного отжига осуществлялось равномерно распределенным по поверхности облучаемой пленки профилем луча. Плотность мощности изменялась по длительности лазерного импульса согласно Гауссовому распределению, которое аппроксимировалось следующим выражением для получения адекватных результатов [5, 7]:

$$I_0(t) = E_0 \exp\left(-4 \frac{(t-\tau)^2}{\tau^2}\right), \quad (2)$$

где E_0 – плотность энергии лазерного импульса, t – время моделирования, τ – длительность лазерного импульса.

Контакт облучаемой поверхности (пленка a-Si, $x = 0$) с окружающей средой (конвекционный теплообмен) учитывался с помощью граничных условий третьего рода [5, 6]:

$$k_i \frac{\partial T(0,t)}{\partial x} = h(T(0,t) - T_0), \quad (3)$$

где T_0 – температура окружающей среды, h – коэффициент конвекционной теплоотдачи, характеризующий интенсивность теплообмена пленки a-Si с окружающей средой.

Тыльная граница (стеклянная подложка, $x = x_I$) считалась термически изолированной (адиабатические условия) и на ней выполнялись граничные условия второго рода [3, 7]:

$$k_I \frac{\partial T(x_I, t)}{\partial x} = 0. \quad (4)$$

При моделировании начальные условия в момент времени $t = 0$ записывались следующим образом:

$$T(x_i, 0) = T_0. \quad (5)$$

Предполагалось, что на границе $x = x_i$ сопряжения i -го слоя с $(i+1)$ -ым слоем структуры a-Si/AZO/стекло тепловой контакт идеальный, то есть выполнялись условия непрерывности теплового потока и температуры [3, 7]:

$$T_i(x_i, t) = T_{i+1}(x_i, t), \quad (6)$$

$$k_i \frac{\partial T_i(x_i, t)}{\partial x} = k_{i+1} \frac{\partial T_{i+1}(x_i, t)}{\partial x}. \quad (7)$$

Численное решение выполнялось итерационным методом Якоби в программе Matlab с помощью неявной конечно-разностной схемы дискретизации на неравномерной пространственно-временной сетке.

Результаты численного моделирования

В табл. 1 представлены основные оптические и теплофизические параметры, используемые при моделировании лазерного воздействия на структуру a-Si/AZO/стекло.

Табл. 1 – Величины теплофизических и оптических параметров слоев структуры a-Si/AZO/стекло [8-10]

	a-Si	AZO	Стекло
α_i, M^{-1}	$2 \cdot 10^9$ (532 нм) $5 \cdot 10^5$ (1064 нм)	10^5	100
R	0,34	0	0
$\rho_i, \text{кг/м}^3$	2200	5620	2400
$c_i, \text{Дж/кг} \cdot \text{К}$	716	557	890
$k_i, \text{Вт/м} \cdot \text{К}$	1,16	20	1

В результате моделирования лазерного отжига пленки a-Si на AZO-стеклянной подложке получены распределения температуры по слоям структуры при различной плотности энергии в момент времени, соответствующий максимальной температуре на поверхности (рис. 2, а) и распределения температуры на поверхности a-Si от времени облучения при различной плотности энергии (рис. 2, б) для длин волн 532 нм и 1064 нм.

