

Laserkristallisation von Silicium

Von der Fakultät Elektrotechnik und Informationstechnik
der Universität Stuttgart zur Erlangung der Würde
eines Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.) genehmigte Abhandlung

Vorgelegt von

Ralf Dassow

aus Ludwigshafen

Hauptberichter: Prof. Dr. J. H. Werner

Mitberichter: Prof. Dr. H. Hügel

Tag der Einreichung: 20. Dezember 2000

Tag der mündlichen Prüfung: 17. Juli 2001

Institut für Physikalische Elektronik der Universität Stuttgart

2001

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung	vii
Abstract	ix
1 Einleitung	1
2 Grundlagen	5
2.1 Pulsenergie und Energiedichte von Laserstrahlung	5
2.2 Absorption von Laserstrahlung in Silicium	6
2.2.1 Absorption durch thermisch induzierte Ladungsträger	6
2.2.2 Absorption durch optisch induzierte Ladungsträger	7
2.2.3 Mehrfachreflexion der Laserstrahlung	8
2.3 Thermalisierung der Ladungsträger	10
2.4 Abkühlung durch Wärmediffusion	11
2.5 Kristallisation	12
2.5.1 Nukleation	12
2.5.2 Kristallwachstum aus der Schmelze	13
2.6 Dünnschichttransistoren	14
2.7 Verschiedene Laserkristallisationsprozesse	15
2.7.1 Großflächige Laserkristallisation	16
2.7.2 Manipulation der Absorption und Wärmediffusion	19
2.7.3 Sequentielle Prozesse	20
2.7.4 TFTs aus laserkristallisiertem Silicium	23
3 Experimentelle Methoden	25

3.1	Experimenteller Aufbau zur Laserkristallisation	25
3.1.1	Erzeugung und Formung des Laserstrahls	25
3.1.2	Substratpositionierung	26
3.1.3	Fokussierung	29
3.2	Probenherstellung	31
3.2.1	Abscheidung der Siliciumschichten	31
3.2.2	Prozessierung von TFTs	33
4	Kristallisation mit dem Nd:YVO₄-Laser	35
4.1	Einzelpulse	35
4.1.1	Schichtdickenabhängigkeit der Schmelzenergiedichte	37
4.2	Scans	41
4.2.1	Schwellenergie für laterales Wachstum	41
4.2.2	Großflächige Kristallisation	43
4.3	Durchsatz des SLS-Prozesses	45
4.3.1	Berechnung der maximalen Kristallisationsrate	45
4.3.2	Kristallisationsraten verschiedener Lasertypen	47
5	Numerische Simulation	51
5.1	Grundlagen	51
5.1.1	Randbedingungen und Vereinfachungen	53
5.1.2	Analytische Lösung	54
5.1.3	Numerische Simulation	55
5.2	Simulationsergebnisse	59
5.2.1	Zeitliche und räumliche Temperaturentwicklung	59
5.2.2	Schmelz- und Kristallisationsdynamik	64
6	Struktur und Wachstum	73
6.1	Struktur des polykristallinen Siliciums	73
6.2	Texturanalyse	77
6.2.1	Darstellung der Orientierung als $\langle hkl \rangle$ -Histogramm	77
6.2.2	$\langle 100 \rangle$ -Histogramme von laserkristallisiertem Silicium auf Glas . . .	79

6.2.3	$\langle 100 \rangle$ -Histogramme von laserkristallisiertem Silicium auf Glas mit SiN _x -Zwischenschicht	85
6.2.4	Korngrenztypen	86
6.3	Modellhafte Beschreibung der Kristallisation	87
6.3.1	Vergleich mit anderen Verfahren	88
6.3.2	Form der Wachstumsfront	89
6.3.3	Entstehung der diskreten Orientierungen	91
6.3.4	Entstehung der Oberflächentextur	94
6.3.5	Kornbreite	95
7	TFTs aus laserkristallisiertem Silicium	97
7.1	Einfluß der Kristallisationsparameter	97
7.1.1	Kanalorientierung und -dimension	97
7.1.2	Variation von Energie und Schichtdicke	100
7.1.3	Stabilität der TFTs	102
8	Ausblick	105
A	Näherungsfunktionen	107
B	Diskretisierung	111
B.1	Behandlung der Grenzflächen	112
	Formelzeichen und Abkürzungen	115
	Eigene Veröffentlichungen	121

Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit untersucht die Mechanismen der Laserkristallisation von 50 – 300 nm dicken Siliciumschichten auf Glas als eine der Basistechnologien zur Herstellung von Aktiv-Matrix-Displays. Zunächst werden die physikalischen Grundlagen der Laserkristallisation sowie die unterschiedlichen Kristallisationsverfahren erläutert. Numerische Simulationen der zeitlichen und räumlichen Temperaturverteilung während des Prozesses dienen dazu, die Einflüsse verschiedener Parameter auf die Kornstruktur und somit auf die elektrischen Eigenschaften von Dünnschichttransistoren zu verstehen.

Die durchgeführten Experimente verwenden das Verfahren des sequentiellen lateralen Wachstums, bei dem ein gepulster Laser die Körner einer polykristallinen Siliciumschicht schrittweise lateral verlängert. Mit diesem Prozeß lassen sich defektfreie Körner mit Längen von über 100 μm und Breiten von bis zu 3.5 μm herstellen. Durch die Entwicklung eines Autofokussystems ist die Herstellung von polykristallinem Silicium mit homogener Kristallitstruktur auf Flächen von derzeit $5 \times 5 \text{ cm}^2$ möglich. Die maximalen Dimensionen sind nur durch die Positioniermechanik der Proben eingeschränkt. Die Homogenität der Kristallitstruktur ist besonders wichtig für die Verwendung der kristallisierten Schichten als Ausgangsmaterial zur Fertigung von großflächigen Displays. Im Vergleich zu anderen Lasern zeichnet sich der erstmals zur Laserkristallisation eingesetzte Nd:YVO₄-Laser besonders durch seine hohe Repetitionsrate von bis zu 100 kHz aus. Theoretisch ist dadurch die Kristallisation von Siliciumschichten auf Glas mit einer Rate von 35 cm^2/s möglich.

Die Struktur des polykristallinen Siliciums kann durch die Wahl der experimentellen Bedingungen sehr definiert beeinflusst werden. So steigt z. B. die Kornbreite linear mit der Schichtdicke an. Aus einer Messung der Orientierungen der einzelnen Körner mittels Elektronen-Rückstreu-Analyse wurde die Korngrenzpopulation in den kristallisierten Schichten bestimmt. Es treten überwiegend elektrisch nicht bzw. wenig aktive Korngren-

zen vom Typ $\Sigma=3$ bzw. $\Sigma=9$ auf. Durch die Abscheidung des Siliciums auf einer SiN-Schicht, bzw. durch sehr hohe Repetitionsraten des Lasers, wird der Anteil der elektrisch inaktiven $\Sigma=3$ -Korngrenzen auf bis zu 99% erhöht.

Mittels numerischer Simulation der Laserkristallisation wurden die Einflüsse auf die zeitlichen Abläufe der Kristallisation untersucht und mit den experimentellen Ergebnissen korreliert. Die Geschwindigkeit, mit der das Silicium aus der flüssigen Phase kristallisiert, hat einen wesentlichen Einfluß auf die Ausbildung von Vorzugsorientierungen sowie die Breite der Kristallite. Eine Variation der Siliciumdicke, der Pulsenergie des Lasers, der Repetitionsfrequenz des Lasers sowie die Verwendung unterschiedlicher Substrate ermöglicht die gezielte Variation der Kristallisationsgeschwindigkeit zwischen ca. 7 m/s und 24 m/s. Bei den langsamsten Kristallisationsgeschwindigkeiten werden die Körner des polykristallinen Siliciums am breitesten und der Anteil der $\Sigma=3$ -Korngrenzen am größten. Auch bei den höchsten Pulsrepetitionsraten von 100 kHz, bei denen die mittlere Substrattemperatur auf ca. 500 °C steigt und die Kristallisationsfront am langsamsten ist, kristallisiert das Silicium innerhalb von maximal 220 ns.

Da das Wachstum nach jedem Puls unterbrochen wird, unterscheiden sich die Vorzugsorientierungen des polykristallinen Siliciums von denen, die sich bei kontinuierlichen Prozessen, wie z.B. der Zonenschmelzkristallisation, ausbilden. Im Gegensatz zu den kontinuierlichen Prozessen wird das Wachstum nicht von der langsamsten Kristallisationsrichtung ($\langle 111 \rangle$ -Richtung) bestimmt, sondern von der schnellsten ($\langle 100 \rangle$ -Richtung).

Das Verfahren der sequentiellen lateralen Laserkristallisation ermöglicht die Herstellung von Dünnschichttransistoren auf Glas mit ausgezeichneten elektronischen Eigenschaften. So betragen beispielsweise die maximal erzielten Feldeffektbeweglichkeiten μ_n , μ_p der Elektronen bzw. Löcher in dem polykristallinen Silicium $\mu_n = 510 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ bzw. $\mu_p = 230 \text{ cm}^2/\text{Vs}$. Die Homogenität der Schichten auf einer Fläche von $5 \times 5 \text{ cm}^2$ resultiert in Standardabweichungen der Feldeffektbeweglichkeit von n- und p-Kanal-TFTs von lediglich $\Delta\mu/\mu = \pm 5\%$. Die sehr guten elektronischen Eigenschaften liegen an der gezielt eingestellten Struktur des polykristallinen Siliciums, die das Design von Bauelementen ermöglicht, bei denen der Stromfluß nicht durch Korngrenzen behindert wird.

Abstract

The present contribution investigates the laser crystallization of thin silicon films deposited on glass substrates which is one of the key technologies for the production of active matrix displays. First of all, the basics of laser crystallization as well as the different crystallization processes are described. Numerical simulations of temporal and spatial temperature distributions during these processes serve to understand the influence of different parameters on the grain structure. The latter in turn elucidates the electrical properties of thin film transistors.

In the experiments, the sequential lateral solidification process elongates the grains of the polycrystalline silicon films with each subsequent pulse of the laser. This process facilitates the fabrication of defect free grains with a length exceeding $100\ \mu\text{m}$ and a width of up to $3.5\ \mu\text{m}$. The development of an autofocussing unit makes it possible to produce polycrystalline silicon with a homogeneous grain structure on areas of $5 \times 5\ \text{cm}^2$. Thereby, the processable area is only limited by the geometry of the sample positioning system. The homogeneity of the grain structure is extremely important for the application of the crystalline films in large area displays. The Nd:YVO₄ laser which was used for laser crystallization for the first time differs from other lasers in that it has an extremely high upper repetition rate of 100 kHz. Theoretically, the high repetition rate facilitates the crystallization of an area of $35\ \text{cm}^2$ per second.

The experimental parameters strongly influence the crystalline structure of the polycrystalline silicon films. For instance, the grain width increases linearly with the film thickness. The basis for the calculation of the grain boundary population in the crystalline films was the measurement of the grain orientation by electron backscattering diffraction. Grain boundaries are mainly of the type $\Sigma=3$ and $\Sigma=9$. This means that they show only little or even no electrical activity. A deposition of the silicon film on a SiN layer and the

use of the highest repetition rates, respectively, increase the percentage of the electrically inactive $\Sigma=3$ grain boundaries to up to 99%.

Numerical simulations of the temporal crystallization process correlate experimental parameters and experimental results. The lateral crystallization velocity of the liquid silicon strongly influences the texturing of the polycrystalline Si films and the average grain width. A variation of the film thickness, the laser pulse energy, the laser repetition rate or the choice from different substrates, varies the crystallization velocity between approximately 7 m/s and 24 m/s. Even by the use of the highest repetition rates of 100 kHz, which elevate the average temperature to 500 °C, the silicon crystallizes within 220 ns. Consequently, the mechanisms of the lateral crystal growth induced by the pulsed laser differs from continuous growth processes. In contrast to the latter one, where the slowest $\langle 111 \rangle$ -directions dominate the growth process, the fastest growing $\langle 100 \rangle$ -directions play a major role.

The use of the lateral solidification process enables the fabrication of thin film transistors with excellent electrical properties. For example, the maximum electron and hole field effect mobilities are $\mu_n = 510 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ and $\mu_p = 230 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, respectively. As a result of the homogeneity of the polycrystalline Si, the standard deviation of the n- and p- channel field effect mobility is only $\Delta\mu/\mu = \pm 5\%$. The excellent electrical properties of the devices are a result of the unique grain structure which enables the design of devices where the electrical transport is not influenced by grain boundaries.

Kapitel 1

Einleitung

Flüssigkristalldisplays sind zur Zeit die am weitest verbreiteten Vertreter flacher Displays. Für den Markt der Aktiv-Matrix-Flüssigkristall-Displays (Active Matrix Liquid Crystal Display = AMLCD) wird in den kommenden Jahren eine rasante Entwicklung erwartet [1]. Ein Schwerpunkt der Anwendungen wird im Bereich der Computerbildschirme liegen und neben dem heute üblichen Einsatz als Display portabler Computer auch den Ersatz der Kathodenstrahlbildschirme bei stationären Homecomputern umfassen. Desweiteren wird erwartet, daß die Nachfrage nach AMLCDs für Video- und Digitalkameras, Taschenfernsehgeräte und -spiele und auch in der Automobilindustrie stark zunimmt.

Heute gängige AMLCDs verwenden Dünnschicht-Transistoren (Thin Film Transistor = TFT) aus amorphem Silicium (a-Si) als Schalter zur Ansteuerung der einzelnen Bildpunkte [2]. Dies liegt hauptsächlich daran, daß zur Herstellung solcher Displays keine Prozesse mit Temperaturen über 400°C benötigt werden und infolge dessen kostengünstiges Glas als transparentes Trägermaterial des Displays Verwendung finden kann. Zur Ansteuerung der a-Si-TFTs werden externe, d. h. nicht auf dem Display integrierte, Treiberschaltungen eingesetzt. Für ein TV-Display mit beispielsweise 575 Spalten und 720 Zeilen sind zur Verbindung der Treiber mit dem Display insgesamt 1295 Verbindungen nötig.

Zur Senkung der Produktionskosten wird eine Integration der Treiberschaltungen auf dem Display angestrebt [3]. Die Anforderungen an die hierzu benötigten Treiber-TFTs unterscheiden sich von denen an die Bildpunkttransistoren. Um z. B. ein TV-Bild mit üblichen Spaltenfrequenzen von 10 MHz darzustellen, müssen die TFTs eine Feldeffekt-

beweglichkeit $\mu > 100 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ besitzen, die weit über den typischen Feldeffektbeweglichkeiten $\mu \approx 1 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ von a-Si-TFTs liegt [4]. Zur Implementierung der Treiber auf dem Display wird deshalb kristallines Silicium (c-Si) benötigt, was zu Problemen in der Prozessierung führt. Gute a-Si-TFTs benötigen einen hohen Wasserstoffgehalt, der die Schichten elektrisch passiviert. Bei den zur Herstellung von c-Si-Schichten hoher elektronischer Qualität benötigten hohen Temperaturen entweicht aber der Wasserstoff aus dem a-Si und verschlechtert dessen Qualität. Einen Ausweg bietet die lokale Kristallisation des a-Si mit Laserpulsen [5].

Wegen der geschilderten Problematik einer gemischten a-Si/c-Si Technologie wird vielfach dazu übergegangen, das Display mit den Treibern komplett aus c-Si zu fertigen. Die Temperaturobergrenze der Prozesse ist dadurch nur durch das Glas auf 500-600 °C beschränkt. Zur Herstellung der kristallinen Schichten gibt es verschiedene Ansätze. Eine direkte Abscheidung von c-Si auf das Glassubstrat liefert polykristallines Silicium (poly-Si) mit Korngrößen von ca. 100 nm. Typische Beweglichkeiten von TFTs aus solchen Schichten liegen wegen der großen Defektdichte durch Korngrenzen und Intrakorndefekte lediglich bei 5-10 cm^2/Vs [6, 7]. Eine Abscheidung von a-Si, gefolgt von einer Festphasenkristallisation für 4-20 Stunden bei bis zu 600 °C, liefert Körner mit einem Durchmesser bis zu einigen Mikrometern. Die Defektdichte innerhalb der Körner ist allerdings hoch [8], so daß typische Beweglichkeiten von TFTs aus festphasenkristallisiertem Silicium kleiner als 100 cm^2/Vs sind. Es wurden allerdings auch schon Beweglichkeiten von $\mu = 158 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ erzielt [9].

Polykristallines Silicium höherer Qualität erhält man durch den Einsatz von Lasern zum kurzzeitigen Aufschmelzen des Siliciums. Bei der auf den Laserpuls folgenden Kristallisation entsteht poly-Si, dessen Körner im Inneren nahezu defektfrei sind [8]. Die mittlere thermische Belastung des Glases ist bei der Verwendung von gepulsten Lasern mit Pulslängen im Bereich einiger zehn Nanosekunden gering, so daß auch kurzzeitige Temperaturspitzen oberhalb des Schmelzpunktes $T_m = 1687 \text{ K}$ von Silicium das Glas nicht zerstören. Der in der Literatur am häufigsten eingesetzte Laser ist der XeCl-Excimerlaser, da er in der Halbleiterindustrie bereits für die Lithographie benutzt wird und eine dementsprechend hohe Entwicklungsstufe erreicht hat. Aus laserkristallisierten, polykristallinen Siliciumschichten wurden TFTs gefertigt, deren Beweglichkeit typischerweise zwischen

$\mu = 150 \dots 400 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ liegt. Durch spezielle Prozesse, welche die Lage der Körner festlegen, ist es möglich TFTs innerhalb eines einzelnen Kornes zu fertigen [10, 11] und Beweglichkeiten von bis zu $\mu = 560 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ zu erhalten. Neben der Herstellung von TFTs auf Glassubstraten ermöglicht die Laserkristallisation auch die Herstellung von hochwertigen Bauelementen auf leichten und/oder flexiblen Plastiksubstraten [12, 13]. Ein großer Nachteil der bisher in der Literatur vorgestellten Prozesse ist die große statistische Schwankung der Bauelementeigenschaften, die ihre Ursache in einer statistischen Korngrößenverteilung hat. Prozesse, welche die Lage der Körner vorgeben, können die Schwankungen verringern, sind ihrerseits aber entweder sehr aufwendig oder sehr langsam.

Die vorliegende Arbeit untersucht die Fragestellung, wie sich mittels Laserkristallisation strukturell und elektronisch homogene polykristalline Siliciumschichten mit einem möglichst einfachen und schnellen Verfahren auf großen Flächen herstellen lassen. Ein Hauptaugenmerk liegt dabei auf der Entstehung von Korngrenzen und deren elektrischer Aktivität, die den elektrischen Transport in polykristallinem Silicium entscheidend beeinflusst.

Kapitel 2 beschreibt die Grundlagen der Laserkristallisation und stellt unterschiedliche Kristallisationsverfahren vor.

Die experimentellen Voraussetzungen für den in dieser Arbeit verwendeten sogenannten SLS-(Sequential Lateral Solidification) Prozeß sowie die Herstellung der TFTs werden in Kapitel 3 erläutert.

Kapitel 4 beschreibt die eigenen Laserkristallisationsexperimente. Eine Abschätzung der maximalen Kristallisationsrate zeigt, daß nicht die Pulsenergie des Lasers, sondern vielmehr seine maximale Repetitionsrate für die Kristallisationsrate entscheidend ist. Deshalb wird in dieser Arbeit erstmals ein Nd:YVO₄-Laser mit einer maximalen Repetitionsrate von 100 kHz benutzt. Mit dieser Repetitionsrate läßt sich theoretisch eine Kristallisationsrate von 35 cm²/s erreichen.

Die numerischen Simulationen in Kapitel 5 dienen als Basis für das Verständnis und die Optimierung des Kristallisationsprozesses. Es werden die Einflüsse der Siliciumschichtdicke, der Pulsenergie und der Repetitionsrate des Lasers auf die Schmelz- und Kristallisationsdynamik untersucht.

Kapitel 6 korreliert die Ergebnisse der Simulationen mit den Vorzugsorientierungen,

die bei den verschiedenen Parametern auftreten und beschreibt den Kristallisationsvorgang modellhaft. Entscheidende Einflüsse auf die Ausbildung der auftretenden Texturen haben die Kristallisationsgeschwindigkeit des Siliciums sowie die Bildungsenergien der Korngrenzen. Eine Kontrolle der lateralen und vertikalen Temperaturgradienten ermöglicht die gezielte Beeinflussung der Struktur des polykristallinen Siliciums.

Die Einflüsse der Korngröße sowie der Korngrenzen auf die Eigenschaften von TFTs beschreibt Kapitel 7. Die gezielte Herstellung von polykristallinen Schichten mit einem hohen Anteil an elektrisch inaktiven Korngrenzen resultiert in n- bzw. p-Kanal-TFTs mit mittleren Feldeffektbeweglichkeiten $\mu_n = 476 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ bzw. $\mu = 217 \text{ cm}^2/\text{Vs}$. Die sehr gute strukturelle Homogenität der kristallisierten Schichten resultiert in einer Standardabweichung der elektrischen Eigenschaften der TFTs von lediglich 5% auf Flächen von $5 \times 5 \text{ cm}^2$.

Kapitel 2

Grundlagen

Dieses Kapitel beschreibt die physikalischen Grundlagen der Laserkristallisation und stellt verschiedene Kristallisationsverfahren und Ergebnisse von Dünnschichttransistoren aus der Literatur vor.

2.1 Pulsenergie und Energiedichte von Laserstrahlung

Die Gesamtenergie

$$E = \int_{\tau} \int_A I(\vec{r}, t) dA dt \quad (2.1)$$

eines Laserpulses errechnet sich aus der zeit- und ortsabhängigen Intensität $I(\vec{r}, t)$ der Strahlung durch Integration über den Strahlquerschnitt A und die zeitliche Länge τ des Pulses. Für die Materialbearbeitung mit gepulster Laserstrahlung ist die Energiedichte

$$D = \int_{\tau} I(\vec{r}, t) dt \quad (2.2)$$

von Bedeutung. Bei einem räumlich konstanten Laserprofil wird Gl. (2.2) zu $D = E/A$. Durch optische Elemente kann der Strahlquerschnitt und somit auch die Energiedichte D des Lasers einfach variiert werden.

2.2 Absorption von Laserstrahlung in Silicium

Beim Durchgang von elektromagnetischer Strahlung absorbiert eine Schicht der Dicke dz die Intensität $dI = I(z) \alpha(z) dz$. Bei konstantem Absorptionskoeffizienten α wird daraus das Lambert-Beersche Gesetz für die Intensität

$$I(z) = I_0 e^{-\alpha z} \quad (2.3)$$

in der Tiefe z der absorbierenden Schicht. Der Absorptionskoeffizient α ist unter anderem stark abhängig von der Wellenlänge. Der indirekte Halbleiter Silicium absorbiert Photonen mit Energien $1.2 \text{ eV} < h\nu < 3.4 \text{ eV}$ bei niedrigen Intensitäten hauptsächlich durch den Übergang von Elektronen über die indirekte Bandlücke bei gleichzeitiger Emission oder Absorption von Phononen. Der Absorptionskoeffizient hat für die in dieser Arbeit verwendete Wellenlänge $\lambda = 532 \text{ nm}$ den Wert $\alpha = 8.24 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-1}$ [14].