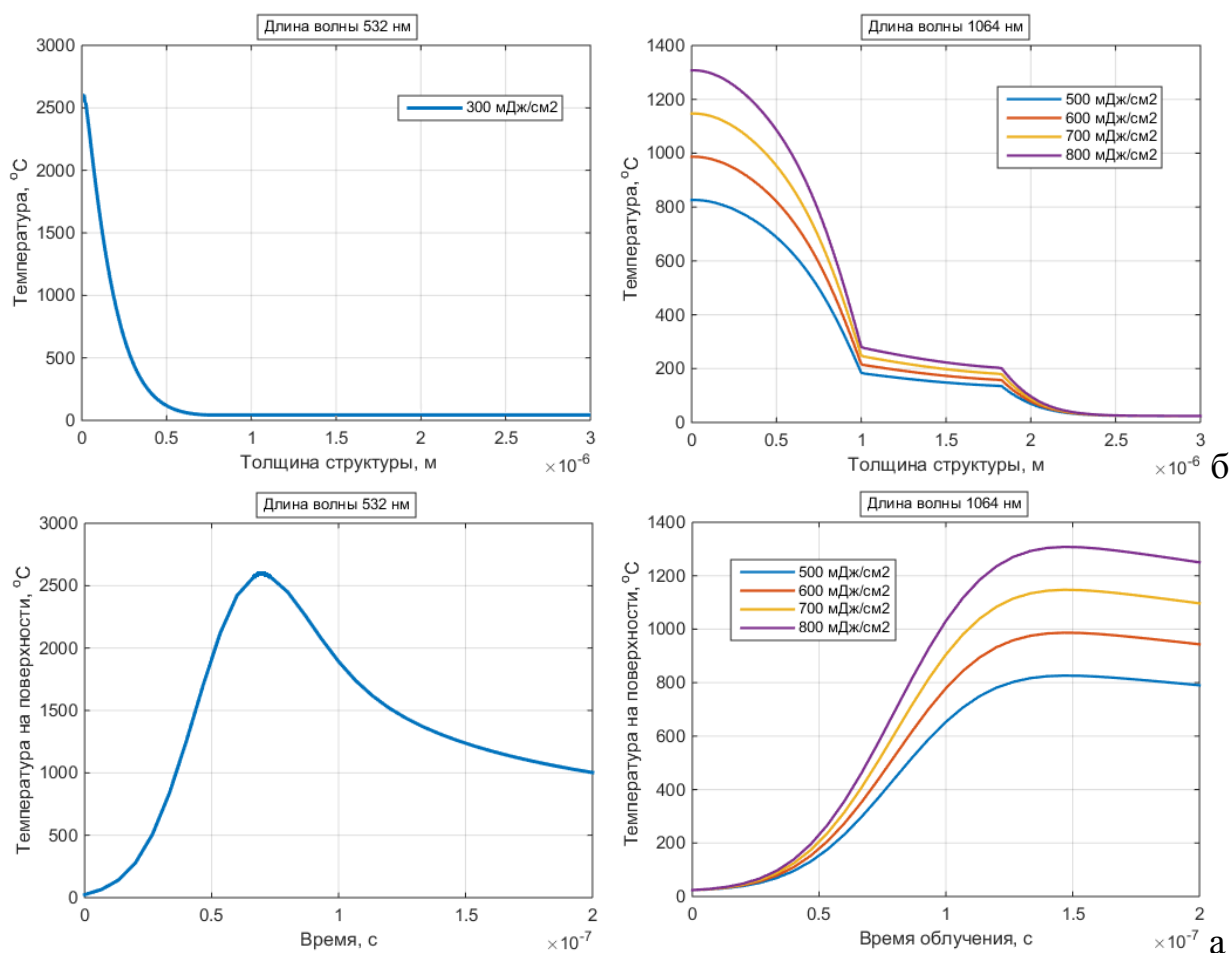


Рис. 2 – Распределения температуры по толщине структуры (а) и во времени (б) при лазерном отжиге для длин волн 532 нм и 1064 нм

Проведено сравнение распределений температуры в пленке a-Si для длин волн 532 нм и 1064 нм в процессе лазерного отжига. В случае длины волны 532 нм (плотность энергии 300 мДж/см²) получено сильное увеличение температуры поверхности пленки a-Si из-за высокого коэффициента поглощения ($\sim 10^5$ см⁻¹). Температура на поверхности поднимается значительно выше точки кипения a-Si (2357 °C), тогда как распределение температуры с глубиной уменьшается достаточно быстро, достигая комнатной температуры на глубине порядка 500 нм. Данное распределение температуры приводит к поверхностной абляции 100-200 нм a-Si и создает тонкий слой pc-Si (температура кристаллизации a-Si 550 °C). В случае длины волны 1064 нм поглощение значительно слабее ($\sim 10^3$ см⁻¹) и большая глубина проникновения лазерного излучения приводит к более равномерному распределению температуры по глубине. Поэтому для удовлетворения требований относительно большой глубины кристаллизации a-Si (~ 800 нм) использование 1064 нм является оптимальным выбором. При этом плотность энергии лазерного излучения должна составлять 600-700 мДж/см², что соответствует температуре на поверхности a-Si до 1250 °C (температура плавления) и поддерживает температуру по глубине пленки (~ 800 нм) выше 550 °C.