Die Generationsrate von Ladungsträgern nimmt proportional mit der Intensität der einfallenden Laserstrahlung zu [15]. Intensitäten I , bei denen die Generationsrate die Relaxationsrate der Ladungsträger übersteigt, erhöhen die Zahl der Ladungsträger in angeregten Zuständen stark. Dadurch wird eine Vielzahl weiterer Absorptionsprozesse möglich, die die optischen Eigenschaften von Silicium und somit dessen Absorptionskoeffizienten α verändern. Sie lassen sich in Prozesse, die durch Ladungsträgeranregung oder durch Erwärmen des Kristallgitters hervorgerufen werden, unterteilen. Der wichtigste zusätzlich zur Interbandabsorption stattfindende Absorptionsprozeß ist die Absorption freier Ladungsträger [15, 16].

2.2.1 Absorption durch thermisch induzierte Ladungsträger

Um Silicium auf Glas mit dem Laser zu kristallisieren, muß zumindest eine dünne Schicht aufgeschmolzen, d.h. bis über die Schmelztemperatur $T_m = 1687 \text{ K}$ erwärmt werden. Bei dieser Erwärmung verringert sich die Bandlücke

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\beta_1 T^2}{T + \beta_2} \quad (2.4)$$

mit den Konstanten $E_g(0) = 1.17 \text{ eV}$, $\beta_1 = 4.73 \cdot 10^{-4} \text{ eV K}^{-1}$ und $\beta_2 = 636 \text{ K}$ [17]. Die Bandlücke E_g und die Temperatur T gehen in die Fermiverteilung für die Ladungsträger

ein. Durch die Erwärmung ändert sich deshalb die Besetzung der Zustände mit Elektronen oder Löchern im thermischen Gleichgewicht. Die intrinsische Ladungsträgerdichte

$$n_i \propto T^{3/2} e^{-E_g(T)/2kT} \quad (2.5)$$

nimmt mit zunehmender Temperatur und abnehmender Bandlücke stark zu [17]. Der Beitrag α_{Th} dieser thermisch induzierten freien Ladungsträger zur Absorption steigt dadurch stark an. Die experimentellen Daten lassen sich für Photonenenergien unter 3 eV gut durch

$$\alpha_{Th} \approx \alpha_0 e^{T/T_R} \quad (2.6)$$

anpassen [18]. Die Parameter α_0 und T_R sind wellenlängenabhängig und nehmen für den in dieser Arbeit verwendeten Laser der Wellenlänge $\lambda = 532$ nm die Werte $\alpha_0 = 5.02 \times 10^3$ cm⁻¹ und $T_R = 430$ K an [19].

2.2.2 Absorption durch optisch induzierte Ladungsträger

Die zur Kristallisation von Silicium mit Laserpulsen der Länge $\tau \approx 20$ ns benötigten Energiedichten D liegen je nach Schichtdicke und thermischen Eigenschaften der Proben im Bereich von $D = 0,1 \dots 1$ J/cm² [20]. Bei diesen Energiedichten und Pulslängen werden Ladungsträgerkonzentrationen in der Größenordnung $n \approx 10^{20}$ cm⁻³ generiert [21]. Der Beitrag α_{OI} der optisch induzierten freien Ladungsträger zur Absorption ergibt sich aus der Konzentration n der Elektron-Loch-Paare sowie deren Absorptionsquerschnitt σ_{FL} zu

$$\alpha_{OI} = n \sigma_{FL}. \quad (2.7)$$

Nach der klassischen Theorie der Absorption freier Ladungsträger ist $\sigma_{FL} \propto \lambda^2$ [19]. Somit ist ihr Beitrag zur Absorption vor allem im Infraroten von Bedeutung. Daten für den Beitrag freier Ladungsträger zur Absorption von Laserpulsen mit hohen Intensitäten gibt es in der Literatur deshalb vorwiegend für CO₂-Laser ($\lambda = 10.6$ μm) und Nd:YAG-Laser ($\lambda = 1,06$ μm) [22, 23]. Nach meinem Kenntnisstand der Literatur liegen keinerlei Absorptionsdaten von optisch induzierten Ladungsträgern bei $\lambda = 532$ nm vor. Untersucht wurde allerdings die Absorption von Laserpulsen in dotiertem Silicium mit Ladungsträgerkonzentrationen in vergleichbarer Größenordnung. Ein Anstieg der Phosphordotierung von $n_{Ph} < 10^{14}$ cm⁻³ auf $3 \cdot 10^{20}$ cm⁻³ führt zu einer Erhöhung von $\alpha \approx 1.1 \cdot 10^4$ cm⁻¹ auf $1.5 \cdot 10^4$ cm⁻¹ (lineare Interpolation der Daten aus Ref. [24] für $\lambda = 500$ und $\lambda = 550$ nm).

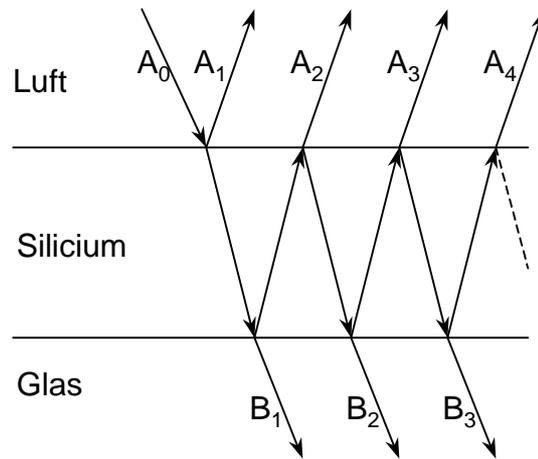


Abbildung 2.1: Vielstrahlinterferenz an zwei planparallelen Grenzschichten. Nach Ref. [25].

2.2.3 Mehrfachreflexion der Laserstrahlung

Bei Raumtemperatur ist die Eindringtiefe $1/\alpha = 1.2 \mu\text{m}$ von elektromagnetischer Strahlung der Wellenlänge $\lambda = 532 \text{ nm}$ größer als die Dicke $d = 50 \dots 300 \text{ nm}$ der verwendeten Siliciumschichten. Deshalb muß man besonders für kleine Schichtdicken d Reflexionen des Laserstrahls an den Grenzflächen Luft/Silicium und Silicium/Glas berücksichtigen.

Für optisch glatte Oberflächen mit einer Rauigkeit, die klein gegen die halbe Wellenlänge $\lambda/(2n_{Si})$ im Silicium ist, müssen außerdem Interferenzeffekte berücksichtigt werden. Gleichung (2.3) ist dann nicht mehr gültig. Die in der Schicht absorbierte Intensität I_A kann aus den Intensitäten I_R und I_A des reflektierten bzw. transmittierten Lichtes über

$$I_A = I_0 - I_R - I_T, \quad (2.8)$$

mit der einfallenden Intensität I_0 berechnet werden. Die Intensität der einfallenden ebenen Welle mit der Wellenzahl K und der elektrischen Feldstärke $E_0 = A_0 \exp[i(\omega t - Kz)]$ ist über

$$I_0 = 2c\epsilon_0 A_0 A_0^* \quad (2.9)$$

mit der komplexen Amplitude A_0 und deren komplex Konjugierten A_0^* verknüpft. Dabei ist c die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum und ϵ_0 die Dielektrizitätskonstante. Die komplexe Amplitude A der reflektierten Welle $E_R = A \exp[i(\omega t - Kz)]$ ist nach Abb. 2.1

$$A = \sum_{m=1}^{\infty} A_m e^{im\delta}. \quad (2.10)$$

Äquivalent dazu gilt für die Amplitude B der transmittierten Welle

$$B = \sum_{m=1}^{\infty} B_m e^{i m \delta}. \quad (2.11)$$

In den Experimenten trifft der Strahl senkrecht auf die Oberfläche, so daß der Phasenunterschied zwischen zwei Strahlen A_n und A_{n+1} bzw. B_n und B_{n+1} nach einer zusätzlichen Reflexion

$$\delta = \frac{4 \pi n_{Si} d}{\lambda} \quad (2.12)$$

beträgt. An einer Grenzfläche wird eine Welle mit der Amplitude A_0 in eine reflektierte Welle mit der Amplitude $A_0 \sqrt{R}$ und eine transmittierte mit $A_0 \sqrt{1-R}$ aufgespalten. Wegen des senkrechten Lichteinfalls ist das Reflexionsvermögen $R = I_R/I_0$ polarisationsunabhängig. Mit den Koeffizienten R_1 bzw. R_2 der Reflexion an der Grenzfläche Luft/Silicium bzw. Silicium/Glas ergibt sich aus Gl. (2.10) und Abb. 2.1

$$|A_m| = |A_0| (1 - R_1) \sqrt{R_1}^{(m-2)} \sqrt{R_2}^{(m-1)} e^{-2(m-1)\alpha d}, \quad \text{für } m \geq 2 \quad (2.13)$$

$$A_1 = -A_0 \sqrt{R_1} \quad (2.14)$$

bzw.

$$|B_m| = |A_0| \sqrt{1 - R_1} \sqrt{1 - R_2} \sqrt{R_1 R_2}^{(m-1)} e^{-2(m-1)\alpha d}, \quad \text{für } m \geq 1 \quad (2.15)$$

Für die inkohärente Reflexion, die z.B. an Oberflächen mit Rauigkeiten größer als $\lambda/(2n_{Si})$ auftritt, mittelt sich die Phasenbeziehung der verschiedenen Teilstrahlen heraus. Die Amplituden der einzelnen Wellen brauchen nicht komplex betrachtet zu werden, stattdessen erhält man die Intensitäten

$$I_R = 2\epsilon_0 c \sum_{m=1}^{\infty} A_m^2 \quad (2.16)$$

$$I_T = 2\epsilon_0 c \sum_{m=1}^{\infty} B_m^2 \quad (2.17)$$

mit den Amplituden aus Gl. (2.13) bzw. (2.15).

Abbildung 2.2 zeigt die Erhöhung der Absorption durch Vielfachreflexionen im Vergleich zum einmaligen Durchgang des Lichtes mit Absorption nach dem Lambert-Beerschen-Gesetz. Die Minima der Oszillationen haben einen Abstand von $\lambda/(2n_{Si})$.

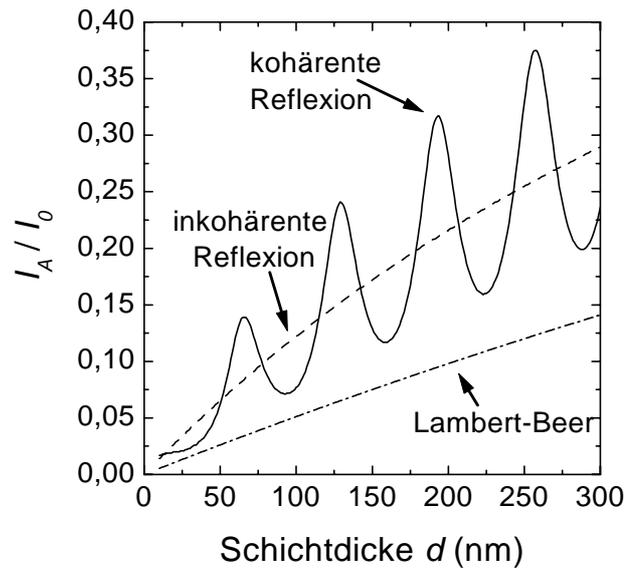


Abbildung 2.2: Mit Gln. (2.13) und (2.15) berechnete Absorption von Licht der Wellenlänge $\lambda = 532$ nm in einer Siliciumschicht der Dicke d , bei einer Temperatur $T = 300$ K. Die Materialdaten für Silicium stammen aus Ref. [14].

2.3 Thermalisierung der Ladungsträger

Die Energie eines Laserpulses wird durch Anheben von Ladungsträgern in höhere Zustände absorbiert, wie Abb. 2.3 illustriert. Die Energie der bei den indirekten Interbandübergängen beteiligten Phononen ist dabei klein gegen die Energie, die den Ladungsträgern zugeführt wird. Folglich wird durch die Lichtabsorption sehr wenig Energie auf das Gitter übertragen. Durch Plasmonenemission und Stöße der angeregten Elektronen untereinander relaxieren die Ladungsträger mit einer Zeitkonstanten $\tau_{Pl} \approx 10^{-14}$ s und bilden ein Elektronenplasma. Durch Augerrekombination findet ein Energieaustausch mit einer Zeitkonstanten $\tau_{Auger} \approx 10^{-12}$ s zwischen den angeregten Elektronen im Leitungsband und Löchern im Valenzband statt [21]. Die Augerrekombination, d.h. Rekombination von Elektron-Lochpaaren mit gleichzeitiger Anregung eines weiteren Ladungsträgers, begrenzt die Zahl der freien Ladungsträger auf einige 10^{20} cm^{-3} [26].

Da die Ladungsträgerthermalisierung ohne Beitrag des Gitters abläuft, ist die Ladungsträgertemperatur sehr viel größer als die Temperatur T des Gitters. Die Erwärmung des Kristallgitters erfolgt durch Relaxation von angeregten Ladungsträgern unter Emission von Phononen mit einer Zeitkonstante $\tau_{ph} \approx 10^{-12}$ s, die mehr als vier Größenord-

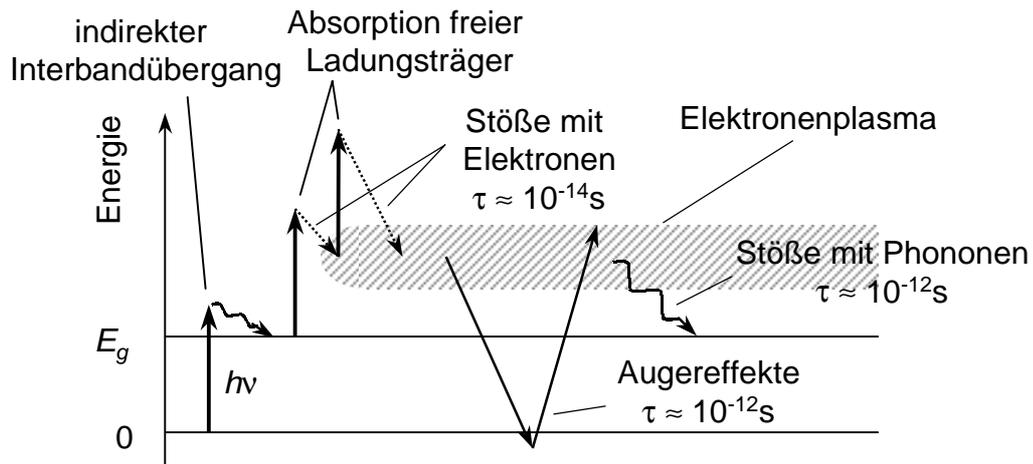


Abbildung 2.3: Durch Absorption der Laserstrahlung werden Elektronen über die indirekte Bandlücke des Siliciums in das Leitungsband gehoben. Die Absorption der freien Ladungsträger und die schnelle Relaxation durch Stöße mit anderen Ladungsträgern führen zur Ausbildung eines Plasmas. Augerrekombination bringt Elektronen und Löcher in ein thermisches Gleichgewicht. Der Energieübertrag an das Gitter durch Erzeugung oder Vernichtung von Phononen erfolgt mit einer Zeitkonstanten von ca. 10^{-12} s.

nungen unter der Dauer $\tau = 10 \dots 50$ ns des Laserpulses liegt. Sofern die Pulsenergie des Lasers ausreicht, wird das Silicium also schon während des Laserpulses geschmolzen.

2.4 Abkühlung durch Wärmediffusion

Die Siliciumschicht absorbiert einen von der Schichtdicke d abhängigen Anteil des Laserlichts und wird dadurch stark erwärmt und aufgeschmolzen, falls die Temperatur die Schmelztemperatur $T_m = 1687$ K des Siliciums überschreitet. Das unter der Siliciumschicht liegende Glassubstrat absorbiert bei $\lambda = 532$ nm nahezu kein Licht. Ihm wird durch den Laserstrahl deshalb keine Wärme zugeführt, und es bildet sich im Glas ein sehr großer Temperaturgradient zwischen der heißen Siliciumschicht und dem kalten Glas aus. Deswegen diffundiert die Wärme sehr schnell aus der Siliciumschicht heraus, wodurch diese schnell abkühlt. Zeitaufgelöste Reflexionsmessungen zeigen zum Beispiel, daß eine 125 nm dicke Siliciumschicht bereits nach 250 ns wieder erstarrt ist [27]. Kapitel 5 behandelt die Wärmediffusion detaillierter.

2.5 Kristallisation

Während der Abkühlung des flüssigen Siliciums wird die Schmelztemperatur unterschritten und kristallines Wachstum möglich. Dieses findet jedoch nur an bestehenden Kristall/Schmelze-Grenzflächen statt. Da Glas amorph ist, kann von der Grenzfläche Silicium/Glas kein kristallines Wachstum ausgehen. Wenn das Silicium vollständig geschmolzen ist, müssen sich folglich erst Nukleationskeime für das kristalline Wachstum aus der Schmelze bilden. Im folgenden werden die Nukleation sowie das kristalline Wachstum näher beschrieben.

2.5.1 Nukleation

Eine Schmelze mit einer Temperatur unterhalb ihres Schmelzpunktes kann ihre freie Energie durch Ausscheidung der festen Phase um $\Delta F_V V$ verringern. Dabei ist V das ausgeschiedene Volumen und ΔF_V die freie Energiedichte. Andererseits benötigt der Aufbau der Grenzfläche A zwischen der festen und flüssigen Phase die freie Energie

$$\Delta F_A = \gamma_{LS} A, \quad (2.18)$$

wobei γ_{LS} die freie Oberflächenenergie pro Flächeneinheit ist. Für einen kugelförmigen Nukleationskeim mit dem Radius r erhält man die Differenz der freien Energie [28]

$$\begin{aligned} \Delta F_{Vol} &= -V \Delta F_V + A \gamma_{LS} \\ &= -\frac{4}{3} \pi r^3 \Delta F_V + 4 \pi r^2 \gamma_{LS}. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Für kleine r ist ΔF_{Vol} größer Null, so daß sich der Nukleationskeim auflöst. Differenzieren von Gl. (2.19) liefert den kritischen Radius $r^* = 2\gamma_{LS}/\Delta F_V$, ab dem die Energie reduziert wird und der Nukleationskeim stabil ist. Einsetzen von r^* in Gl. (2.19) liefert die kritische freie Energie

$$\Delta F^* = \frac{16\pi\gamma_{LS}^3}{3\Delta F_V^2}, \quad (2.20)$$

die zur Bildung eines stabilen Nukleationskeims benötigt wird. Damit kann man für die Nukleationsrate

$$\frac{dN}{dt} = A_N k_i e^{\frac{-16\pi\gamma^3}{3\Delta F_V^2 kT}} \quad (2.21)$$

schreiben. Dabei ist N die Zahl der Nukleationskeime, A_N eine Konstante und k_i die temperaturabhängige Zahl der Atome, die pro Zeiteinheit auf den Keim treffen. Die Nukleationsrate steigt folglich exponentiell mit der Unterkühlung der Schmelze an.

2.5.2 Kristallwachstum aus der Schmelze

Sobald ein Keim für kristallines Wachstum in der Schmelze vorhanden ist, beginnt dieser bei Unterschreitung der Schmelztemperatur mit der Kristallisationsgeschwindigkeit

$$v_{krist} = f k_i \lambda \left[1 - e^{-\frac{\Delta F_K}{kT_i}} \right] \quad (2.22)$$

zu wachsen [29, 30]. Hierbei ist k_i die Zahl der Atome, die die Grenzfläche pro Zeiteinheit erreichen, λ der Fortschritt der Grenzfläche in die Schmelze bei einer Anlagerung (\approx Gitterkonstante des Siliciums), ΔF_K die freie Energie der Kristallisation und T_i die Grenzflächentemperatur. Nicht jedes an eine beliebige Stelle der Oberfläche auftreffende Atom wird gebunden. Der Faktor f ist der Anteil der Fläche an der Gesamtfläche, an der ein Atom angelagert werden kann. Der Bruchteil f ist stark von der Struktur der Oberfläche des Kristalls und ihrer freien Oberflächenenergie γ_i abhängig. Anschaulich kann man sich die Abhängigkeit folgendermaßen vorstellen:

Nach Faust und John [31] ist ein Atom ein Teil des Kristalls, sobald es mindestens zwei Bindungen mit dem Kristall besitzt. Auf einer $\{100\}$ -Ebene ist dies für ein einzelnes Atom möglich, während zur Anlagerung an eine $\{110\}$ -Ebene zwei Atome benötigt werden, von denen beide je eine Bindung mit der Kristalloberfläche eingehen und die zweite Bindung untereinander. Zur Anlagerung an einer $\{111\}$ -Ebene sind schließlich drei Atome nötig. Ist jedoch eine atomare Stufe auf der $\{111\}$ -oder $\{110\}$ -Ebene vorhanden, so reduziert sich die Zahl der Atome, die für eine stabile Bindung nötig sind. Deshalb wachsen vorhandene Stufen lateral sehr schnell.

Auf atomar glatten Oberflächen ist f aus Gl. (2.22) dementsprechend durch die Zahl der Stufen gegeben. Zur Bildung einer solchen Stufe auf einer glatten Oberfläche muß sich wie bei der homogenen Volumennukleation ein Keim mit einer kritischen Größe bilden. Die freie Energie zum Aufbau eines runden Nukleationkeims der Höhe h mit einem Radius r ist

$$\Delta F_S = -\Delta F_A \pi r^2 h + 2\pi r h \gamma_{LS}. \quad (2.23)$$

Analog zu Gl. (2.21) schreibt man die Nukleationsrate von Flächenkeimen auf glatten Oberflächen als

$$\frac{dN_s}{dt} = A_s k_i e^{\frac{-\pi h \gamma_{LS}^2}{\Delta F_V k T}}. \quad (2.24)$$

Sie nimmt mit abnehmender Temperatur wieder exponentiell zu.

Wenn die Oberfläche auf atomarer Ebene rauh ist, kann der Kristall wesentlich schneller wachsen, da die Zahl f der Anlagerungsmöglichkeiten nicht auf die Stufen einer durch einen Flächenkeim gebildeten Terrasse beschränkt ist. Für jede Oberfläche existiert eine Temperatur T_R , unterhalb der die Oberfläche glatt ist und bei deren Überschreitung rauh wird, wodurch f gegen eins geht [32]. Terrassiertes Wachstum wird nur für $\{111\}$ -Ebenen beobachtet, während $\{110\}$ - und $\{100\}$ -Ebenen beim Wachstum aus der Schmelze rauhe Grenzflächen besitzen. Monte-Carlo-Simulationen ergeben Wachstumsgeschwindigkeiten $v_{100} > v_{110} \gg v_{111}$ [33].

2.6 Dünnschichttransistoren

Als Dünnschichttransistoren werden in der Literatur Metall-Oxid-Halbleiter Feldeffekttransistoren (Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor = MOSFET) bezeichnet, bei denen die einzelnen Schichten nacheinander abgeschieden werden [34]. Die Theorie des idealen MOSFET ist in gängigen Lehrbüchern, wie z.B. Sze [17], beschrieben.