Выводы

Численное моделирование лазерного отжига показало, что для наносекундных импульсов лазерного излучения с длиной волны 1064 нм можно получить пленку pc-Si достаточно большой толщины для использования в качестве активного слоя солнечного элемента. Для длины волны 1064 нм получено, что температура на поверхности пленки a-Si достигает максимальной величины в момент времени 146 нс при лазерном импульсе с Гауссовой временной формой. Показано, что для кристаллизации пленки a-Si толщиной порядка 800 нм лазерным излучением с наносекундной

длительностью импульса оптимальная плотность энергии составляет 600-700 мДж/см², когда температура по толщине пленки a-Si соответствует 550-1250 °С.

Литература

1. Володин В.А, Качко А.С. Кристаллизация пленок аморфного гидрогенизированного кремния с применением фемтосекундных лазерных импульсов // Физика и техника полупроводников, 2011. Т. 45. С. 268-273.
 2. P. Vaeri, E. Rimini. Laser annealing of silicon // Materials Chemistry and Physics, 1996. Vol. 46. Is. 2-3. pp. 169-177.
 3. Парфенов В.А. Лазерная микрообработка материалов: учебное пособие. СПб: СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2011. 59 с.
 4. Darif M., Semmar N. Numerical Simulation of Si Nanosecond Laser Annealing by Comsol Multiphysics // Proc. of the COMSOL Conference, 2008. pp. 1-6.
 5. I. Theodorakos, I. Zergioti, V. Vamvakas, D. Tsoukalas, Y. S. Raptis. Picosecond and nanosecond laser annealing and simulation of amorphous silicon thin films for solar cell applications // Journal of Applied Physics, 2014. Vol. 115. P. 043108.
 6. Саенко А.В., Малюков С.П., Клуникова Ю.В., Бесполудин В.В., Бондарчук Д.А. Моделирование процесса лазерного отжига пленки TiO₂ для применения в солнечных элементах // Инженерный вестник Дона, 2016, № 1. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n1y2016/3517.
 7. Малюков С.П., Саенко А.В., Палий А.В., Бондарчук Д.А., Бесполудин В.В. Исследование распределения температуры в пленке TiO₂ при импульсном лазерном нагреве // Инженерный вестник Дона, 2017, № 3. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/N3y2017/4306.
 8. J. Forster, H. Vogt. Excimer Laser-Annealing of Amorphous Silicon Layers // Proceedings of the 2011 COMSOL Conference, 2011. Vol. 7. PP. 18-25.
-

9. H.C. Webber, A.G. Cullis, N.G. Chew. Computer simulation of high speed melting of amorphous silicon // Appl. Phys. Lett., 1983. Vol. 43(7). PP. 669-671.
10. Theodorakos I., Raptis Y.S., Vamvakas V., Tsoukalas D., Zergioti I. Laser annealing and simulation of amorphous silicon thin films for solar cell applications // Proceedings SPIE, 2014. V. 8967. Pp. 1-11.

References

1. Volodin V.A, Kachko A.S. Fizika i tehnika poluprovodnikov, 2011. T. 45. pp. 268-273.
 2. P. Baeri, E. Rimini. Materials Chemistry and Physics, 1996. Vol. 46. Is. 2-3. pp. 169-177.
 3. Parfenov V.A. Lazernaja mikroobrabotka materialov: uchebnoe posobie [Laser microprocessing of materials]. SPb: SPbGETU «LETI», 2011. 59 p.
 4. Darif M., Semmar N. Proc. of the COMSOL Conference, 2008. pp. 1-6.
 5. I. Theodorakos, I. Zergioti, V. Vamvakas, D. Tsoukalas, Y. S. Raptis. Journal of Applied Physics, 2014. Vol. 115. pp. 043108.
 6. Saenko A.V., Maljukov S.P., Klunnikova Ju.V., Bespoludin V.V., Bondarchuk D.A. Inženernyj vestnik Dona (Rus). 2016. № 1. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n1y2016/3517.
 7. Maljukov S.P., Saenko A.V., Palii A.V., Bondarchuk D.A., Bespoludin V.V. Inženernyj vestnik Dona (Rus). 2017, № 3. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/N3y2017/4306.
 8. J. Forster, H. Vogt. Proceedings of the 2011 COMSOL Conference, 2011. Vol. 7. PP. 18-25.
 9. H.C. Webber, A.G. Cullis, N.G. Chew. Appl. Phys. Lett., 1983. Vol. 43(7). PP. 669-671.
 10. Theodorakos I., Raptis Y.S., Vamvakas V., Tsoukalas D., Zergioti I. Proceedings SPIE, 2014. V. 8967. pp. 1-11.
-