Für kleine Gatespannungen V_{DS} fließt der Drainstrom

$$I_{DS} \approx \frac{W}{L} \mu_n C_{ox} (V_{GS} - V_T) V_{DS}, \quad (2.25)$$

mit der Gatebreite W , Gatelänge L , Gatespannung V_{GS} , Schwellspannung V_T , Beweglichkeit μ_n und der Kapazität des Gatedielektrikums C_{ox} . Aus dieser Abhängigkeit läßt sich die für die Qualität von laserkristallisierten Schichten wichtige Beweglichkeit μ_n bestimmen. Hierzu trägt man, wie in Abb. 2.4a gezeigt, I_{DS} über V_{GS} auf, und ermittelt die Steigung g_m . Nach Gl. (2.25) gilt für sie

$$g_m = \left. \frac{\partial I_{DS}}{\partial V_{GS}} \right|_{V_{DS}=\text{const}} = \frac{W}{L} \mu_n C_{ox} V_{DS}, \quad (2.26)$$

und somit

$$\mu_n = \frac{L}{W} \frac{g_m}{C_{ox} V_{DS}}. \quad (2.27)$$

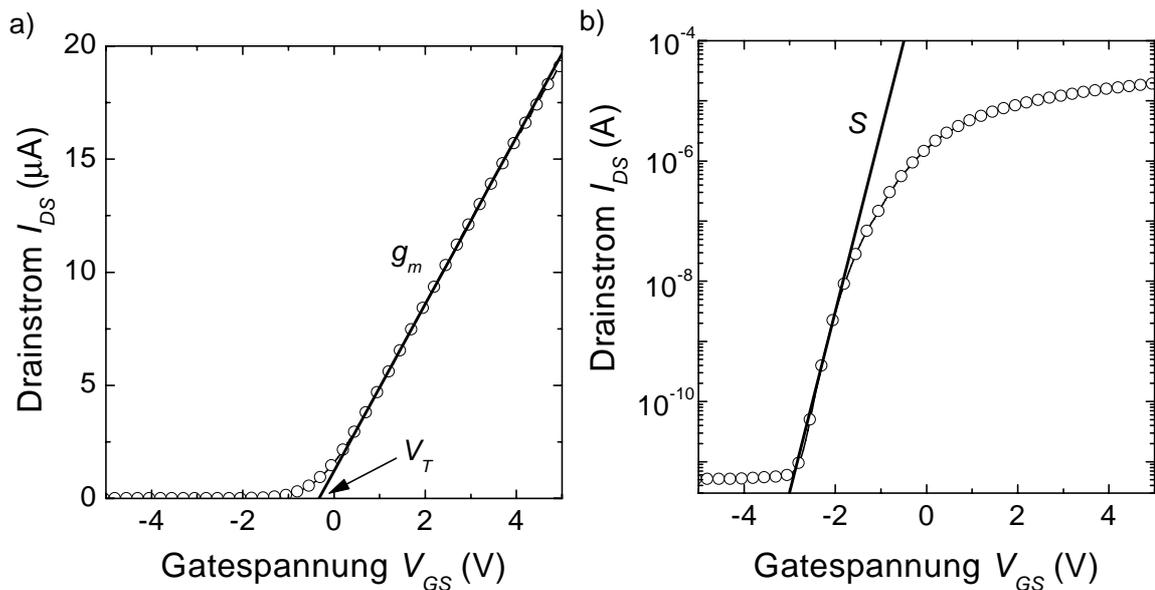


Abbildung 2.4: a) Aus der linearen Auftragung des Drainstroms wird die Schwellenspannung V_T und die Steigung g_m bestimmt, aus der die Beweglichkeit μ_n nach Gl. (2.27) berechnet wird. b) Die logarithmische Auftragung liefert die Subschwellschwellensteigung S .

Aus der Auftragung der Abb. 2.4a bestimmt man außerdem die Schwellenspannung V_T durch lineare Extrapolation zu $I_{DS} = 0$. Für das Schaltverhalten eines Transistors ist die Steigung S unterhalb der Schwellenspannung V_T von Bedeutung. Sie wird, wie Abb. 2.4b zeigt, üblicherweise aus der logarithmischen Auftragung von I_{DS} über V_{GS} bestimmt und in Volt/Dekade (V/dec) angegeben.

2.7 Verschiedene Laserkristallisationsprozesse

In der Literatur wurden bis heute viele verschiedene Kristallisationsprozesse vorgestellt. Erste Versuche wurden mit kontinuierlichen (continuous wave = cw) Lasern unternommen [35, 36]. Durch eine Verschiebung des Substrates gegen den Laserstrahl wurde die Kristallisationsfront mit konstanter Geschwindigkeit über die Probe gezogen. Nachteil dieser Versuche mit cw-Lasern ist die lange Zeit, für die das Silicium und damit auch das darunterliegende Substrat die Schmelztemperatur überschreitet. Dadurch konnten sehr viele Verunreinigungen in die Siliciumschichten gelangen.

Durch die Entwicklung von gepulsten YAG (Yttrium-Aluminium-Granat) und später

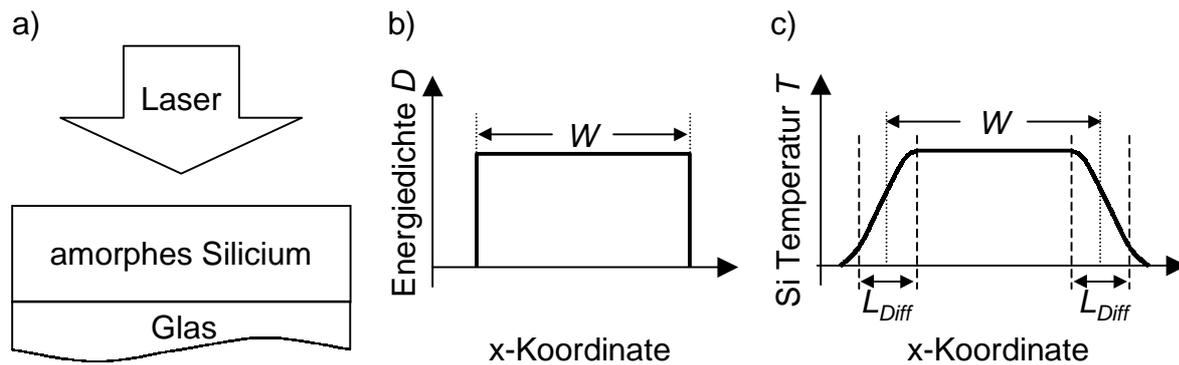


Abbildung 2.5: a) Die amorphe Siliciumschicht auf Glas wird von oben mit einem Laserpuls mit der Energiedichteverteilung der Breite W aus b) beschossen. c) Durch Diffusion der Wärmeenergie in der Ebene der Siliciumschicht erhält man keine abrupten Sprünge der Temperaturverteilung im Silicium, sondern an den Rändern einen Abfall innerhalb der Diffusionslänge L_{Diff} .

Excimer (Excited-Dimer)-Lasern standen gepulste Laser mit ausreichender Pulsenergie für die Laserkristallisation zur Verfügung [37, 38]. Beim Einsatz dieser Laser ist der Temperaturgradient in den Schichten wesentlich größer, wodurch die Abkühlung deutlich beschleunigt wird. Verunreinigungen durch Fremdstoffdiffusion konnten somit verringert werden. Im folgenden werden nur Prozesse vorgestellt, die gepulste Laser verwenden.

2.7.1 Großflächige Laserkristallisation

Die hier als „großflächig“ bezeichneten Methoden umfassen alle Verfahren, die keine spezielle Strukturierung des Siliciums, des Glases oder des Strahlprofils des Lasers beinhalten. Der Laserpuls bestrahlt eine große Fläche mit konstanter Energiedichte, wie die Abbn. 2.5a und b zeigen. Die Abmessungen der Fläche sind dabei groß gegen die Diffusionslänge L_{Diff} der Wärmeenergie während des Laserpulses. Nach Abb. 2.5c ist dadurch die Temperatur der Siliciumschicht über große Bereiche konstant.

Zur Laserkristallisation wird die Energiedichte D des Laserpulses so gewählt, daß zumindest ein Teil der Siliciumschicht aufschmilzt. Sobald der Laserpuls eine dünne Oberflächenschicht aufgeschmolzen hat, breitet sich von dort eine Explosivkristallisationsfront in Richtung Glas aus, wie Abb. 2.6a zeigt [39, 40]. Bei der Explosivkristallisation schmilzt an der in Ausbreitungsrichtung liegenden Grenzfläche einer dünnen, flüssigen Siliciumschicht das amorphe Silicium. Der Schmelzpunkt von kristallinem Silicium ist höher als

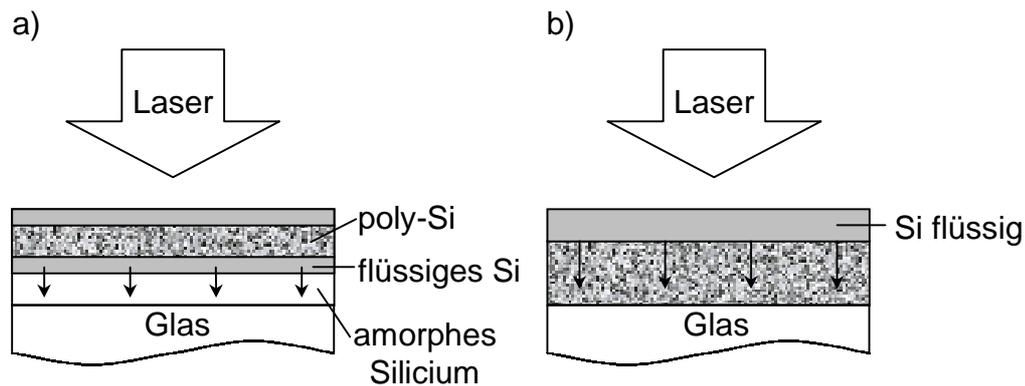


Abbildung 2.6: a) Sobald durch den Laserpuls eine dünne Oberflächenschicht des amorphen Siliciums aufgeschmolzen ist, breitet sich eine Explosivkristallisationsfront in Richtung Glassubstrat aus. b) Das durch die Explosivkristallisation erzeugte polykristalline Silicium schmilzt wegen der weiteren Energiezufuhr durch den Laserpuls wieder auf.

der von amorphem. Das soeben geschmolzene Silicium ist folglich gegenüber dem kristallinen Silicium unterkühlt, wodurch sich an der Rückseite der dünnen flüssigen Schicht polykristallines Silicium bildet. Dadurch wird die Schmelzenthalpie ΔH_c des kristallinen Siliciums freigesetzt, die größer ist als die Schmelzenthalpie ΔH_a des amorphen Siliciums. Die Kristallisationswärme gelangt durch Diffusion auch an die Vorderseite der Kristallisationsfront und schmilzt weiteres amorphes Silicium auf. Die Explosivkristallisationsfront breitet sich mit einer Geschwindigkeit in der Größenordnung von 10 m/s aus. Während der weiteren Dauer des Laserpulses schmilzt das explosivkristallisierte Silicium von oben her auf, wie Abb. 2.6b zeigt.

Die Struktur des Siliciums nach dem Abklingen des Laserpulses und der folgenden Erstarrung wird im wesentlichen von der Schichtdicke und der Energiedichte des Laserpulses beeinflusst. Sehr dünne Schichten mit Dicken $d < 40$ nm erstarren z.B. je nach verwendeter Laserenergie und der damit verbundenen Abkühlrate amorph oder polykristallin [41]. Für Schichten mit Dicken $d > 50$ nm wird eine Amorphisierung nicht beobachtet. Durch den Laserbeschuss entsteht polykristallines Silicium, dessen Struktur stark von der Laserenergie abhängt. Das heute gängige Modell unterscheidet drei Energiebereiche, deren Kristallisationsmechanismus in Abb. 2.7 dargestellt ist [42]:

- $D < D_{voll}$: Die Energiedichte des Lasers ist zu niedrig, um das Silicium von der Oberfläche bis zur Grenzfläche Silicium/Glas aufzuschmelzen. Ausgehend von der

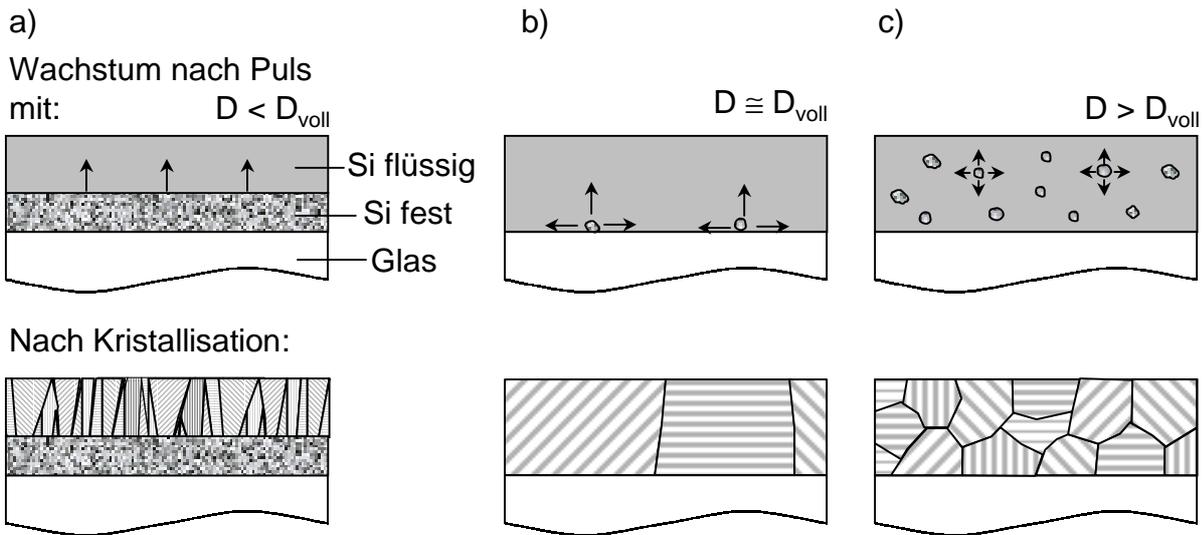


Abbildung 2.7: Wachstumsmechanismus des poly-Si bei verschiedenen Energiedichten D : a) $D < D_{voll}$: Kolumnares Wachstum von der Grenzfläche flüssig/fest hin zur Oberfläche. b) $D \approx D_{voll}$: Ausgehend von sehr wenigen verbliebenen Keimen wachsen die Kristallite lateral und kolumnar. c) $D > D_{voll}$: Die vollständig aufgeschmolzene Schicht unterkühlt so stark, bis homogene Nukleation die Keime für das Wachstum der polykristallinen Siliciumschicht liefert.

explosivkristallisierten Schicht wachsen die Kristallite während der Abkühlung kolumnar in Richtung Siliciumoberfläche. So entstehen Körner, deren Durchmesser b mit der Energiedichte D von $b \approx 20$ nm bis hin zu $b \approx d$ zunimmt.

- $D \approx D_{voll}$: Das Silicium wird bis auf wenige polykristalline Bereiche an der Grenzfläche Silicium/Glas vollständig aufgeschmolzen. Während der Abkühlung setzt von diesen Kristalliten sowohl kolumnares als auch laterales Wachstum ein. Da vom amorphen Glas kein kristallines Wachstum ausgeht, wachsen die Körner so lange in die Breite, bis sie mit einem Nachbarkorn zusammenstoßen. Deswegen nennt man diesen Energiebereich auch den Bereich des superlateralen Wachstums (Super Lateral Growth = SLG). Die Korngrößen liegen deutlich über der Schichtdicke des Films.
- $D > D_{voll}$: Die Siliciumschicht ist vollständig aufgeschmolzen. Deshalb gibt es keinerlei Keime für das Siliciumwachstum. Während der Abkühlung wird die flüssige Phase sehr stark unterkühlt, und es kommt nach der Zeit t_n zu homogener Nukleation im gesamten Volumen. Ausgehend von diesen Nukleationskeimen wachsen nun

die Kristallite. Die Korngröße b liegt deutlich unterhalb der Schichtdicke und ist unabhängig von der Pulsenergie [43].

Bei der großflächigen Laserkristallisation gibt es direkt nach dem Aufschmelzen keinen Temperaturgradienten in der Schichtebene. Dies hat zur Folge, daß die Nukleations- und Wachstumsrate über die gesamte Fläche konstant ist. Während der Kristallisation entstehen im gesamten kristallisierten Gebiet gleiche Korngrößenverteilungen.

Durch einmaligen, großflächigen Laserbeschuß von Substraten bei Raumtemperatur wurden polykristalline Schichten mit Korngrößen unter einem Mikrometer hergestellt [42]. Die maximale Korngröße ist dabei durch die schnelle Abkühlung und den Einsatz der homogenen Nukleation nach der Zeit t_n begrenzt. Körner, die im Bereich des superlateralen Wachstums nach allen Seiten mit der Kristallisationsgeschwindigkeit v_{krist} lateral wachsen, können maximal die Kornbreite

$$b = 2 v_{krist} t_n \quad (2.28)$$

erreichen. Sofern sie nicht schon vorher mit benachbarten Körnern zusammenstoßen, stoppt die homogene Nukleation bei dieser Breite das laterale Wachstum.

Die Nukleationsrate steigt nach Gl. (2.21) exponentiell mit einer Abnahme der Temperatur an. Durch eine Verlangsamung der Abkühlung wird folglich die Zeit t_n größer und nach Gl. (2.28) nimmt die Kornbreite b zu. Dies wurde z.B. durch Erhöhung der Substrattemperatur [42] oder durch Verwendung eines zweiten, zeitversetzten Laserpulses [44] erreicht.

Zusätzlich wurde im SLG-Bereich durch wiederholtes Aufschmelzen der gleichen Fläche mit 128 Laserpulsen die Korngröße auf bis zu $b \approx 3 \mu\text{m}$ erhöht [45].

2.7.2 Manipulation der Absorption und Wärmediffusion

Eine Möglichkeit, die Korngrößenbegrenzung durch die homogene Nukleation aufzuheben, ist die kontrollierte Manipulation der örtlichen Absorption des Laserlichtes bzw. der Wärmediffusion, um einen Temperaturgradienten in der Schichtebene zu erzeugen. Die daraus resultierenden örtlichen Temperaturvariationen liefern lokal unterschiedliche Nukleationsraten.

Um die Temperaturverteilung gezielt zu manipulieren, wurden in der Literatur strukturierte Deckschichten auf die Siliciumschicht aufgebracht, die das Laserlicht verstärkt absorbieren bzw. reflektieren. Kim und Im [46, 47] verwendeten hierzu eine SiO_2 -, Nakata, Oh und Matsumura [48] eine Aluminiumschicht. Eine andere Möglichkeit die Temperaturverteilung zu beeinflussen, ist die räumliche Modulation des Laserstrahls. Rezek, Nebel und Stutzmann [49] erzeugten periodische, linienförmige Modulationen durch Interferenz des Laserlichtes. Matsumura [50] variierte den Laserpuls durch Verwendung von Masken im Strahlengang. Um die Wärmediffusion örtlich zu manipulieren, wurde von van der Wilt und Ishihara [51] die Dicke der SiO_2 -Schicht, auf der das Silicium abgeschieden wurde, variiert. Yeh und Matsumura [52] verlangsamten die Abkühlung durch Verwendung einer porösen SiO_2 -Schicht.

Ziel dieser Experimente ist, die Bildung von Nukleationskeimen auf ein kleines, definiertes Gebiet zu beschränken. Dieses Gebiet ist entweder kälter als die Umgebung, weil die absorbierte Energiedichte geringer ist, oder die absorbierte Energie diffundiert aufgrund einer besseren Wärmeleitung schneller in das Substrat, wie Abb. 2.8a zeigt. Sobald in den kälteren Gebieten Körner nukleieren, beginnen diese lateral in Richtung der Gebiete höherer Temperatur zu wachsen, wie Abb. 2.8b zeigt. Auf diese Weise läßt sich nicht nur die Korngröße erhöhen, sondern auch ihre Position vorgeben.

2.7.3 Sequentielle Prozesse

Ein weiteres Kristallisationsverfahren ist der SLS- (Sequential Lateral Solidification) Prozeß [53]. Im Gegensatz zu den Verfahren des vorherigen Abschnittes ist er nicht darauf ausgelegt mit einem oder wenigen Pulsen pro Ort große Kristallite zu erhalten, sondern benutzt viele örtlich versetzte Laserpulse um Kristallite unterbrechungslos zu verlängern. Abbildung 2.9 zeigt die einzelnen Schritte:

- Die Energiedichte D des Laserpulses ist so gewählt, daß er in einem Gebiet der Höhe h_{voll} das Silicium komplett aufschmilzt. An den Rändern dieses Bereichs fällt D ab und es wird nicht die gesamte Schichtdicke d aufgeschmolzen. Nach Abschn. 2.7.1 entsteht deshalb an den Randbereichen feinkristallines Silicium.

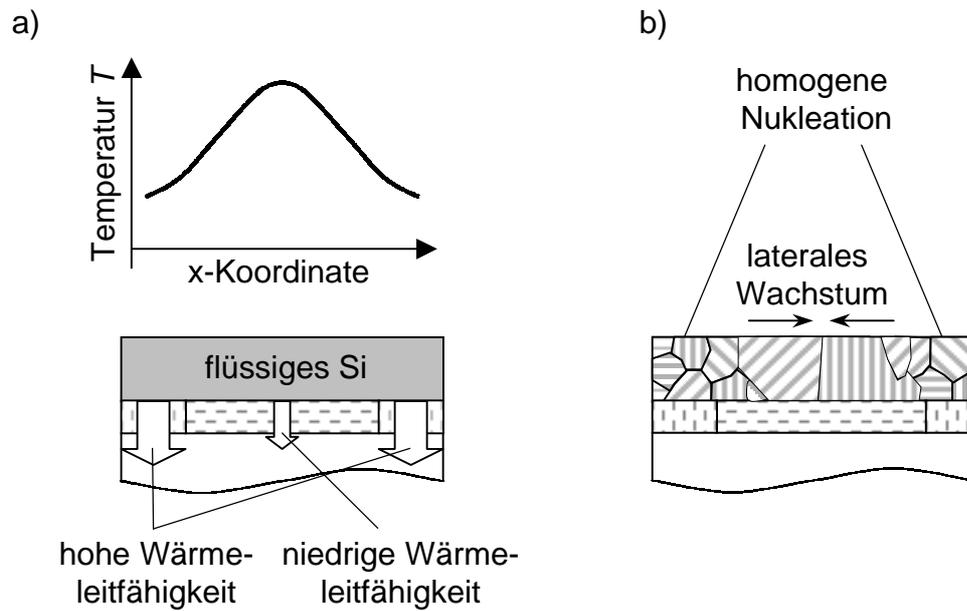


Abbildung 2.8: a) Durch Verwendung von Zwischenschichten unterschiedlicher Wärmeleitfähigkeit lässt sich das Temperaturprofil des flüssigen Siliciums nach dem Laserpuls gezielt manipulieren. Auf einer Schicht hoher Leitfähigkeit kühlt das Silicium schneller ab und die Nukleation setzt früher ein als in Gebieten niedriger Wärmeleitfähigkeit. b) Laterales Wachstum führt zu großen Körnern, deren Lage durch die Zwischenschichten vorbestimmt ist.

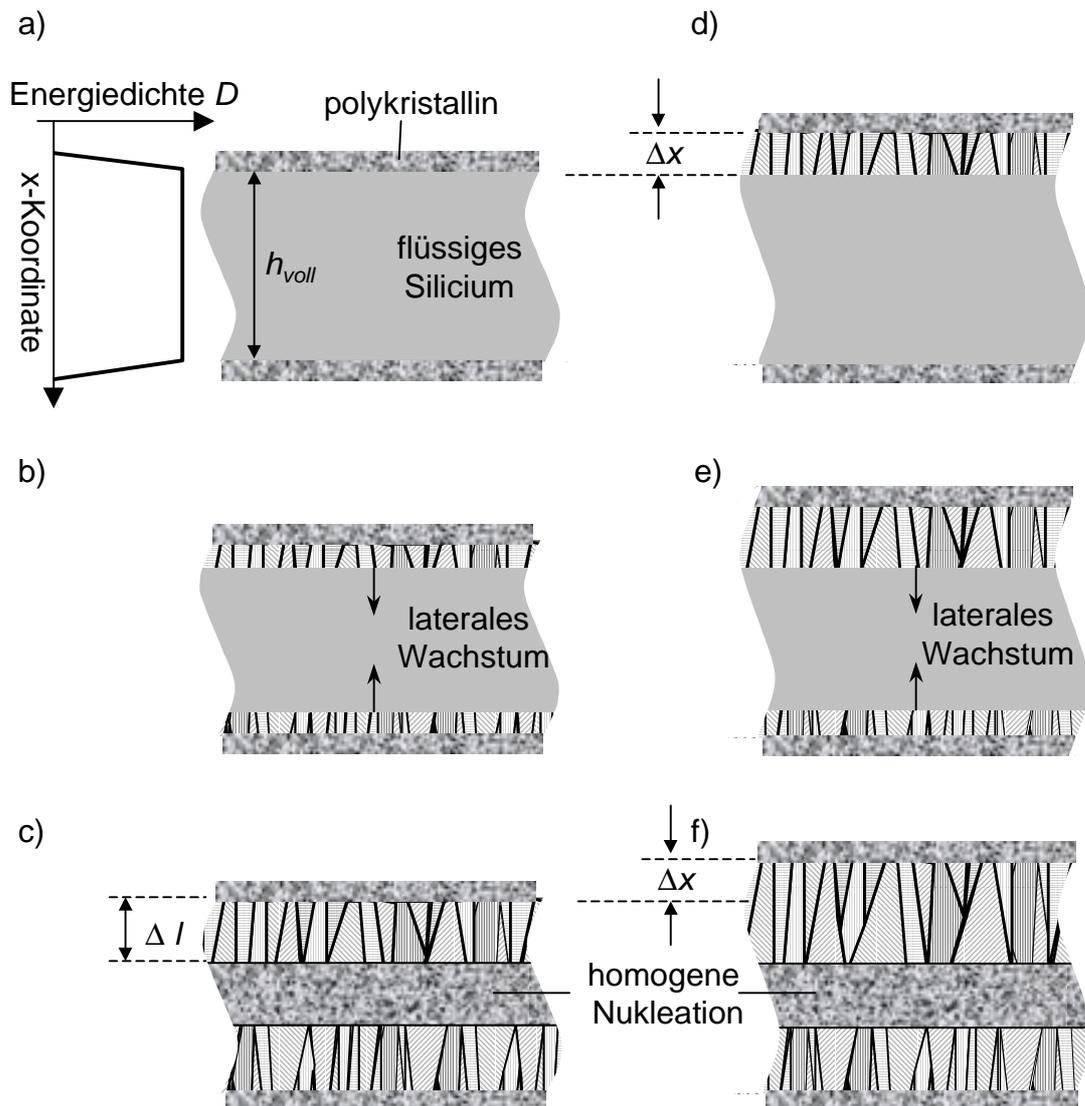


Abbildung 2.9: Prinzip des SLS-Prozesses in der Aufsicht auf die Probe: a) Die Energiedichte D des Lasers ist so gewählt, daß vom Laserpuls ein Gebiet der Höhe h_{voll} komplett aufgeschmolzen wird. An den Rändern dieses Gebiete fällt D schnell ab, und es wird nicht die gesamte Siliciumdicke d aufgeschmolzen. Dort entsteht feinkristallines Silicium. b) Während der Abkühlung setzt laterales Wachstum vom feinkristallinen Rand in die Mitte ein. c) Homogene Nukleation stoppt das laterale Wachstum nach einer Länge Δl . d) Bevor der zweite Laserpuls das Silicium erneut schmilzt, wird das Substrat in x-Richtung um Δx verschoben. Dadurch bleiben am oberen Rand die Körner, die nach dem ersten Puls gewachsen sind, teilweise stehen. e) Das laterale Wachstum während der Abkühlung verlängert diese Körner wieder. f) Nach der vollständigen Kristallisation sind die Körner aus c) um die Länge Δx verlängert.

- Wie Abb. 2.9b zeigt, findet während der Abkühlung zunächst nur laterales Wachstum vom Rand des aufgeschmolzenen Bereichs in dessen Mitte hinein statt, wo sich keine Nukleationskeime befinden. Das laterale Wachstum wird nach einer Wachstumslänge Δl durch homogene Nukleation in der stark unterkühlten Schmelze gestoppt. Als Resultat eines Laserpulses erhält man nach Abb. 2.9c lateral gewachsene Körner an den Rändern des vormals komplett geschmolzenen Bereichs und feinkristallines Silicium in der Mitte.
- Bevor ein zweiter Laserpuls das Silicium erneut komplett aufschmilzt, wird die Probe um die Strecke $\Delta x < \Delta l$ verschoben. Dadurch bleiben nach Abb. 2.9d Teile der lateral gewachsenen Körner des vorherigen Pulses am Rand des flüssigen Siliciums stehen und dienen als Nukleationskeime für das laterale Wachstum der Abb. 2.9e. Sie werden also während der Abkühlung um Δl verlängert.

Durch Wiederholung der Schritte Aufschmelzen, Kristallisation, Verschieben erhält man sehr lange Kristallite. Sposili und Im [53] verwendeten zur Strahlformung eines Excimerlasers eine schlitzförmige Maske, um ein rechteckiges Gebiet des Siliciums mit der Höhe $h_{voll} = 5 \mu\text{m}$ und der Breite $w_{voll} = 200 \mu\text{m}$ zu schmelzen.

In einer Modifikation des SLS-Prozesses benutzten Im, Sposili und Crowder [54] zur Strahlformung die Maske der Abb. 2.10a. Nach dem Laserpuls wächst das Silicium, wie Abb. 2.10b zeigt, lateral in die Mitte der aufgeschmolzenen Streifen. Nach dem Scan der Abb. 2.10c erhält man ein einkristallines Gebiet, weil die Korngrenzen unter 45° zur Scanrichtung nach aussen wachsen.

2.7.4 TFTs aus laserkristallisiertem Silicium

Die elektronischen Eigenschaften von TFTs aus laserkristallisiertem Silicium unterscheiden sich je nach verwendetem Prozeß stark.

Derzeit übliche Prozesse zur Herstellung von Displayprototypen verwenden die großflächige Laserkristallisation an Luft. Es wurden z.B. von Brotherton [4] Displays mit Feldeffektbeweglichkeiten von $\mu_n = 200$ und $\mu_p = 90 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ sowie von Boyce et al. [3] mit $\mu_n = 190$ und $\mu_p = 58 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ vorgestellt. Laserkristallisation im Vakuum verbessert die elektronischen Eigenschaften [56] und liefert Feldeffektbeweglichkeiten $\mu_n = 280 \dots 460$

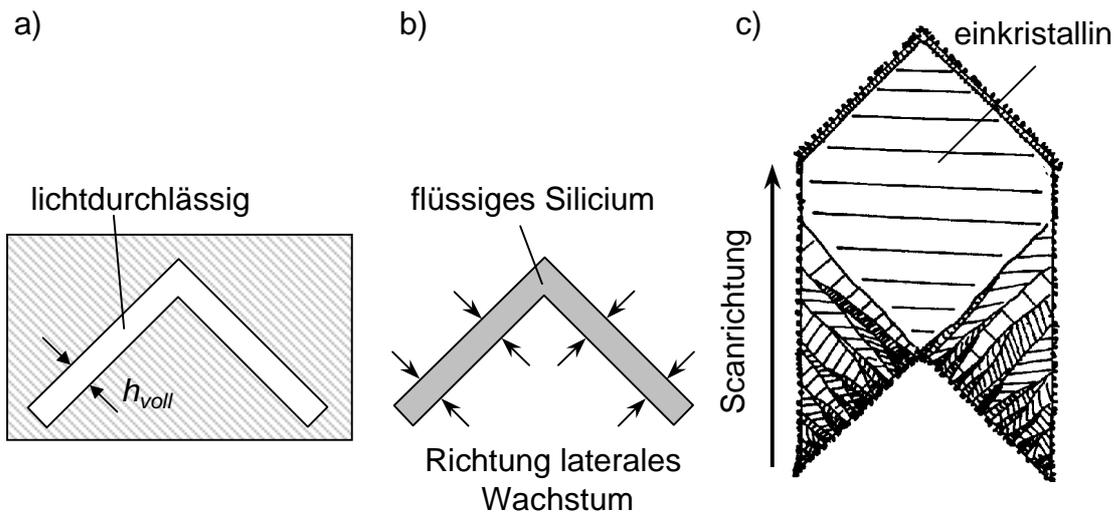


Abbildung 2.10: a) Maske zur Strahlformung des Laserstrahls. b) Bei dem SLS-Prozeß mit der Maske aus a) wachsen die Körner senkrecht zu den Schenkeln und damit auf beiden Seiten weg von der Scanrichtung. Es entsteht ein einkristalliner Bereich. Nach Ref. [55]

cm^2/Vs [57]. Transistoren mit der höchsten bisher veröffentlichten Feldeffektbeweglichkeit $\mu_n = 640 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ wurden mittels großflächiger Laserkristallisation hergestellt [58]. Allerdings fand der gesamte Herstellungsprozess, d.h. Deposition des Siliciums, Laserkristallisation und TFT-Prozessierung, im Ultrahochvakuum bei Drücken unterhalb $1 \times 10^{-5} \text{ Pa}$ statt. Zur Abscheidung des Gateoxids diente ein Remoteplasma, das die Zahl der Defekte an der Grenzfläche SiO_2/Glas niedrig hält [59].

Transistoren ohne Korngrenzen im Kanal besitzen höhere Beweglichkeiten als TFTs aus polykristallinem Silicium. Ishihara und Matsumura [11] fertigten mit der sogenannten „dual-beam dual-pulse“-Methode, d.h. durch Verlangsamung der Kristallisation durch mehrere Laserpulse, TFTs mit Beweglichkeiten bis zu $\mu_n = 460 \text{ cm}^2/\text{Vs}$. Crowder et al. [10] fertigten mit dem SLS-Prozeß aus Abschnitt 2.7.3 TFTs auf einkristallinen Bereichen mit einer typischen Beweglichkeit $\mu_n = 461 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ und einer maximalen Beweglichkeit $\mu_n = 560 \text{ cm}^2/\text{Vs}$.

Kapitel 3

Experimentelle Methoden

Dieses Kapitel beschreibt die experimentellen Voraussetzungen der eigenen Kristallisationsexperimente, sowie die Schichtabscheidung und die Herstellung der Dünnschichttransistoren.

3.1 Experimenteller Aufbau zur Laserkristallisation

Der in der vorliegenden Arbeit verwendete Aufbau zur Laserkristallisation besteht aus drei Teilen: Erzeugung und Formung des Laserstrahls, Probenbefestigung und Positionierung, sowie Fokussierung des Laserstrahls. Im folgenden wird auf die Realisierung der einzelnen Punkte eingegangen.

3.1.1 Erzeugung und Formung des Laserstrahls

Im Rahmen dieser Arbeit wird das Lasersystem COMPASS 501QM-VD-ES der Firma Coherent verwendet. Es handelt sich um einen laserdiodengepumpten Festkörperlaser mit einem Nd:YVO₄-Kristall als optisch aktives Lasermedium. Das Licht der Pumplaserdioden wird über Glasfaser in den eigentlichen Laserkopf eingekoppelt. Der Laser besitzt eine interne Frequenzverdopplung und emittiert Laserstrahlung der Wellenlänge $\lambda = 532$ nm bei einer Pulsdauer $\tau = 10 \dots 50$ ns. Die Repetitionsfrequenz f des Lasers läßt sich in 100 Hz Schritten zwischen $f = 200$ Hz und $f = 100$ kHz einstellen. Der Strom I_P , mit dem die Pumplaserdioden betrieben werden, bestimmt die Leistung des emittierten Laserlichtes. Über eine interne Photodiode regelt das Lasersystem die Leistung. Abbildung 3.1a zeigt

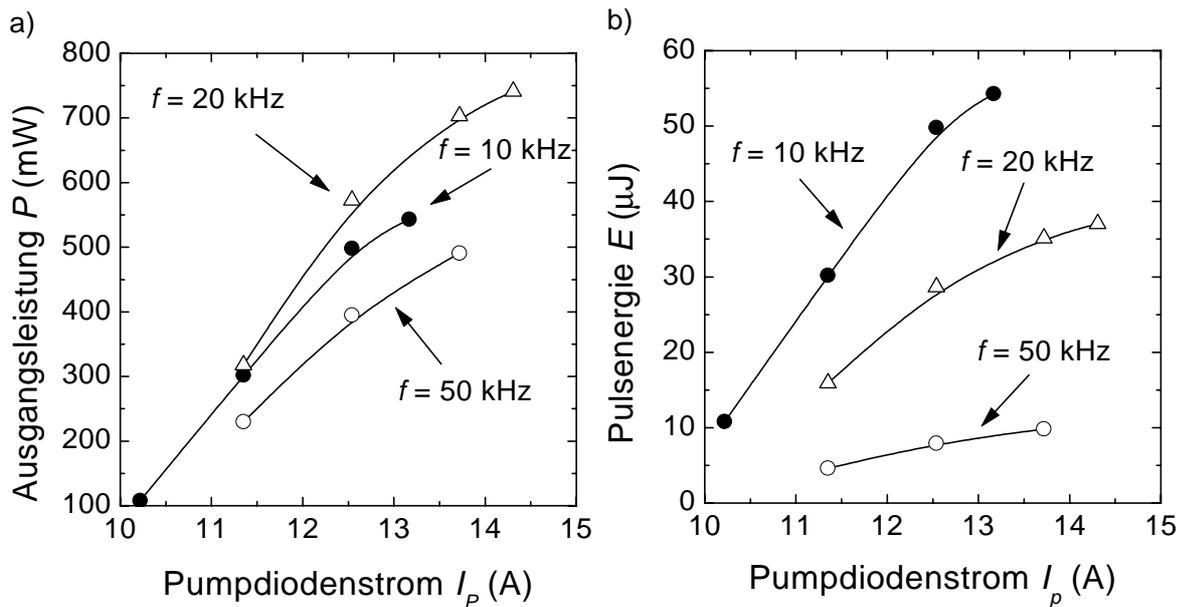


Abbildung 3.1: a) Mittlere Ausgangsleistung P des Lasers für verschiedene Repetitionsfrequenzen f als Funktion des Stroms I_P durch die Pumpdioden. b) Pulsenergie $E = P/f$.

die mittlere Ausgangsleistung P des emittierten Lichts mit einer Wellenlänge von $\lambda = 532$ nm in Abhängigkeit vom Strom I_P für verschiedene Repetitionsfrequenzen f . Die aus der Leistung berechnete Energie eines einzelnen Laserpulses $E = P/f$ ist in Abbildung 3.1b in Abhängigkeit vom Strom I_P für verschiedene Repetitionsfrequenzen f dargestellt. Die Pulsenergie nimmt bei gleichen Strömen mit Zunahme von f ab.

Zur Strahlformung des TEM_{00} -Laserstrahls zu einem streifenförmigen Querschnitt werden, wie Abb. 3.2 zeigt, zwei optische Elemente verwendet. Eine Zylinderlinse mit einer Brennweite $f_{\text{Zyl}} = 200$ mm fokussiert den Laserstrahl in einer Richtung. Die Brennebene eines Kameraobjektives der Firma Olympus mit einer Brennweite $f_{\text{Sph}} = 50$ mm befindet sich im Abstand $d = 220$ mm von der Brennebene der Zylinderlinse. Das Kameraobjektiv verkleinert durch die gewählte Anordnung den von der Zylinderlinse erzeugten ellipsenförmigen Fokus auf etwa ein Fünftel.

3.1.2 Substratpositionierung

Während der Laserkristallisation muß das Substrat sowohl in Scanrichtung x als auch in y -Richtung verschoben werden. Abbildung 3.3 zeigt den hierzu entwickelten Aufbau. Die Glasprobe mit der zu kristallisierenden Schicht wird am Probenhalter vertikal befe-

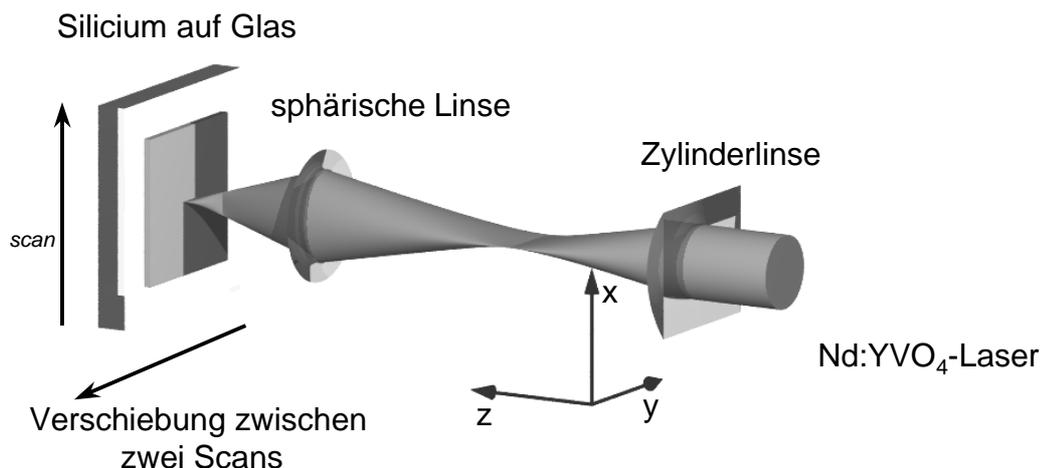


Abbildung 3.2: Der TEM_{00} -Strahl des Nd:YVO₄-Lasers wird von einer Zylinderlinse in einer Richtung fokussiert. Eine Abbildung mit einem Kameraobjektiv, das hier vereinfacht als sphärische Linse dargestellt ist, verkleinert das Zwischenbild auf die Probenoberfläche.

stigt. Die vertikale Anordnung wurde einer horizontalen vorgezogen, um einen größeren Spielraum für andere Versuche, wie z.B. Transmissionsmessungen, zu haben.

Der Probenhalter ist an einem Linearverschiebetisch M-155 der Firma Physik Instrumente (PI) befestigt, der die Verschiebung in Scanrichtung x durchführt. Ein Kreuzverschiebetisch XYM 100-50 der Firma Spindler und Hoyer ermöglicht Verschiebungen in y - und z -Richtung. Schrittmotoren der Firma Phytron-Elektronik treiben die Lineartische für die x - und y -Bewegung an. In z -Richtung ist keine automatisierte Bewegung nötig. Durch die Drehversteller M-035 bzw. M-036 der Firma PI kann der Probenhalter um die y - bzw. x -Achse verkippt werden. Sie werden benötigt, um das Substrat so auszurichten, daß der Strahl des Nd:YVO₄-Lasers exakt senkrecht auf die Substratoberfläche trifft. Der gesamte Aufbau wird von einem PC gesteuert. Die Schrittmotorendstufen, die die Phasenströme zum Antrieb der Motoren erzeugen, benötigen ein Drehrichtungssignal sowie ein Taktsignal. Jeder Puls des Taktsignals führt zu einer Drehung des Motors um einen Schritt in Drehrichtung. Die selbstentwickelte Steuerungssoftware des PCs berechnet die für die Bewegung der Schrittmotoren nötige Zahl der Pulse sowie die Frequenz. Über die digitale Input/Outputkarte ME-14B der Firma Meilhaus werden Drehrichtungs- sowie Taktsignal erzeugt und ausgegeben.

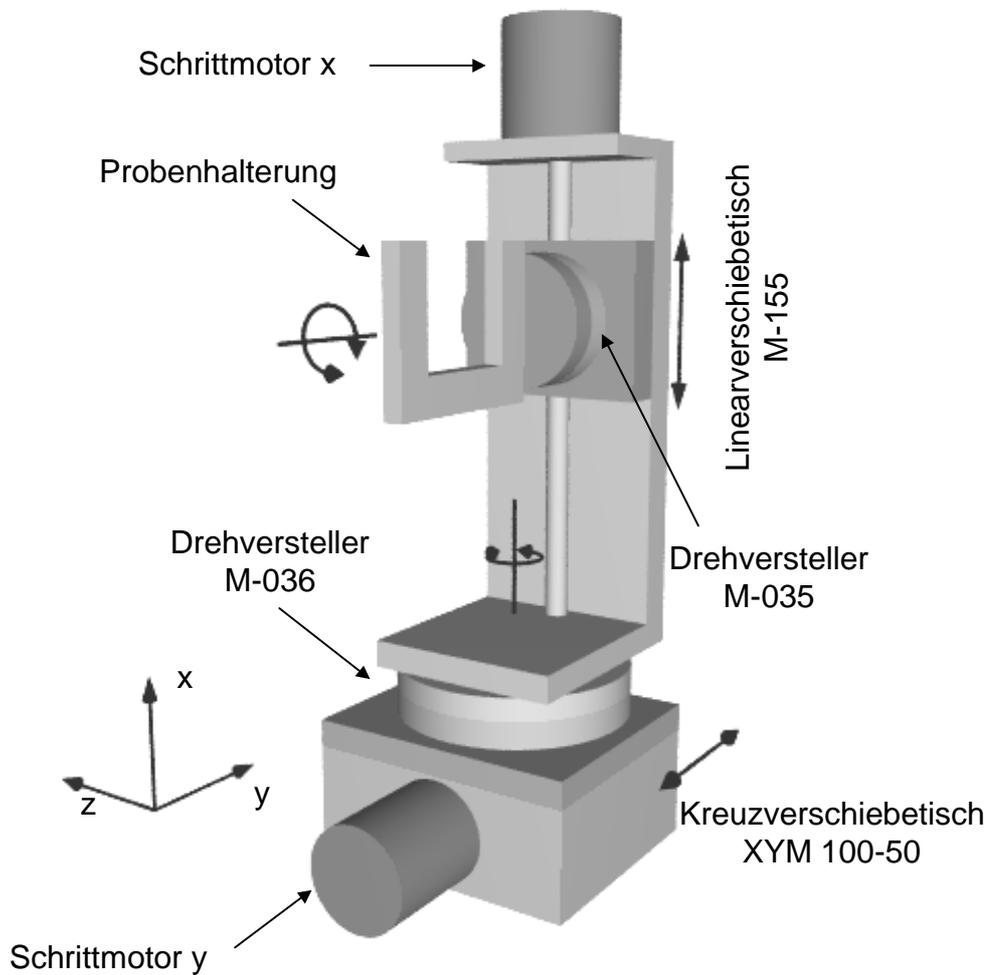


Abbildung 3.3: Aufbau zur Probenbefestigung und Positionierung. Die Glasprobe mit der Siliciumschicht wird vertikal am Probenhalter befestigt. Der Probenhalter ist über den Drehversteller M-035 an dem Lineartisch M-155 für die Bewegung in x-Richtung befestigt. Der x-Tisch ist über ein Winkelstück an dem Drehversteller M-036 befestigt, der wiederum auf dem Kreuztisch XYM 100-50 befestigt ist. Die Linearversteller werden von Schrittmotoren angetrieben. Durch die Drehversteller wird die Probenoberfläche senkrecht zum Laserstrahl ausgerichtet.

3.1.3 Fokussierung

Durch den Aufbau der x-y-Positionierung lassen sich sowohl die Scanrichtung x als auch die Richtung y nicht exakt senkrecht zum Laserstrahl ausrichten. Wenn die beiden Richtungen nicht exakt senkrecht zum Strahl orientiert sind, wandert die Probenoberfläche in z-Richtung aus dem Fokus der Abbildung heraus. Folglich nimmt die Energiedichte an der Oberfläche ab. Um eine Justierung zu ermöglichen, benötigt man zwei weitere Drehversteller. Ein Einbau dieser Drehversteller hat gezeigt, daß der Aufbau dadurch instabiler wird und zu Schwingungen neigt. Diese führen ebenfalls zu Intensitätsschwankungen an der Probenoberfläche. Um die Schwingungen zu vermeiden, wurde auf die zusätzlichen Drehversteller verzichtet. Stattdessen wurde ein Autofokussystem entwickelt, das die Abbildungsoptik aktiv regelt und die Probe immer im Fokus hält.

3.1.3.1 Funktionsweise des Autofokussystems

Abbildung 3.4 zeigt das Prinzip. Der Strahl eines Helium-Neon Lasers fällt schräg auf die Probenoberfläche, wird dort reflektiert und über einen Strahlteiler auf den Detektor gelenkt. Aus Platzgründen wird der Strahl durch die Abbildungsoptik hindurch auf das Substrat gelenkt und ein Strahlteiler mit einer Reflektivität $R = 10\%$ verwendet, was für das Funktionsprinzip aber nicht weiter von Bedeutung ist. Als Detektor dient eine Vierquadrantendiode, die die Gleichspannungssignale V_1 und V_2 liefert, deren Differenz $V_{AF} = V_1 - V_2$ dem Abstand zwischen Abbildungslinse und Probenoberfläche proportional ist (siehe Abschn. 3.1.3.2). Dieses Signal wird von der ADwin 9L PC-Einsteckkarte der Firma Jäger Meßtechnik ausgewertet. Die Karte besitzt zwei analoge Eingänge sowie mehrere digitale Ein- und Ausgänge. Auf der Karte befindet sich ein digitaler Signalprozessor vom Typ ADSP 21062, der unabhängig vom PC arbeitet. Ein im Speicher der ADwin-Karte abgelegtes Programm berechnet aus den Signalen des Detektors Richtung und Geschwindigkeit, mit der die sphärische Linse verschoben werden muß, um die Probe im Fokus zu halten. Über die digitalen Ausgänge der ADwin Karte wird die Schrittmotorendstufe SP-MINI 52-70 der Firma Phytron Elektronik angesteuert, welche die Phasenströme für den Schrittmotor des Linearverschiebetisches M-125 von PI erzeugt. Der Verschiebetisch hält so den Abstand zwischen dem auf ihm befestigten Kameraobjektiv und der Probenoberfläche konstant.

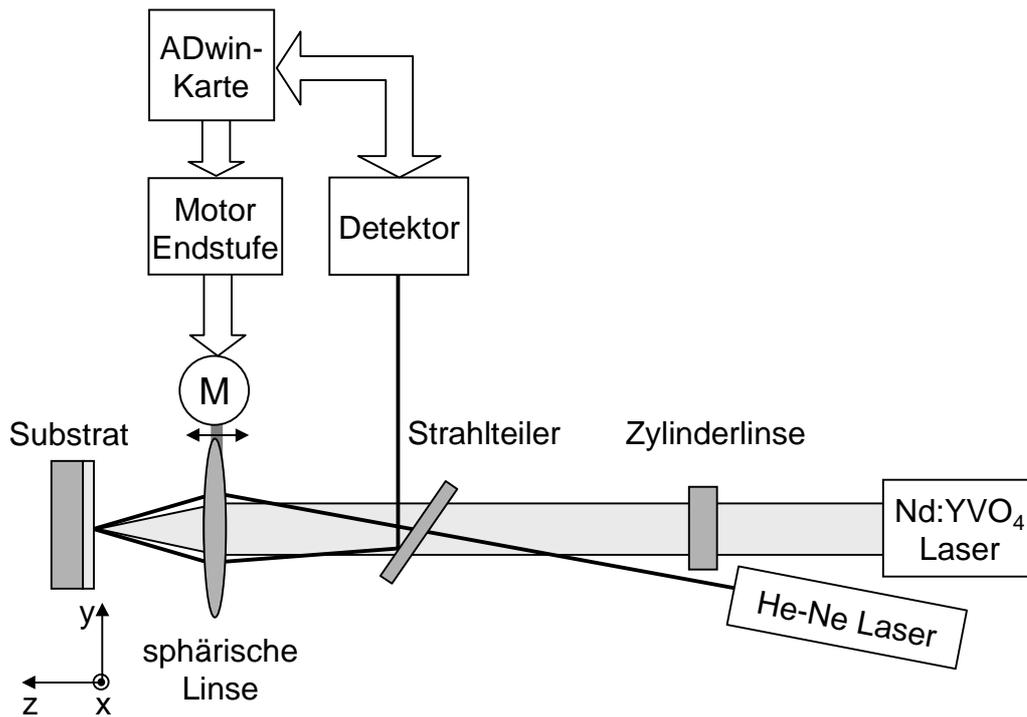


Abbildung 3.4: Das Autofokussystem in Aufsicht. Der von der Probenoberfläche reflektierte Strahl des He-Ne-Laser wird über den Strahlteiler auf den Detektor gelenkt. Von der ADwin-Karte wird die Entfernung der sphärischen Linse vom Substrat ermittelt. Im Falle einer Abweichung von der Sollposition wird der Linearverschiebetisch, auf dem die Linse befestigt ist, über eine Schrittmotorendstufe verfahren.

3.1.3.2 Empfindlichkeit

Abbildung 3.5 zeigt, wie sich eine Änderung des Abstandes Δz zwischen Probe und Objektiv auf den Strahlengang des Helium-Neon Lasers auswirkt. Zur Vereinfachung ist der Strahlteiler weggelassen. Der von der Oberfläche der Probe unter dem Winkel ϕ zur Oberflächennormalen reflektierte Strahl S trifft nach Ablenkung durch die Linse auf den Detektor, der sich im Abstand d_D hinter der Brennebene der Linse befindet. Nach einer Verschiebung des Substrates um Δz trifft der reflektierte Strahl S' um

$$\Delta y = 2 \Delta z \tan \phi \quad (3.1)$$

verschoben auf das Kameraobjektiv. Die parallel auf die Linse einfallenden, um Δy verschobenen Strahlen S und S' , gehen in der Brennebene f_{sph} durch denselben Punkt und

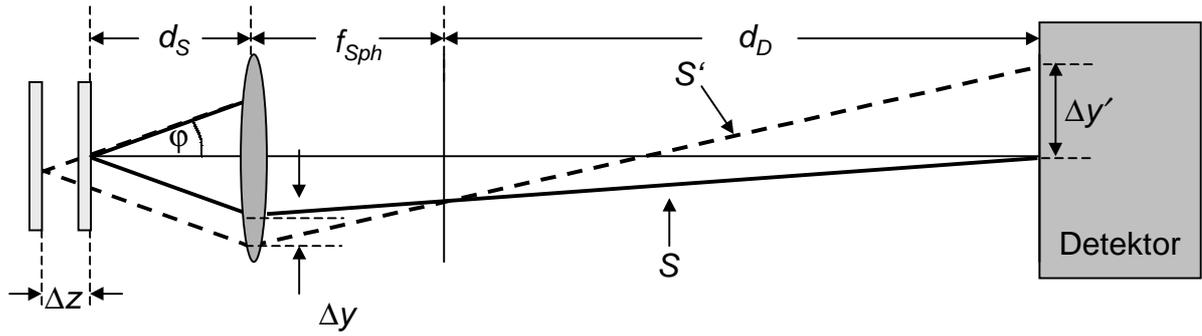


Abbildung 3.5: Bei einer Verschiebung des Substrates um die Strecke Δz wird der am Detektor ankommende Strahl um $\Delta y'$ verschoben. Ein Vierquadrantendetektor detektiert diese Verschiebung.

treffen um den Abstand $\Delta y'$ versetzt auf den Detektor. Abbildung 3.5 entnimmt man

$$\frac{\Delta y'}{\Delta y} = \frac{d_D}{f_{Sph}}. \quad (3.2)$$

Aus den Glg. (3.1) und (3.2) folgt

$$\Delta y' = 2 \Delta z \frac{d_D}{f_{Sph}} \tan \phi. \quad (3.3)$$

Jeweils zwei der nebeneinander liegenden Dioden der Vierquadrantendiode sind parallel geschaltet. Die Beleuchtung der durch die Parallelschaltung entstandenen halbkreisförmigen Detektorflächen D_1 und D_2 liefert die Ströme I_1 und I_2 , aus denen ein Operationsverstärker die zur Auslenkung Δz proportionale Spannungen V_1 und V_2 erzeugt. Diese werden von der ADwin-Karte als Regelgröße ausgewertet. Abbildung 3.6a zeigt die Differenz $\Delta V_{AF} = V_1 - V_2$ der beiden Spannungen als Funktion der Substratverschiebung Δz . Auf eine sprunghafte Verschiebung des Substrates um $\Delta z = 100 \mu\text{m}$ reagiert das Autofokussystem in Abb. 3.6b mit der Zeitkonstanten $\tau_{AF} = 25 \text{ ms}$.

3.2 Probenherstellung

3.2.1 Abscheidung der Siliciumschichten

Die Deposition von amorphem Silicium für die Laserkristallisation ist mit einer Vielzahl von Abscheidemethoden möglich. Eine wichtige Anforderung an das a-Si ist, daß es nur einen geringen Anteil an Wasserstoff enthält. Liegt dieser in zu hohen Konzentrationen vor,

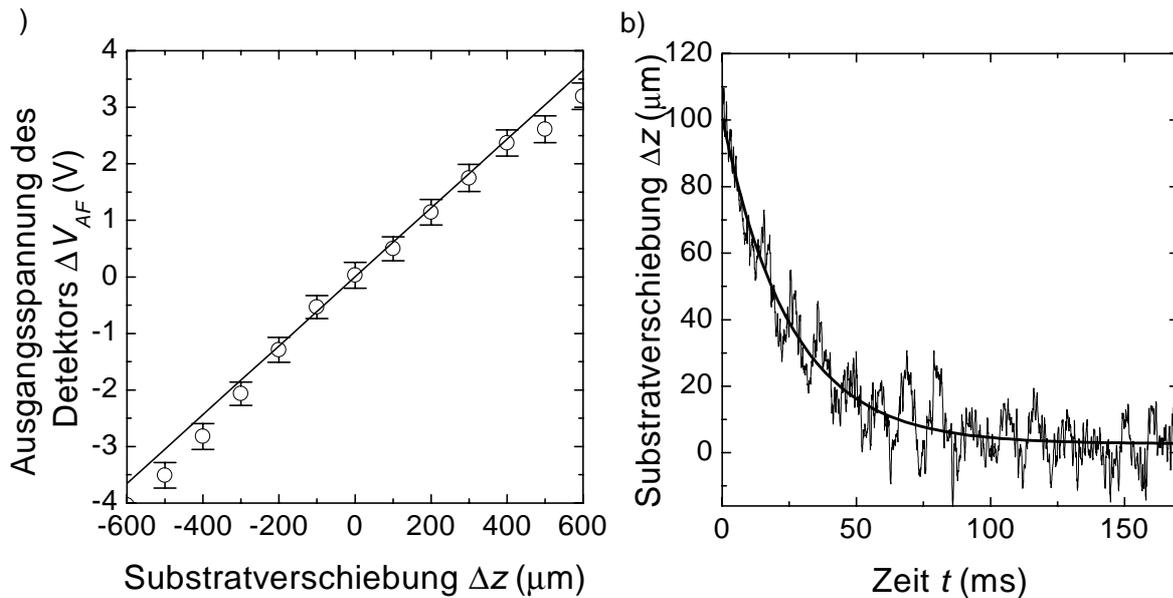


Abbildung 3.6: a) Die Differenz $\Delta V_{AF} = V_1 - V_2$ der Spannungen des Autofokusdetektors ist proportional zur Probenverschiebung $\Delta z = -600 \dots 600 \mu\text{m}$. b) Die Regelung auf eine Abweichung $\Delta z = 100 \mu\text{m}$ erfolgt mit einer Zeitkonstanten $\tau_{AF} = 25 \text{ ms}$.

so entweicht er als Folge der starken Erwärmung während des Laserpulses explosionsartig und die Schicht wird porös [60].

Gängige Verfahren zur Abscheidung von Silicium aus der Gasphase benutzen als Ausgangsmaterial gasförmiges SiH_4 (Silan), das durch geeignete Anregung dissoziiert, wodurch Silicium auf dem Substrat zurückbleibt. Die Anregung des Silans erfolgt bei der Niederdruck-Gasphasenabscheidung (Low Pressure Chemical Vapor Deposition = LP-CVD) thermisch durch ein auf über $500 \text{ }^\circ\text{C}$ erwärmtes Substrat. Wegen der hohen Temperaturen wird wenig Wasserstoff in die Schichten eingebaut. Größere Substrate lassen sich bei höheren Abscheideraten durch Plasmaanregung (Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition = PECVD) des Silans abscheiden. Bei diesen Verfahren liegt die Substrattemperatur üblicherweise unter $300 \text{ }^\circ\text{C}$. Deshalb ist der Wasserstoffgehalt deutlich höher und die a-Si Schichten sind nicht zur Laserkristallisation geeignet. Durch einen auf die Abscheidung folgenden Temperschnitt, bei dem die Probe für ca. eine Stunde auf $400 \text{ }^\circ\text{C}$ getempert wird, kann man aber den Wasserstoff aus der Schicht heraustreiben.

Die Kathodenzerstäubung (Sputtern) scheidet Silicium nicht aus der Gasphase, sondern aus festem Silicium ab. Ein elektrisches Feld beschleunigt hierbei Argonionen auf

einen Siliciumwafer. Dadurch werden aus ihm Atome herausgeschlagen, die sich auf dem geeignet befestigten Glas niederschlagen. Es lassen sich so wasserstofffreie Schichten mit hohen Depositionsraten bei Raumtemperatur abscheiden.

Im Rahmen dieser Arbeit werden alle drei Verfahren zur Deposition verwendet. Die Untersuchungen der Kristallstruktur der laserkristallisierten Schichten zeigt, daß die Depositionsmethode keinen Einfluß auf Textur und Kristallitgröße hat. Deshalb wird nicht explizit auf die unterschiedlichen Schichten verwiesen. Dünnschichttransistoren werden hingegen nur aus amorphem LPCVD-Silicium hergestellt. Dies liegt daran, daß mir keine andere Abscheidekammer zur Verfügung stand, die Gläser mit der für den TFT-Prozeß der Universität Rennes erforderlichen Geometrie von $5 \times 5 \text{ cm}^2$ mit ausreichender Homogenität beschichtet. Vor der Deposition des a-Si wird mittels Atmosphärendruck Gasphasenabscheidung (Atmospheric Pressure Chemical Vapor Deposition = APCVD) bei $450 \text{ }^\circ\text{C}$ eine 250 nm dicke SiO_2 -Schicht auf Glas deponiert, die die Diffusion von Verunreinigungen aus dem Glas in den Kanal des Transistors verhindert.

In einigen Experimenten wird das amorphe Silicium nicht direkt auf das Glas abgeschieden, sondern auf eine Zwischenschicht aus SiN_x . Die Abscheidung des amorphen SiN_x erfolgt durch PECVD mit einem Gasgemisch aus SiH_4 , NH_3 sowie N_2 .

Die Siliciumschichten werden auf Gläsern verschiedener Hersteller deponiert. Bei Schichten zur Analyse der Kristallstruktur wird Glas vom Typ Corning 1737F verwendet, während für Schichten aus denen Transistoren prozessiert werden Hoya NA40 Verwendung findet. Die Letzteren sind temperaturstabiler, was für den TFT-Prozeß mit Temperaturen bis 600°C erforderlich ist. Die Struktur des polykristallinen Siliciums nach der Laserkristallisation ist von der Glassorte unabhängig.

3.2.2 Prozessierung von TFTs

Aus den laserkristallisierten Siliciumschichten werden an der Universität Rennes TFTs mit dem Querschnitt der Abb. 3.7 gefertigt. In einem ersten Schritt wird das Gebiet des Kanals photolithographisch definiert. Der anschließende Plasmaätzprozeß entfernt bis auf den maskierten Kanal das gesamte laserkristallisierte Silicium. Danach wird großflächig eine dotierte amorphe Siliciumschicht, die später die Source und Drain Regionen bildet, abgeschieden. Die Dotierung für n-Kanal- bzw. p-Kanal-TFTs erfolgt während der Ab-

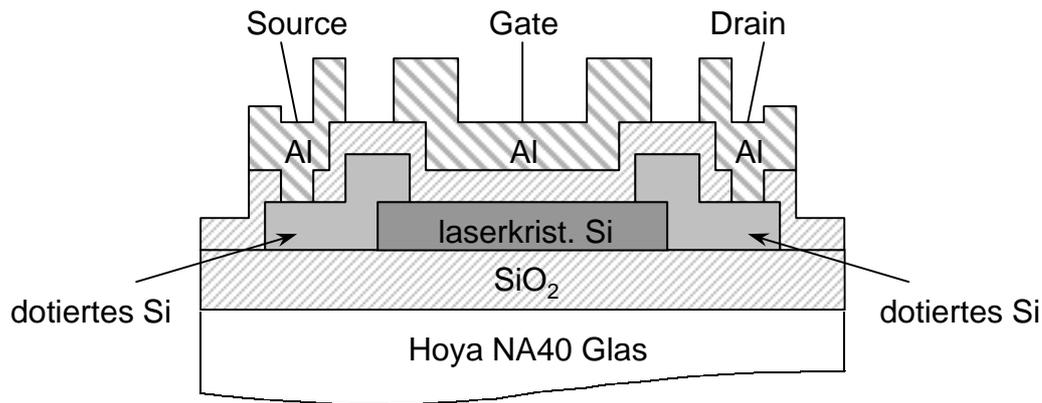


Abbildung 3.7: Querschnitt durch einen TFT mit laserkristallisiertem Kanal.

scheidung in-situ durch Beimischung von Phosphin bzw. Diboran. Durch ein Verhältnis Phosphin/Silan = 4×10^{-4} oder Diboran/Silan = 5×10^{-4} erhält man eine Phosphorkonzentration $n_{Ph} = 2 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ oder eine Borkonzentration $n_B = 8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Nach der Deposition werden die Schichten für zwei Stunden bei $600 \text{ }^\circ\text{C}$ festphasenkristallisiert. Das folgende Plasmaätzen definiert Source und Drain. Als Gatedielektrikum wird mittels AP-CVD eine 100 nm dicke SiO_2 -Schicht abgeschieden. Aufgedampftes Aluminium bildet das Gate und kontaktiert Source und Drain an den Stellen, an denen das SiO_2 naßchemisch geöffnet wurde.

Kapitel 4

Kristallisation mit dem Nd:YVO₄-Laser

Zur Kristallisation von Siliciumschichten mit dem SLS - Prozeß muß man, wie in Abschnitt 2.9 erläutert, die Energiedichte D des Lasers so wählen, daß ein Gebiet der Schicht, von der Oberfläche bis zum Glas, komplett aufschmilzt. Die dazu benötigten Energiedichten werden in diesem Kapitel in Abhängigkeit von der Schichtdicke ermittelt. Außerdem wird der Einfluß der Pulsenergie auf die Abmessungen der mit jedem Puls bzw. jedem Laser-scan kristallisierten Bereiche bestimmt. Aus den ermittelten Größen wird der Durchsatz, d.h. die pro Zeiteinheit kristallisierte Fläche, des Kristallisationsprozesses berechnet. Eine theoretische Abschätzung des maximalen Durchsatzes zeigt, daß weniger die maximale Pulsenergie eines Lasers den Durchsatz bestimmt als vielmehr seine Repetitionsrate.

4.1 Einzelpulse

Zur Untersuchung des Kristallisationsverhaltens in Abhängigkeit von der Laserpulsenergie dienen Einzelpulseexperimente. Hierzu wird die Repetitionsrate f des Lasers auf $f = 200$ Hz eingestellt und die Probe mit einer Geschwindigkeit $v_{scan} = 10$ mm/s in x-Richtung bewegt. Daraus ergibt sich eine Substratverschiebung zwischen zwei Laserpulsen von

$$\Delta x = \frac{v_{scan}}{f} = 50 \mu\text{m}. \quad (4.1)$$

Da die Verschiebung Δx größer ist als die Höhe $h_{teil} \approx 12 \mu\text{m}$ des mit jedem Puls kristallisierten Bereichs, überlappen die durch nacheinander folgende Laserpulse kristallisierten

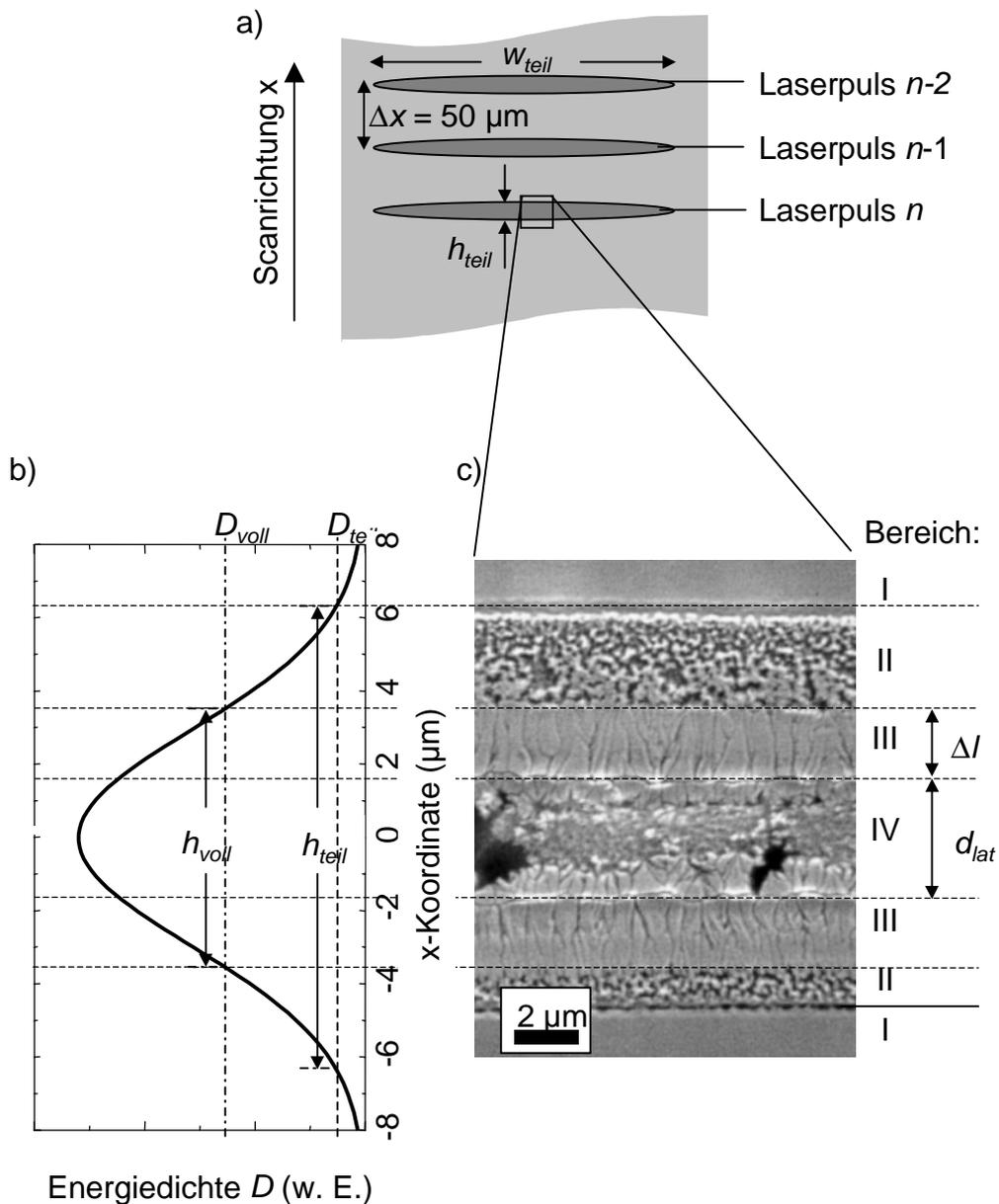


Abbildung 4.1: a) Zwischen zwei Laserpulsen wird die Probe um $\Delta x > h_{teil}$ in x -Richtung verschoben. Deshalb überlappen die kristallisierten Gebiete der einzelnen Laserpulse nicht. b) Energiedichte des Laserpulses an der Substratoberfläche aufgetragen über der Koordinate x . c) Ergebnis eines einzelnen Laserpulses im REM, nach dem Seccoätzen. Bei Überschreitung der Energiedichte D_{teil} wird das Silicium, von der Oberfläche beginnend, teilweise aufgeschmolzen. Nach der Kristallisation ist dieser Bereich feinkristallin. Auf einer Breite h_{voll} wird die Energiedichte D_{voll} überschritten, die nötig ist um das Silicium vollständig aufzuschmelzen. Während der Abkühlung setzt vom Rand dieses Bereiches laterales Wachstum in die Mitte ein. In der Mitte des aufgeschmolzenen Bereiches stoppt homogene Nukleation, die in feinkristallinem Material resultiert, das laterale Wachstum.

Bereiche nicht, wie Abb. 4.1a zeigt.

Zur Analyse der Kristallitstruktur wird die Probe zunächst mit der sogenannten Seccoätzlösung [61] angeätzt. Durch die Seccoätze werden vor allem Defekte der Kristallstruktur des Siliciumeinkristalls angegriffen. Somit werden die Korngrenzen als Einkerbungen sichtbar und können im Rasterelektronenmikroskop (REM) analysiert werden.

Abbildung 4.1b zeigt die Energiedichteverteilung D des Laserpulses in Richtung der x-Koordinate. Nach der Kristallisation erhält man typischerweise den kristallisierten Bereich der Abbildung 4.1c, der aus den vier verschiedenen Bereichen I-IV besteht. Im äußersten Bereich I reicht die Energiedichte nicht aus, um einen Teil des Siliciums zu schmelzen. Das Silicium bleibt amorph. Auf einer Höhe h_{teil} wird die Energiedichte D_{teil} überschritten, die gerade ausreicht, eine dünne Schicht aufzuschmelzen und zu Bereich II führt. In den zentralen Bereichen III und IV ist die Energiedichte auf einer Höhe h_{voll} größer als die Energiedichte D_{voll} und führt zum kompletten Schmelzen der Siliciumschicht. Die Bereiche III und IV unterscheiden sich durch den Kristallisationsmechanismus während der Abkühlung des Siliciums. Laterales Wachstum setzt dabei an der Grenzfläche zwischen Bereich II und Bereich III ein. Das laterale Wachstum der Körner in Bereich III wird nach der Länge Δl durch homogene Nukleation in Bereich IV gestoppt. Während der Kristallisation wird latente Wärme frei, die durch Diffusion das geschmolzene Silicium in der Nähe der Kristallisationsfront erwärmt. Die Temperatur fällt von ihrem höchsten Wert direkt an der Grenzfläche fest/flüssig in die Mitte des geschmolzenen Bereichs ab [62]. Deshalb bleibt bei der homogenen Nukleation ein Streifen flüssiges Silicium übrig, in den nun auch die neu entstandenen Körner aus der Mitte lateral hineinwachsen. Die Körner sind an beiden Seiten des Bereichs IV in Abb. 4.1 zu sehen.

Die laterale Wachstumslänge Δl sowie der Abstand der lateral gewachsenen Körner d_{lat} ist von der Pulsenergie des Lasers und der Schichtdicke abhängig, wie Abb. 4.2 zeigt.

4.1.1 Schichtdickenabhängigkeit der Schmelzenergiedichte

Um die Energiedichten zum vollständigen bzw. teilweisen Aufschmelzen zu bestimmen, ist die Ermittlung der Fläche des Strahlquerschnitts nötig. Da der Laserstrahl am Ort der Probe sehr schmal fokussiert ist, ist eine direkte Messung des Strahlquerschnitts nicht mit einfachen Mitteln möglich. Im folgenden werden deshalb die Strahldimensionen aus

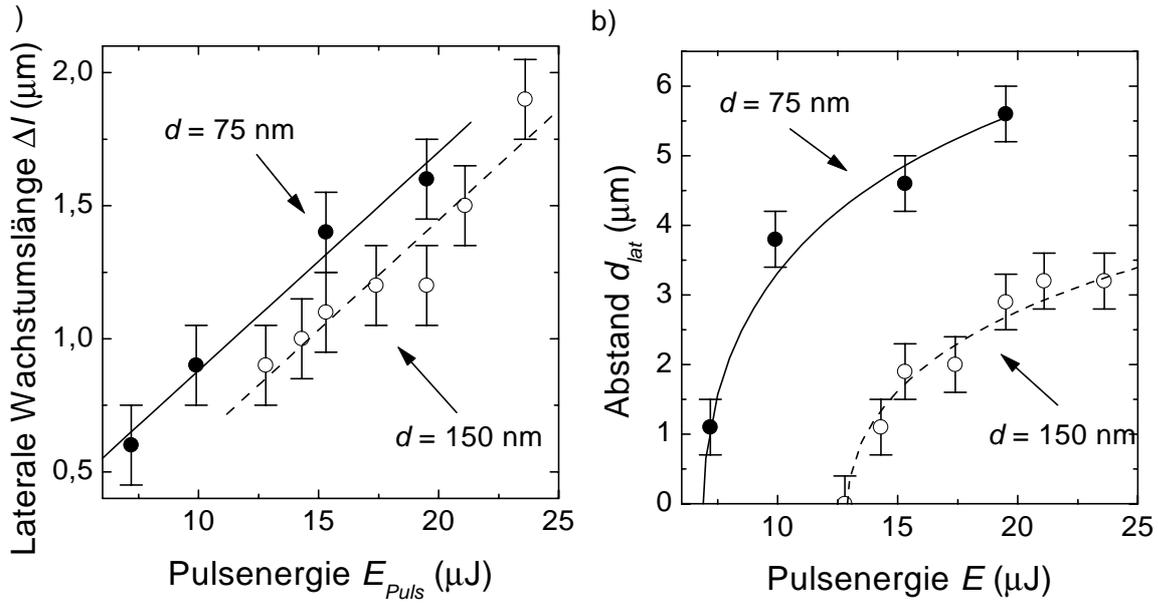


Abbildung 4.2: a) Die laterale Wachstumslänge Δl nimmt mit der Pulsenergie E zu. b) Abstand d_{lat} der lateralen Körner.

der Pulsenergieabhängigkeit der Breite w_{teil} bzw. w_{voll} sowie der Höhe h_{teil} bzw. h_{voll} der teilweise bzw. vollständig aufgeschmolzenen Bereiche ermittelt. Abbildung 4.3 zeigt w_{teil} , w_{voll} , h_{teil} und h_{voll} in Abhängigkeit von der Pulsenergie für die Schichtdicken $d = 75$ und 150 nm .

Der Laserstrahl besitzt die Gauß-förmige Energiedichteverteilung

$$D(x, y) = D_0 e^{-(8x^2/H^2)} e^{-(8y^2/W^2)} \quad (4.2)$$

mit der Gauß-Strahlbreite W und der Höhe H , die durch die Strahlformungsoptik vorgegeben sind. Um die Höhe h_{teil} zu berechnen, setzt man in Gl. (4.2) $y = 0$, $x = h_{teil}/2$ und $D(x, y) = D_{teil}$ ein und erhält so

$$D_{teil} = D_0 e^{-(2h_{teil}^2/H^2)}. \quad (4.3)$$

Logarithmieren und Auflösen nach h_{teil} liefert

$$h_{teil} = H \sqrt{\frac{1}{2} \ln \frac{D_0}{D_{teil}}}. \quad (4.4)$$

Die Energiedichte D_0 im Zentrum des Strahls ist abhängig von der Pulsenergie E , die

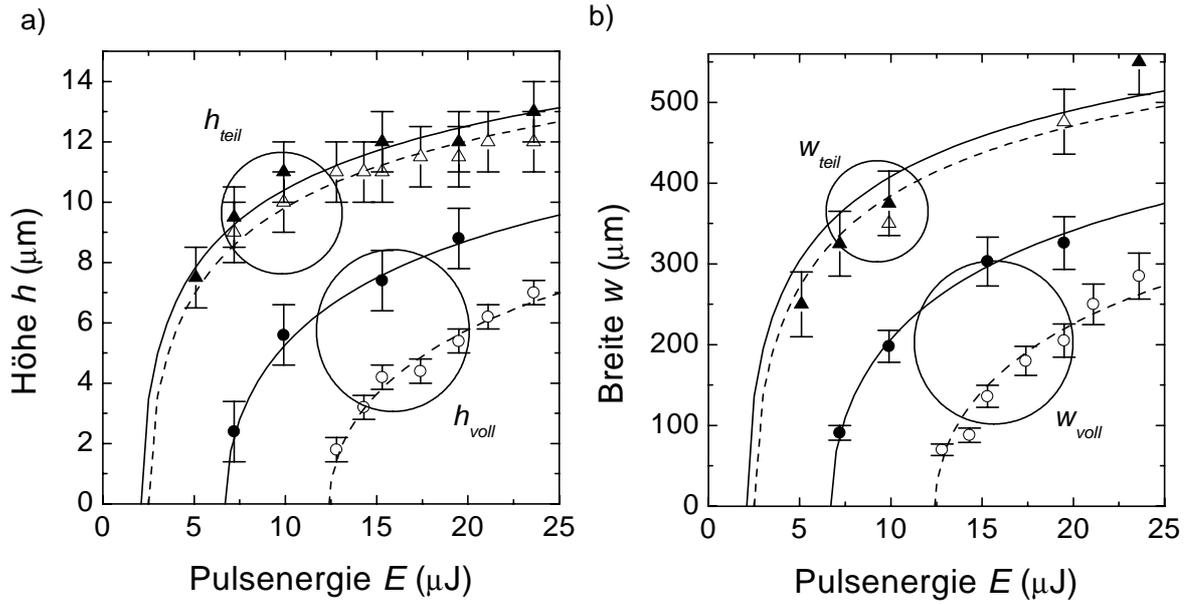


Abbildung 4.3: Breite w und Höhe h der komplett (w_{voll} , h_{voll}), bzw. teilweise (w_{teil} , h_{teil}) aufgeschmolzenen Bereiche. Die Kurven sind nach Gl. (4.10) berechnet. Offene Symbole entsprechen einer Schichtdicke $d = 150$ nm, geschlossene einer Dicke $d = 75$ nm.

nach Gl. 2.1 über

$$E = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} D(x, y) dx dy \quad (4.5)$$

mit der Energiedichte $D(x, y)$ zusammenhängt. Durch Einsetzen von Gl. (4.2) und Integration folgt

$$E = \frac{D_0 \pi W H}{8}, \quad (4.6)$$

bzw.

$$D_0 = \frac{8E}{\pi W H}. \quad (4.7)$$

Einsetzen dieses Ergebnisses in Gl. (4.4) liefert die gesuchte Abhängigkeit

$$h_{teil}(E) = H \sqrt{\frac{1}{2} \ln \frac{8E}{\pi W H D_{teil}}}. \quad (4.8)$$

Äquivalente Ausdrücke erhält man für alle Größen, die mit einer Schwellenergiedichte korreliert sind, wie z. B. h_{voll} , w_{voll} und w_{teil} , indem man die entsprechende Schwellenergie anstelle von D_{teil} einsetzt. Gleichung (4.8) enthält die drei Unbekannten W , H und D_{teil} . Um die Zahl der Unbekannten zu reduzieren, kann man die Energieschwelle E_{teil} einführen. Sie ist die Energie, die nötig ist, um in einem lateral infinitesimal schmalen Gebiet $h_{teil} \approx 0$

Tabelle 4.1: Die pulsenergieabhängige Messung der Breite bzw. Höhe von komplett und teilweise aufgeschmolzenen Bereichen liefert die Parameter W und H des Laserstrahls an der Probenoberfläche sowie die zum Schmelzen nötigen Energieschwellen für die verschiedenen Schichtdicken d .

Schichtdicke d (nm)	Strahlbreite W (μm)	Strahlhöhe H (μm)	Energiedichte D_{voll} (mJ/cm ²)	Energiedichte D_{teil} (mJ/cm ²)
75			313	2.1
150	462	11.8	580	2.5

eine vertikal infinitesimal dünne Schicht des Siliciums aufzuschmelzen. In Experimenten ist E_{teil} einfach zu bestimmen da sich die Struktur der Siliciumschicht erst bei Pulsenergien $E > E_{\text{teil}}$ ändert. Für $E < E_{\text{teil}}$ bleibt die Schicht amorph. Aus Gl. (4.8) folgt

$$E_{\text{teil}} = \frac{D_{\text{teil}} \pi W H}{8}. \quad (4.9)$$

Damit wird Gl. (4.8) zu

$$h_{\text{teil}}(E) = H \sqrt{\frac{1}{2} \ln \frac{E}{E_{\text{teil}}}}. \quad (4.10)$$

Eine Bestimmung der Energieschwelle E_{teil} sowie die energieabhängige Messung der Höhe h_{teil} des teilweise aufgeschmolzenen Bereiches ermöglicht durch Anpassung an die gemessenen Punkte die Bestimmung der Gauß-Höhe H . Die gleiche Auswertung für die Breite w_{teil} des aufgeschmolzenen Bereiches liefert die Gauß-Breite W . Abbildung 4.3 zeigt die an die Messpunkte angepassten Kurven, Tab. 4.1 die ermittelten Abmessungen W und H .

Durch Umformen von Gl. (4.9) erhält man die gesuchte Energiedichte

$$D_{\text{teil}} = \frac{2 E_{\text{teil}}}{\pi W H}. \quad (4.11)$$

Einsetzen der Zahlenwerte von W und H liefert die in Tab.4.1 angegebenen Werte für die Energiedichten D_{voll} , D_{teil} für die Schichtdicken $d = 75$ nm und 150 nm.

4.2 Scans

Zur großflächigen Kristallisation mit dem SLS-Verfahren verringert man den Versatz Δx zwischen zwei Laserpulsen auf Werte, die kleiner als die laterale Wachstumslänge Δl sind. Wie Abb. 4.2 zeigt, ist Δl abhängig von der Pulsenergie E und somit bei gleichem Strahlquerschnitt auch von der Energiedichte D . Bei Schwingungen des Probenhalters sowie bei ungenauer Positionierung ändert sich der Querschnitt des Laserstrahls, und somit D , an der Probenoberfläche. Dies führt auch zu Schwankungen von Δl . Um eine örtliche Unterbrechung des lateralen Wachstums zwischen zwei Laserpulsen als Folge der Variation von D zu vermeiden, wählt man Δx deutlich kleiner als Δl . In dieser Arbeit wird

$$0.3 \text{ } \mu\text{m} \leq \Delta x \leq 0.7 \text{ } \mu\text{m} \quad (4.12)$$

verwendet. Bei gegebener Repetitionsfrequenz f erhält man durch Umformung von Gl. (4.1) die Scangeschwindigkeit

$$v_{scan} = \frac{\Delta x}{\Delta t} = \Delta x f. \quad (4.13)$$

Für eine Frequenz $f = 20 \text{ kHz}$ erhält man aus den Gln. (4.12) und (4.13)

$$6 \frac{\text{mm}}{\text{s}} \leq v_{scan} \leq 14 \frac{\text{mm}}{\text{s}}. \quad (4.14)$$

4.2.1 Schwellenergie für laterales Wachstum

In Abschnitt 4.1 wurde die Energiedichte ermittelt, die nötig ist, um amorphes Silicium komplett aufzuschmelzen und so laterales Wachstum zu ermöglichen. Analog dazu wird in diesem Abschnitt die Energiedichteschwelle D_{SLS} für den Einsatz des sequentiellen lateralen Wachstums für verschiedene Schichtdicken d und Repetitionsraten f ermittelt.

Abbildung 4.4a zeigt im unteren Teil eine Normanski-Differential-Kontrast (NDIC)-Mikroskopaufnahme eines einzelnen Laserscans, dessen Energiedichteverteilung im oberen Teil dargestellt ist. In Abbildung 4.4b ist die gleiche Probe nach dem Seccoätzen zu sehen. Die Ätzeit von 40 s wurde so gewählt, daß Siliciumkörner mit Korngrößen unter $1 \text{ } \mu\text{m}$ von der Ätzlösung hinterätzt und somit von der Probe abgelöst werden. Es bleibt nur der Bereich übrig, in dem die Energiedichteschwelle D_{SLS} überschritten wird. Die daraus resultierenden langen Kristallite erscheinen in der Mikroskopaufnahme als helle Bereiche, während die dunklen Bereiche vor dem Ätzen amorph oder nanokristallin waren.

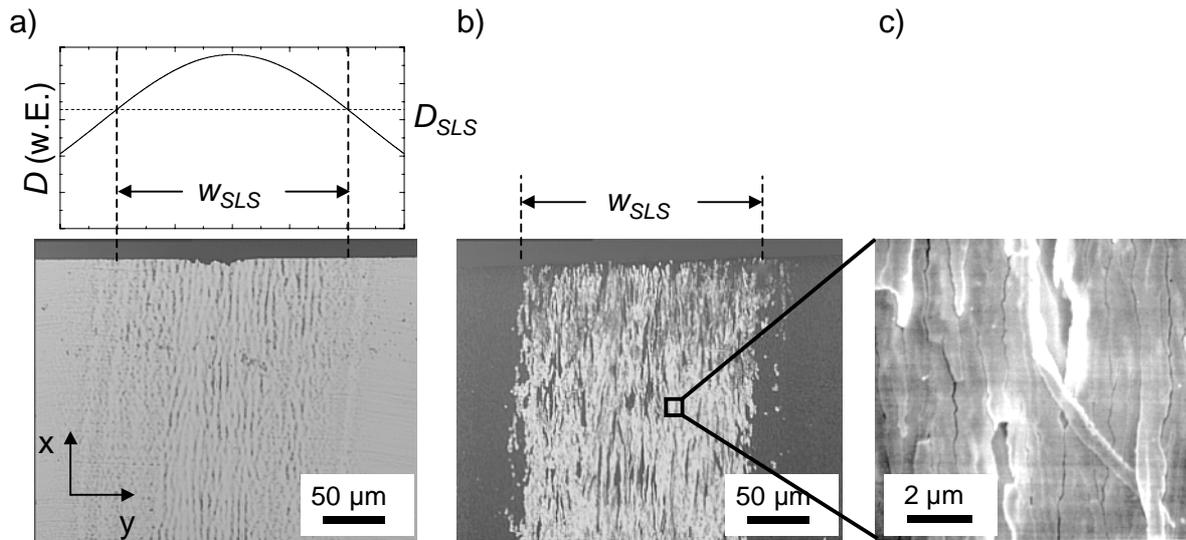


Abbildung 4.4: a) NDIC-Mikroskopaufnahmen eines einzelnen Laserscans, dessen Energiedichteverteilung über dem Bild gezeigt ist. Im Bereich der Breite w_{SLS} wird die Energiedichte D_{SLS} überschritten. b) Nach dem Seccoätzen erscheint die gesamte Breite w_{SLS} hell, während in den äußeren Bereichen das feinkörnige Silicium weggeätzt wurde, was zu den dunklen Bereichen im Bild führt. c) Eine REM-Aufnahme des hellen Bereiches zeigt lange Kristallite, von denen auch einige teilweise durch Unterätzung abgelöst wurden.

Die Raster-Elektronen-Mikroskop- (REM) Aufnahme in Abbildung 4.4c zeigt die langen Kristallite, von denen einige so stark hinterätzt wurden, daß sie während des Spülens nach dem Seccoätzen und anschließendem Trockenblasen mit Stickstoff von dem Glas abgehoben wurden.

Ein Vergleich der Abbildungen 4.4a und 4.4b zeigt, daß man die Bereiche des sequentiellen lateralen Wachstums durch die im Lichtmikroskop sichtbaren, charakteristischen Linien in Scanrichtung identifizieren kann. Dieser Bereich wird zu beiden Seiten von mikrokristallinen Bereichen mit $D < D_{SLS}$ abgegrenzt, die im Lichtmikroskop eine raue Oberfläche aufweisen.

Abbildung 4.5 zeigt die Breite w_{SLS} des SLS-Bereichs von Proben verschiedener Schichtdicke d , die mit verschiedenen Pulsenergien bei konstanter Frequenz $f = 20$ kHz und konstantem Versatz $\Delta x = 0.5$ μm kristallisiert wurden. Analog zu Gl. (4.8) kann man die Breite

$$w_{SLS}(E) = W \sqrt{\frac{1}{2} \ln \frac{8E}{\pi W H D_{SLS}}} \quad (4.15)$$

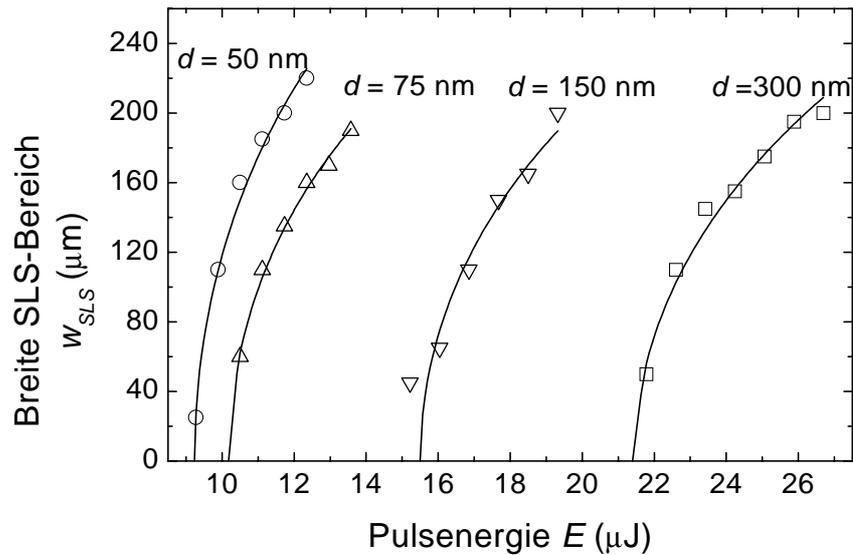


Abbildung 4.5: Die Breite w_{SLS} des langkristallinen Bereiches steigt für jede der Schichtdicken d bei Überschreiten einer schichtdickenspezifischen Schwellenergie stark an. Die maximale Breite wird durch ein Aufreißen der geschlossenen Siliciumschicht begrenzt.

des SLS-Bereiches als Funktion der Pulsenergie E , mit den Gaußschen Strahlparametern W und H und der Energieschwelle D_{SLS} schreiben. Durch Anpassung der Messung an Gl. (4.15) erhält man für die verschiedenen Schichtdicken d die Schwellenergiedichten D_{SLS} , die in Abbildung 4.6 für verschiedene Scangeschwindigkeiten v_{scan} dargestellt sind. Man sieht einen linearen Anstieg von D_{SLS} mit der Schichtdicke d . Bei der Schichtdicke $d = 150$ nm liegt D_{SLS} etwas über der an die Meßpunkte angepassten Gerade. Ein Vergleich mit Abb. 2.2 zeigt, daß die Absorption für diese Dicke d bei Berücksichtigung der kohärenten Vielfachreflexionen ein Minimum hat. Folglich wird eine höhere Energiedichte zum Aufschmelzen benötigt. Abschnitt 5.2.2.2 geht auf den Einfluß der Mehrfachreflexionen noch detaillierter ein.

4.2.2 Großflächige Kristallisation

Wie Abb. 4.5 zeigt, ist die Breite des großkristallinen Bereiches wegen des Aufreißens der flüssigen Siliciumschicht bei hohen Energien auf ca. $200 \mu\text{m}$ beschränkt. Um Proben von bis zu $5 \times 5 \text{ cm}^2$ großflächig zu kristallisieren, muß man deshalb viele einzelne Laserscans aneinanderreihen. Nach jedem Scan wird die Probe hierzu in y -Richtung um Δy verschoben. Abbildung 4.7a zeigt NDIC-Mikroskopaufnahmen nach zwei um $\Delta y =$

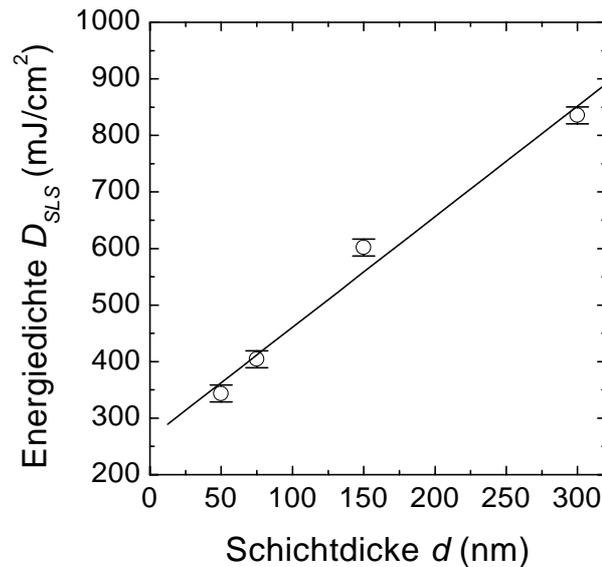


Abbildung 4.6: Die Energiedichte, bei der der SLS-Prozeß einsetzt, steigt linear mit der Schichtdicke d an.

130 μm verschobenen Laserscans mit der zugehörigen Energiedichteverteilung. Nach dem Seccoätzen der Probe erhält man im gesamten kristallisierten Gebiet große Kristallite, wie Abb. 4.7b zeigt. Durch den zweiten Scan wird überall dort, wo die Energiedichte D größer ist als die Schwelle D_{SLS} , das Silicium komplett aufgeschmolzen, und es entstehen neue, lange Kristallite. Dieser Wachstumsmechanismus findet sowohl in den Bereichen, die durch den vorherigen Scan noch nicht kristallisiert wurden, als auch im Überlappbereich statt. In Bereichen des Überlapps mit $D < D_{SLS}$ wird nur die Oberfläche der Siliciumschicht angeschmolzen. Anders als bei der Rekristallisation von vorher amorphen Bereichen befindet sich nun unter der flüssigen Siliciumschicht eine Schicht langkristallines Silicium. Von dieser setzt während der Abkühlung epitaktisches Wachstum von der Grenzfläche fest/flüssig zur Siliciumoberfläche ein [63]. Dadurch werden die Körner, die vor dem zweiten Scan vorhanden waren, wieder rekonstruiert.

Um großflächig lange Kristallite durch wiederholtes Scannen mit dem Versatz Δy zu erhalten, muß lediglich

$$\Delta y < w_{SLS} \quad (4.16)$$

erfüllt sein. Wie zu Beginn des Abschnitts 4.2 erwähnt, treten in der Praxis an der Probenoberfläche Energiedichteschwankungen auf, die nach Abb. 4.5 zu Schwankungen von w_{SLS} führen. In einer Versuchsreihe hat sich gezeigt, daß die Proben mit einem Versatz

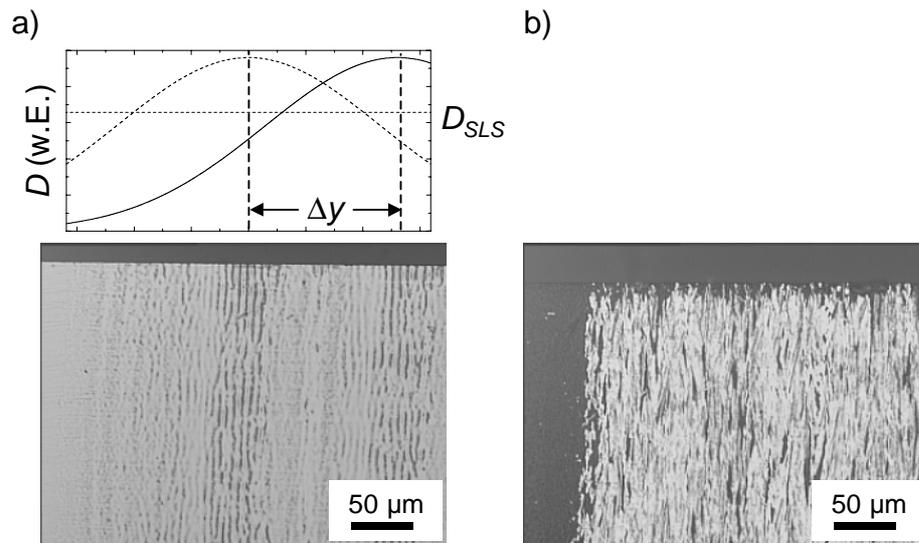


Abbildung 4.7: a) NDIC-Mikroskopaufnahme nach zwei um $\Delta y = 130 \mu\text{m}$ versetzten Laserscans. Im oberen Teil ist die Energiedichtevertellung angegeben. b) Gleiche Probe wie in a) nach dem Seccoätzen. Man sieht große Kristallite im gesamten Bereich, auch dort, wo die beiden Scans überlappen.

von $\Delta y = 0.93 w_{SLS}$ homogen werden.

4.3 Durchsatz des SLS-Prozesses

Für die industrielle Anwendung der Laserkristallisation ist die Kristallisationsrate $r = A/t$, d.h. die kristallisierte Fläche A pro Zeit t , ein wichtiges Kriterium und wird deshalb in diesem Abschnitt betrachtet.

4.3.1 Berechnung der maximalen Kristallisationsrate

Im folgenden gehen wir von einem Laser mit einem rechteckigen Strahlquerschnitt $A = WH$ und einer Repetitionsrate f aus. Ist die Fläche A kleiner als die zu kristallisierende Fläche, was z. B. für große Displays im allgemeinen der Fall ist, so muß man das Substrat zwischen zwei Laserpulsen um die Strecke Δx verschieben. Mit diesen Annahmen erhält man die Kristallisationsrate

$$r = \Delta x W f. \quad (4.17)$$

Diese Gleichung gilt nicht nur für den SLS-Prozeß, sondern für die Laserkristallisation allgemein.

Für den SLS-Prozeß limitiert, wie in Abschnitt 4.2 erläutert, die Wachstumslänge Δl die Verschiebung

$$\Delta x < \Delta l. \quad (4.18)$$

Außerdem muß die gesamte Schichtdicke des Siliciums vollständig aufgeschmolzen werden. Hierzu muß die Energiedichte $D = E/(wh)$ größer sein als die Energiedichte D_{voll} , die zum Aufschmelzen nötig ist. Das heißt,

$$W \leq \frac{E}{D_{voll}H} \quad (4.19)$$

muß erfüllt sein. Durch Einsetzen der Gln. (4.18) und (4.19) in Gl. (4.17) erhält man

$$r \leq \frac{\Delta l E f}{D_{voll} H}. \quad (4.20)$$

Die rechte Seite dieser Gleichung ist die Obergrenze der Laserkristallisationsrate. Die Laserparameter E und f sowie die durch die Abbildungsoptik bestimmte Höhe H können durch den Aufbau beeinflußt werden. Man sieht, daß die maximale Kristallisationsrate mit abnehmendem H zunimmt. Allerdings kann H nicht beliebig verkleinert werden. Zwei zusätzliche Bedingungen müssen beachtet werden:

1. Das laterale Wachstum nach jedem Laserpuls erfolgt nach Abschnitt 4.1 von beiden Seiten des komplett aufgeschmolzenen Bereiches. Wird die Höhe H dieses Bereiches zu klein gewählt, so begrenzt nicht die homogene Nukleation in der stark unterkühlten Schmelze das laterale Wachstum, sondern die Kollision von Kristalliten, die von gegenüberliegenden Seiten aus in die Mitte wachsen. Um eine Kollision zu verhindern, muß H so gewählt werden, daß

$$H \geq 2\Delta l \quad (4.21)$$

2. Die Verwendung von optischen Elementen zur Strahlformung limitiert das Aspektverhältnis $W/H \leq 10^3 \dots 10^4$ je nach Güte der verwendeten Optik [64]. Mit Spezialoptiken kann $W/H \approx 10^4$ erreicht werden. Auflösen nach H und Einsetzen von Gl. (4.19) führt zu

$$H \geq 10^{-2} \sqrt{\frac{E}{D_{voll}}}. \quad (4.22)$$

Je nach Größe der Pulsenergie E bestimmt Gl. (4.21) oder Gl. (4.22) die minimale Höhe H des aufgeschmolzenen Bereichs. Setzt man die rechten Seiten der beiden Gleichungen gleich, erhält man die Grenzenergie

$$E_{grenz} = 4 \times 10^4 \Delta l^2 D_{voll}, \quad (4.23)$$

bei welcher der Übergang von Gl. (4.21) zu Gl. (4.22) als Limit für H erfolgt. Durch Einsetzen von Gl. (4.21) bzw. Gl. (4.22) in Gl. (4.20) erhält man die maximale Kristallisationsrate

$$r_{max} = \begin{cases} \frac{E}{2D_{voll}} f & : E < E_{grenz} \\ 10^2 \sqrt{\frac{E}{D_{voll}}} f & : E \geq E_{grenz} \end{cases} \quad (4.24)$$

Für Pulsenergien kleiner als E_{grenz} steigt die Kristallisationsrate nach Gl. 4.24 linear mit E . Dies liegt daran, daß bei konstantem H zusätzliche Energie für eine größere Breite W des aufgeschmolzenen Bereichs verwendet werden kann. Ist die Pulsenergie größer als E_{grenz} , d.h. die Optik limitiert H , so muß bei einer Steigerung von E auch H vergrößert werden, um eine größere Breite W zu erhalten. Die zusätzliche Energie steht also nicht vollständig zur Vergrößerung der Breite W zur Verfügung und r_{max} ist proportional zu \sqrt{E} . In beiden Fällen ist r_{max} aber proportional zur Repetitionsfrequenz f des Lasers.

4.3.2 Kristallisationsraten verschiedener Lasertypen

Zur Abschätzung der maximalen Kristallisationsrate r_{max} setzt man typische Werte aus Abschnitt 4.2 für die Größen in Gl. (4.24) ein. Für die Wachstumslänge ist $\Delta l \approx 0.7 \mu\text{m}$ eine vernünftige Obergrenze. Die Energieschwelle liegt bei $D_{SLS} \approx 500 \text{ mJ/cm}^2$. Damit erhält man nach Gl. (4.23) eine Grenzenergie von $E_{grenz} \approx 0.1 \text{ mJ}$. Abbildung 4.8 stellt den aus Gl. (4.24) berechneten Verlauf von r_{max} dar.

Kommerzielle Excimer- bzw. Nd:YVO₄-Laser sind mit Pulsenergien bis $E_{Ex} = 670 \text{ mJ}$ bei $f_{Ex} = 300 \text{ Hz}$ [65], bzw. $E_{Nd} = 1.25 \text{ mJ}$ bei $f_{Nd} = 100 \text{ kHz}$ erhältlich [66]. Für die Excimerlaser ergibt sich damit aus Gl. (4.24) $r_{max} = 2.4 \text{ cm}^2/\text{s}$, während man für Nd:YVO₄-Laser $r_{max} = 35 \text{ cm}^2/\text{s}$ erhält.

Ein Laserpuls mit der Energie E hat im Falle einer nach Abschnitt 4.3.1 optimierten Abbildung nach den Gln.(4.22) und (4.19) auf dem Substrat einen Querschnitt mit der Höhe H und der Breite W . Tabelle 4.2 vergleicht die Werte für Excimer- bzw. Nd:YVO₄-Laser. Bei der Verwendung eines Nd:YVO₄-Lasers ist nach Tabelle 4.2 die Strahlhöhe

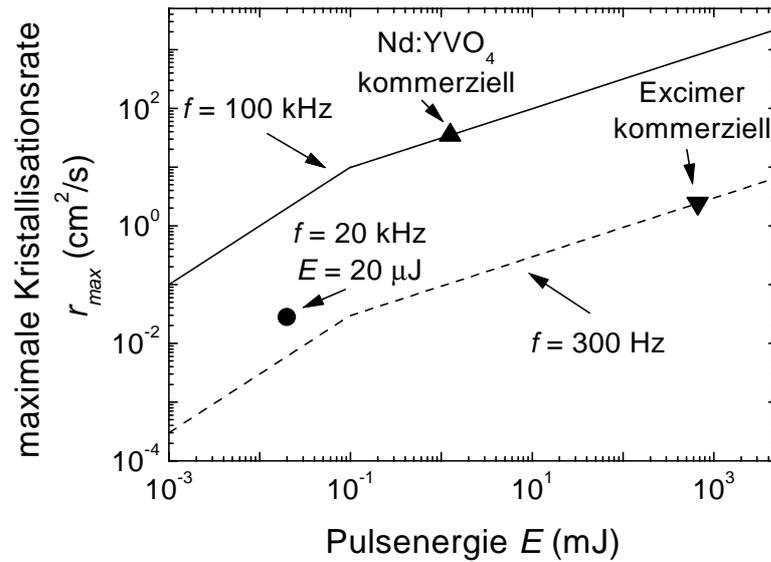


Abbildung 4.8: Abschätzung der Obergrenze r_{max} der Kristallisationsrate für die Repetitionsfrequenzen $f = 300$ Hz bzw. $f = 100$ kHz. Bis zu einer Pulsenergie $E_{grenz} \approx 0.1$ mJ ist r_{max} proportional zu E . Oberhalb von E_{grenz} ist r_{max} proportional zu \sqrt{E} . Für kommerzielle Excimerlaser mit der Pulsenergie $E \approx 670$ mJ ist $r_{max} = 2.4$ cm²/s, während kommerzielle Nd:YVO₄-Laser mit einer Pulsenergie von 1.25 mJ bei 100 kHz eine Obergrenze $r_{max} = 35$ cm²/s haben. Der in der vorliegenden Arbeit verwendete Laser ermöglicht bei einer typischen Pulsenergie $E \approx 20$ μJ und einer Frequenz $f = 20$ kHz eine Kristallisationsrate von ca. 0.03 cm²/s.

$H_{Nd} = 5$ μm gleich der in Experimenten des Abschnitts 4.2 verwendeten, also gut zur Kristallisation geeignet. Damit auf der Strahlbreite von $W_{Nd} = 5$ cm die Energiedichte im Rahmen der Toleranz des SLS-Prozesses liegt, ergeben sich Anforderungen an die Ebenheit der Probe und an die Genauigkeit der Ausrichtung senkrecht zum Laserstrahl. Displaygläser sind mit Rauigkeiten von 3.5 μm auf 2.5 cm spezifiziert [67]. Dieser Wert liegt deutlich unter der Schärfentiefe der optischen Abbildung von $\Delta z \approx 40$ μm. Um über die Strahlbreite W_{Nd} eine Abweichung der z -Position der Probenoberfläche von weniger als $\Delta z = 40$ μm zu erhalten, muß die Probe mit einer Genauigkeit von $\Delta\phi \approx \Delta z/W_{Nd} \approx 0.04$ Grad ausgerichtet werden. Dies ist mit Standarddrehtischen möglich.

Die, in Hinblick auf den Durchsatz, optimierte Strahlbreite $W_{Ex} = 84$ cm bei Verwendung von Excimerlasern führt jedoch zu Problemen. Die Anforderungen an die Ebenheit des Glases und die Positioniermechanik steigen im Vergleich zum Nd:YVO₄-Laser

Tabelle 4.2: Berechnete Werte des nötigen Strahlquerschnitts zum Erreichen der maximalen Kristallisationsrate bei Verwendung kommerzieller Excimer- und Nd:YVO₄-Laser.

Laser	Pulsenergie E (mJ)	Strahlquerschnitt	
		Breite W (cm)	Höhe H (μm)
Nd:YVO ₄	1.25	5	5
Excimer	335	84	80

drastisch an. Desweiteren hat der Strahl eine Höhe von $H_{Ex} = 80 \mu\text{m}$. Bei einem Versatz von $\Delta x = 0.7 \mu\text{m}$ zwischen zwei Pulsen wird deshalb das Silicium in jedem Punkt $n = H_{Ex}/\Delta x \approx 120$ mal aufgeschmolzen. Dieser Wert ist deutlich höher als bei Verwendung des Nd:YVO₄-Lasers, für den man $n \approx 7$ erhält. In der Praxis muß man deshalb bei der Verwendung eines Excimerlasers für den SLS-Prozeß lichtundurchlässige Masken einsetzen, um den Strahlquerschnitt zu begrenzen [53].

Kapitel 5

Numerische Simulation

5.1 Grundlagen

Zur exakten Beschreibung der Vorgänge während der Laserkristallisation muß das Verhalten der einzelnen Siliciumatome betrachtet werden. Das Silicium wird durch die in Abschnitt 2.2 beschriebene Absorption erwärmt. Die einzelnen Atome können dadurch genügend Energie in Form von Gitterschwingungen zugeführt bekommen, um das Kristallgitter zu verlassen und die flüssige Phase zu bilden. Durch Wärmestrahlung und Wärmeleitung kühlt die Siliciumschicht und das darunterliegende Glas ab und die Atome werden wieder in das Kristallgitter eingebaut. Für diesen Vorgang ist nach Abschnitt 2.5 eine genaue Kenntnis der Struktur sowie der kristallographischen Orientierung der Oberfläche, an der sich die Atome anlagern, nötig. Eine solche Beschreibung ist selbst unter Vernachlässigung der Kristallorientierung sehr aufwendig und läßt sich nur in sehr kleinen Volumina durchführen.

In der vorliegenden Arbeit liegt der Schwerpunkt der Untersuchungen vor allem auf der Temperaturentwicklung, da erstmals ein Laser verwendet wird, dessen Repetitionsfrequenz von bis zu $f = 100$ kHz deutlich über den $f = 100 - 300$ Hz der meist benutzten Excimerlaser liegt. Die hohen Frequenzen führen dazu, daß sich das Silicium zwischen zwei Laserpulsen nicht bis auf die Raumtemperatur abkühlen kann und sich somit eine höhere Temperatur einstellt. Ihr Einfluß auf die Schmelz- und Kristallisationsvorgänge sowie Effekte der Schichtdicke d der Siliciumschicht und der Laserenergie E werden im folgenden untersucht. Das kristalline Wachstum wird sehr stark vereinfacht berücksichtigt, in-

dem ein Unterschreiten der Schmelztemperatur als Kriterium für die Phasenumwandlung dient. Temperatur- und grenzflächenabhängige Wachstumsgeschwindigkeiten und daraus folgende Unterkühlungen werden nicht berücksichtigt. Folglich liefern die Simulationen auch keine Informationen über die Kristallitstruktur.

Der Wärmetransport in den einzelnen Schichten der Probe erfolgt durch drei Prozesse:

1. Wärmeleitung
2. Konvektion
3. Wärmestrahlung

Im folgenden wird die Wärmestrahlung vernachlässigt¹. Die restlichen Vorgänge lassen sich dann durch die Grundgleichungen der Hydrodynamik beschreiben [69]:

1. Energieerhaltung
2. Kontinuitätsgleichung (Massenerhaltung)
3. Navier-Stokes-Gleichung (Impulserhaltung)

Die Gleichungen sind nur unter starken Vereinfachungen analytisch lösbar. Eine numerische Lösung ist wegen des nichtlinearen Systems partieller Differentialgleichungen mit sehr großem Aufwand verbunden. Deshalb wird im folgenden die Konvektion in der flüssigen Phase vernachlässigt. Alle Teilchen haben dann eine Geschwindigkeit $v = 0$, und die Impulserhaltung sowie die Kontinuitätsgleichung sind erfüllt. Aus der übrigbleibenden Energieerhaltung folgt die Wärmeleitungsgleichung

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{c_p \rho} [\text{div}(\lambda \text{grad } T) + \alpha I] \quad (5.1)$$

mit den temperaturabhängigen Werten der spezifischen Wärmekapazität c_p , der Dichte ρ , der Wärmeleitfähigkeit λ , dem Absorptionskoeffizienten α sowie der Intensität I des Laserlichtes.

¹Nach dem Stefan-Boltzmann-Gesetz emittiert ein schwarzer Strahler die Wärmestromdichte $j_{\text{Strahl}} = \sigma T^4$ mit der Stefan-Boltzmann-Konstante $\sigma = 5.67 \times 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$ [68]. Bei der maximalen Schichttemperatur, der Siedetemperatur $T_{\text{Siede}} \approx 2700 \text{ K}$ von Silicium, ist $j_{\text{Strahl}} \approx 3 \times 10^6 \text{ W m}^{-2}$. Zur Zeit t , bei der die Temperatur und somit auch j_{Strahl} am größten ist, ergeben die Simulationen typische Temperaturgradienten $\text{grad } T \approx 10^{10} \text{ K/m}$ im Glas. Die durch Wärmeleitung abgeführte Wärmestromdichte $j_{\text{Diff}} = -\lambda \text{grad } T \approx 10^8 \text{ W m}^{-2}$ (mit λ^{Glas} aus Abb. A.1d) ist somit zwei Größenordnungen größer als j_{Strahl}

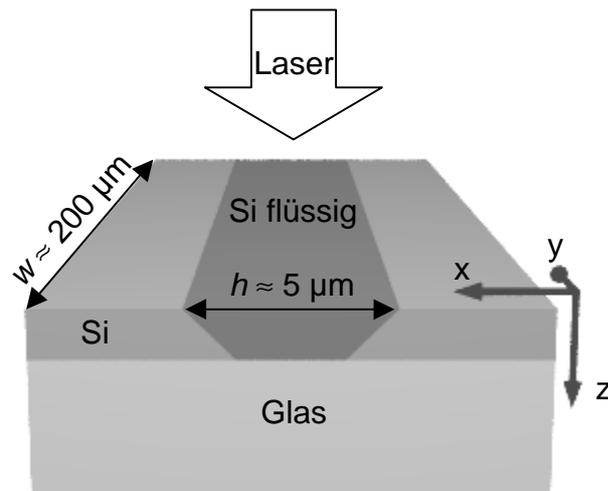


Abbildung 5.1: Die Strahlgeometrie rechtfertigt, die Energiedichte in y -Richtung konstant zu setzen. Deshalb ist der aufgeschmolzene Bereich in der Aufsicht auf die Probe ein Rechteck mit den Kantenlängen h und w . Bei der Lösung der Differentialgleichungen kann man sich auf die x - und die z -Richtung beschränken. Die Zeichnung deutet an, daß die Grenzflächen fest/flüssig schräg in der Siliciumschicht liegen.

5.1.1 Randbedingungen und Vereinfachungen

Der Laserstrahl hat nach Abschnitt 4.1 an der Substratoberfläche eine Gauß-Breite $W \approx 460 \mu\text{m}$ in y -Richtung und eine Höhe $H \approx 12 \mu\text{m}$ in x -Richtung. Da $H \ll W$ ist, ist die Änderung der Laserenergiedichte $\partial I/\partial y$ in y -Richtung klein gegen die Änderung $\partial I/\partial x$ in x -Richtung. Die Energiedichte in den Rechnungen wird deshalb zur Vereinfachung in y -Richtung konstant gesetzt. Der aufgeschmolzene Bereich ist dann nicht mehr wie in Abb. 4.1 elliptisch, sondern rechteckig mit den Kantenlängen h und w , wie Abb. 5.1 illustriert. Wegen dieser Vereinfachung genügt es, die Differentialgleichungen zweidimensional in x - und z -Richtung zu lösen. Die Gleichung der Wärmeleitung (5.1) wird dann zu

$$\frac{\partial T(x, z, t)}{\partial t} = \frac{1}{c_p(T) \rho(T)} [\text{div}(\lambda(T) \text{grad} T(x, z, t)) + \alpha(T) I(x, z, t)]. \quad (5.2)$$

Zur Lösung der Gl. (5.2) müssen die Randbedingungen definiert werden. Die Wärmeleitfähigkeit $\lambda_{Luft} \approx 0.08 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ von Luft bei $T = 1300 \text{ K}$ ist nach Abb. A.1 selbst gegenüber der niedrigsten Wärmeleitfähigkeit $\lambda_{Si} \approx 21 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ von Silicium bei $T = 1687 \text{ K}$ klein. Deswegen gilt als Randbedingung an der Grenzfläche Luft/Silicium

$$\left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{Luft/Si} = 0. \quad (5.3)$$

Die Wärmemenge ΔQ , die von der Siliciumschicht absorbiert wird, diffundiert in das Glassubstrat, das mit Dicken zwischen einem und zwei Millimetern um vier Größenordnungen dicker ist als die Siliciumschicht. Deshalb kann man die Temperaturerhöhung an der Rückseite des Glases vernachlässigen und

$$T|_{Glas/Luft} = T_{Raum}, \quad (5.4)$$

mit der Raumtemperatur $T_{Raum} = 300$ K, setzen.

An der Grenzfläche Silicium/Glas ist die Wärmemenge, die aus der Siliciumschicht austritt, gleich der Wärme, die in das Glas eintritt. Folglich muß dort

$$\frac{\frac{\partial T}{\partial z}\Big|_{Glas}}{\frac{\partial T}{\partial z}\Big|_{Si}} = \frac{\lambda_{Si}}{\lambda_{Glas}} \quad (5.5)$$

erfüllt sein. Für die Grenzflächen Si/SiN und SiN/Glas setzt man die entsprechenden Wärmeleitfähigkeiten ein.

5.1.2 Analytische Lösung

Gleichung (5.2) läßt sich unter Berücksichtigung einiger Näherungen analytisch lösen. Für $t \gg \tau_{Puls}$ kann man den Quellterm $I\alpha$ vernachlässigen. Nimmt man zusätzlich konstante Materialparameter λ und c_p an, dann wird Gl. (5.2) zu

$$\frac{\partial T(x, z, t)}{\partial t} = D_T \Delta T(x, z, t), \quad \text{mit} \quad D_T = \frac{\lambda}{\rho c_p}. \quad (5.6)$$

Diese Gleichung ist eine Diffusionsgleichung für die Temperatur mit der Diffusionskonstanten D_T . Mit Hilfe der Greenschen Funktion der Wärmeleitung [69]

$$G(x, z, t) = \frac{1}{4\pi D_T t} e^{-\frac{(x-x')^2 + (z-z')^2}{4D_T t}} \quad (5.7)$$

berechnet sich die Temperatur

$$T(x, z, t) = \frac{1}{4\pi D_T t} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} T(x', z', 0) e^{-\frac{(x-x')^2 + (z-z')^2}{4D_T t}} dx' dz' \quad (5.8)$$

am Ort (x, z) zur Zeit t aus der Anfangstemperaturverteilung $T(x', z', 0)$ zum Zeitpunkt $t = 0$. Im folgenden wird $T(x, z, t)$ für zwei verschiedene Spezialfälle berechnet. Befindet

sich die gesamte Wärmeenergie zur Zeit $t = 0$ in der Linie $x' = 0, z' = 0$, so ist $T(x', z', 0) = T_0 \delta(x')\delta(z')$. Zur Vereinfachung wird nur die Diffusion im Glas berücksichtigt und $c_p = c_p^{Glas}$ gesetzt. Einsetzen in Gl. (5.8) liefert

$$\begin{aligned} T(x, z, t) &= \frac{1}{4\pi D_T t} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} T_0 \delta(x') \delta(z') e^{-\frac{(x-x')^2+(z-z')^2}{4D_T t}} dx' dz' \\ &= T_{Raum} + \frac{T_0}{4\pi D_T t} e^{-\frac{x^2+z^2}{4D_T t}} \end{aligned} \quad (5.9)$$

mit der Umgebungstemperatur T_{Raum} . Man erhält Gauß-förmige Temperaturverteilungen in x- und z-Richtung, deren Breite $w_{x,z} = \sqrt{4D_T t}$ mit der Zeit zunimmt. Da die Gesamtenergie konstant bleibt, nimmt die Temperatur im Maximum mit $T(0, 0, t) - T_{Raum} \propto t^{-1}$ ab.

Eine anderer analytisch zu lösender Grenzfall liegt vor, wenn sich die gesamte Wärmeenergie zur Zeit $t = 0$ in einer sehr dünnen, unendlich breiten Oberflächenschicht mit $z' \approx 0$ befindet. Dies ist gleichbedeutend mit einer eindimensionalen Wärmeleitung in z-Richtung, da die Temperatur parallel zur Oberfläche (in x-Richtung) konstant ist. Mit $T(z', 0) = T_0 \delta(z')$ erhält man aus Gl. (5.8)

$$T(z, t) = T_{Raum} + \frac{T_0}{\sqrt{4\pi D_T t}} e^{-\frac{z^2}{4D_T t}}. \quad (5.10)$$

In z-Richtung stellt sich wieder eine Gauß-Verteilung ein, die sich mit $w_z = \sqrt{4D_T t}$ in das Glassubstrat ausbreitet. Durch die eindimensionale Wärmeleitung wird die Energie langsamer abgeführt als im zweidimensionalen Fall der Gl. (5.9). Deshalb fällt hier die Temperatur an der Oberfläche mit $T(0, t) - T_{Raum} \propto t^{-1/2}$ ab.

5.1.3 Numerische Simulation

5.1.3.1 Zelldimensionen

Zur numerischen Simulation der zeitlichen Temperaturverteilung dient die Methode der finiten Differenzen. Hierzu wird das zu modellierende Gebiet in Zellen mit den Kantenlängen Δx und Δz unterteilt, deren Temperatur durch diskretisierte Gleichungen, wie in Anhang B beschrieben, berechnet wird. Die Geometrie der Experimente bestimmt die Größe der Zellen in x- und z-Richtung, also die örtliche Diskretisierung des Rechengebietes. In z-Richtung wird Δz so gewählt, daß 20 Zellen innerhalb der Siliciumschicht liegen,

um die durch die Absorption der Laserpulse verursachten großen Temperaturgradienten mit genügender Genauigkeit zu berücksichtigen. Für die in die Simulationen einbezogenen Schichtdicken $d = 50 \dots 300$ nm ist somit $\Delta z = 2.5 \dots 15$ nm. Da der Laserstrahl in x-Richtung die Gauß-Breite $H \approx 12 \mu\text{m}$ hat, sind die Temperaturgradienten kleiner als in z-Richtung, in der der Strahl nur innerhalb der Schichtdicke von maximal 300 nm absorbiert wird. Vergleichende Simulationen mit unterschiedlicher Auflösung des Rechengitters in x-Richtung zeigen, daß eine Zellbreite von $\Delta x = 500 \mu\text{m}$ eine ausreichende Genauigkeit der Simulation gewährleistet. Der Zeitschritt Δt zwischen zwei aufeinanderfolgenden Berechnungen der Temperaturverteilung ist nicht beliebig groß wählbar. Im vorliegenden Fall mit $\Delta z \ll \Delta x$ muß die Beziehung

$$\frac{\lambda}{c_p \rho} \frac{\Delta t}{\Delta z^2} \leq \frac{1}{2} \quad (5.11)$$

erfüllt sein, damit die Simulationen numerisch stabil sind [70]. Auflösen nach Δt und Einsetzen der temperaturabhängigen Parameter liefert die Obergrenze

$$\Delta t_{max} = 5.2 \cdot 10^{-6} \frac{\text{ns}}{\text{nm}^2} \Delta z^2, \quad (5.12)$$

die für die Simulationen bei einer vorgegebenen Zellgröße Δz verwendet werden darf. Bei der für eine Schichtdicke von $d = 50$ nm verwendeten Zellgröße $\Delta z = 2.5$ nm erhält man so $\Delta t_{max} = 3.25 \times 10^{-5}$ ns.

Die Abmessungen X und Z des in den Simulationen zu berücksichtigenden Gebietes bestimmt die Gesamtzahl der Zellen und damit die Zahl der Rechenschritte. Das Array muß aber groß genug gewählt werden, um die Randbedingung (5.4) zu rechtfertigen. Für Kurzzeitsimulationen bis zu $t = 500$ ns wird $X = 50 \mu\text{m}$ und $Z = 1 \mu\text{m}$ benutzt. Langzeitsimulationen bis zu $t = 50 \mu\text{s}$ erfordern ein größeres Array mit den Abmessungen $X = 800 \mu\text{m}$ und $Z = 30 \mu\text{m}$, da die Wärmeenergie in lateraler und vertikaler Richtung weiter diffundiert.

5.1.3.2 Materialdaten

Die Wärmeleitfähigkeiten λ sowie die spezifischen Wärmekapazitäten c_p von Glas und Silicium sind stark temperaturabhängig, wie Abb. A.1 zeigt. Um den Rechenaufwand der Simulationen gering zu halten, werden sie durch Polynome möglichst niedriger Ordnung der Tab. A.1 und Abb. A.1 angenähert.

5.1.3.3 Laserpuls

Die Zeitabhängigkeit der experimentell ermittelten Laserleistung aus Abb. 5.7b wird durch eine Gaußfunktion mit der Breite τ angenähert. Damit ergibt sich für die Intensität des Laserpulses

$$I(x, y, t) = I_0 e^{-8(x^2/H^2 + y^2/W^2 + t^2/\tau^2)}. \quad (5.13)$$

Wie in Abschnitt 4.1 sind W und H die Gauss-Breiten des Strahlquerschnitts an der Probenoberfläche und durch einen Intensitätsabfall auf $I(\pm H/2, 0, 0) = I(0, \pm W/2, 0) = I_0/e^2$ definiert.

5.1.3.4 Absorptionskoeffizient

Der Quellterm αI aus Gl. (5.2) beschreibt die pro Zeiteinheit Δt jedem Volumenelement $\Delta x \Delta y \Delta z$ der Siliciumschicht zugeführte Laserenergie. Die Intensität der Laserstrahlung fällt in einer dicken Schicht nach dem Lambert-Beerschen Gesetz exponentiell ab. Nach Abschnitt 2.2.3 führen jedoch insbesondere bei dünnen Schichten Reflexionen des Laserlichtes an den Grenzflächen zu einer Erhöhung der Absorption. Wegen der Reflexionen kommt es in der Schicht zu Überlagerungen der Teilstrahlen und das Lambert-Beersche Gesetz für die Intensitätsverteilung des Lichtes gilt nicht mehr. Um den Rechenaufwand zu verringern, wird in den Simulationen nicht die tatsächliche Intensitätsverteilung durch die Mehrfachreflexionen berücksichtigt. Stattdessen wird durch Gl. (2.8) die von der gesamten Schicht absorbierte Intensität I_A bestimmt. Daraus erhält man über die Beziehung

$$I_A(T) = I_0(1 - e^{-\alpha'(T)d}) \quad (5.14)$$

die effektive Absorptionskonstante α' . Setzt man diese in das Lambert-Beersche Gesetz (2.3) ein, so wird von der Schicht der Dicke d die gleiche Leistung absorbiert wie bei Berücksichtigung der Reflexionen an den Grenzflächen. Die Leistung, die von einem Volumenelement in der Tiefe z absorbiert wird, ist aber jetzt durch $I_0 \alpha' e^{-\alpha'z}$ gegeben und nicht durch exakte Energieverteilung unter Berücksichtigung der Vielfachreflexionen. Wegen der großen Temperaturgradienten in der Schicht stellt sich aber durch Wärmediffusion sehr schnell die gleiche Temperaturverteilung ein. Die Temperaturabhängigkeit von α aus Gl. (2.6) geht über Gl. (2.8) in $I_A(T)$ und somit in $\alpha'(T)$ ein. Abbildung 5.2 vergleicht für verschiedene Schichtdicken die temperaturabhängige, in der Siliciumschicht absorbierte

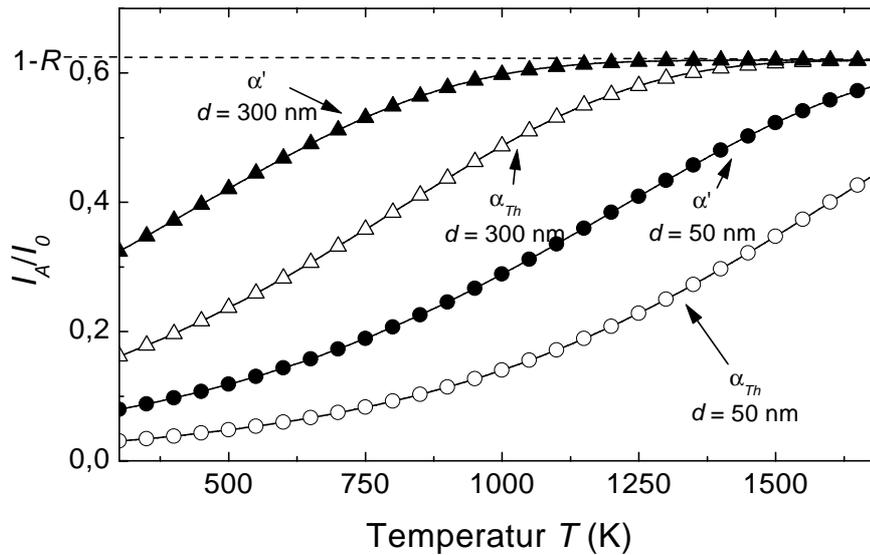


Abbildung 5.2: Verhältnis der in der Schicht absorbierten Intensität I_A und der Intensität I_0 des Laserstrahls mit $\lambda = 532$ nm für Schichten mit $d = 50$ nm und 300 nm als Funktion der Temperatur T . Die absorbierten Intensitäten I_A sind nach dem Lambert-Beerschen Gesetz mit α_{Th} nach Gl. (2.6) sowie der effektiven Absorption α' aus Gl. (5.14) berechnet. Wegen der Reflexion an der Oberfläche erreicht I_A/I_0 maximal den Wert $(1 - R)$

Intensität I_A unter Verwendung der effektiven Absorptionskonstante bzw. den Literaturdaten der temperaturabhängigen Absorptionskonstanten.

5.1.3.5 Phasenübergang

Wie bereits zu Beginn des Abschnitts 5.1 erwähnt, dient bei der Simulation als Kriterium für das Aufschmelzen und Kristallisieren eine Über- bzw. Unterschreitung von vorgegebenen Temperaturen. Bei der Wahl dieser Temperaturen muß berücksichtigt werden, daß nach Anhang A die Schmelzenthalpie ΔH als Gauß-Funktion, deren Maximum bei der Schmelztemperatur $T_m = 1687$ K liegt [71], zur spezifischen Wärme c_p addiert wird. Bei einem Temperaturanstieg über T_m hinaus ist die latente Wärme dem Silicium erst dann vollständig zugeführt, wenn die Gauß-Funktion abgeklungen ist. Als Kriterium hierfür wird die Breite $\Delta T = 14$ K der Gauß-Kurve benutzt, bei der sie auf $1/e^2$ abgefallen ist. Bei der Temperatur $T_m + \Delta T$ erfolgt also in den numerischen Simulationen der Phasenübergang, ab dem die Materialdaten des flüssigen Siliciums verwendet werden. Analog erfolgt bei $T_m - \Delta T$ die Kristallisation.

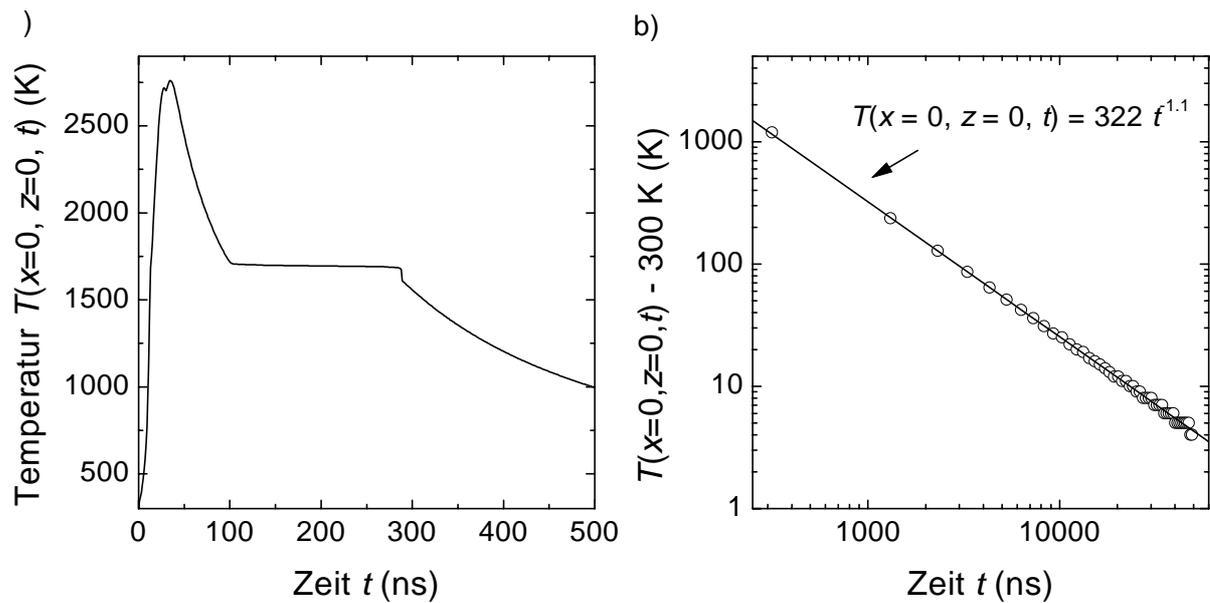


Abbildung 5.3: a) Zeitlicher Verlauf der Temperatur $T(x = 0, z = 0, t)$ an der Substratoberfläche einer 300 nm dicken Probe im Zentrum eines einzelnen Laserpulses mit $E = 21 \mu\text{J}$. Während der Rekristallisation hält die frei werdende Kristallisationswärme die Temperatur ca. 180 ns nahezu konstant. Nach der vollständigen Kristallisation fällt die Temperatur wieder schnell ab. b) Die doppeltlogarithmische Auftragung des Temperaturverlaufs zeigt, daß die Temperatur $T(x = 0, z = 0, t)$ für $t > 300$ ns proportional zu $t^{-1.1}$ abfällt.

5.2 Simulationsergebnisse

5.2.1 Zeitliche und räumliche Temperaturentwicklung

In diesem Abschnitt wird der Temperaturverlauf nach Abklingen des Laserpulses untersucht. Die räumliche und zeitliche Entwicklung der Temperaturverteilung nach einem einzelnen Laserpuls wird benötigt, um die Temperaturerhöhung der Siliciumschicht sowie des Glases durch die Vielzahl von Pulsen während des SLS-Prozesses zu berechnen.

5.2.1.1 Einzelpuls

Abbildung 5.3a zeigt den typischen Temperaturverlauf an der Oberfläche ($z = 0$) der Siliciumschicht im Zentrum ($x = 0$) eines Laserpulses, dessen Energie $E = 21 \mu\text{J}$ ausreicht, um das Silicium mit der Schichtdicke $d = 300$ nm vollständig zu schmelzen. Durch die Absorption des Laserlichtes steigt die Temperatur sehr schnell an und erreicht im Falle der

dargestellten 300 nm dicken Schicht bei einer Pulsenergie von $E = 21 \mu\text{J}$ nach $t = 34 \text{ ns}$ ihr Maximum. Danach fällt sie ab, bis das geschmolzene Silicium zu kristallisieren beginnt. Durch die dabei frei werdende latente Wärme wird die Abkühlung stark verlangsamt. Die Temperatur der Siliciumschicht bleibt bis zur vollständigen Kristallisation für das Zeitintervall $\Delta t \approx 180 \text{ ns}$ nahezu konstant. Danach fällt die Temperatur wieder sehr schnell ab. Da der Laserpuls zu dieser Zeit bereits abgeklungen ist, wird schnell eine Temperatur erreicht, unterhalb der die Materialparameter konstant sind bzw. in erster Näherung durch lineare Funktionen angenähert werden können. In diesem Bereich ist die Wärmeleitungsgleichung (5.1), wie in Abschnitt 5.1.2 gezeigt, analytisch lösbar. Die Auftragung von $\log[(T(0, 0, t) - 300 \text{ K})/\text{K}]$ über $\log(t/\text{ns})$ im Bereich $t = 0.3 \dots 50 \mu\text{s}$ ergibt die in Abb. 5.3b dargestellte Gerade. Eine Anpassung ergibt den Temperaturverlauf

$$T(x = 0, z = 0, t) - 300\text{K} = B_t t^{-1.1}. \quad (5.15)$$

Die Konstante B_t ist dabei von der Schichtdicke abhängig. Der Exponent in Gl. (5.15) ist von der Schichtdicke unabhängig. Er ist mit einem Wert von -1.1 vergleichbar mit dem Wert -1, den der Exponent der Zeit bei der analytischen Lösung im zweidimensionalen Fall nach Gl.(5.9) annimmt. Folglich erfolgt die Diffusion der Wärmeenergie sowohl in Richtung des Glases als auch lateral. Wegen der Temperaturabhängigkeit der thermodynamischen Materialdaten weicht der Exponent etwas vom theoretischen Wert -1.1 ab.

Der räumliche Temperaturverlauf entlang der Oberfläche sowie in Richtung des Glassubstrates ist in Abb. 5.4a bzw. b für verschiedene Zeiten t dargestellt. Nach der Kristallisation ist die Temperaturverteilung

$$T(x, z = 0, t) = T(x = 0, z = 0, t) e^{-8 \left(\frac{x}{W_{Tx}}\right)^2} \quad (5.16)$$

$$T(x = 0, z, t) = (T(x = 0, z = 0, t) e^{-8 \left(\frac{z}{W_{Tz}}\right)^2}) \quad (5.17)$$

in beiden Richtungen Gauß-förmig. Die Gauß-Breiten W_{Tx} und W_{Tz} sind in Übereinstimmung mit Gl. 5.13 durch einen Abfall auf $1/e^2$ definiert. Aufgrund der wesentlich höheren Wärmeleitfähigkeit von Silicium diffundiert die Wärme deutlich schneller in x-Richtung, d.h. in der Siliciumschicht, als in das Glas. Der zeitliche Verlauf der Gaußschen Breiten W_{Tx} bzw. W_{Tz} der Temperaturverteilungen in x- und z-Richtung läßt sich, wie Abb. 5.5 zeigt, durch

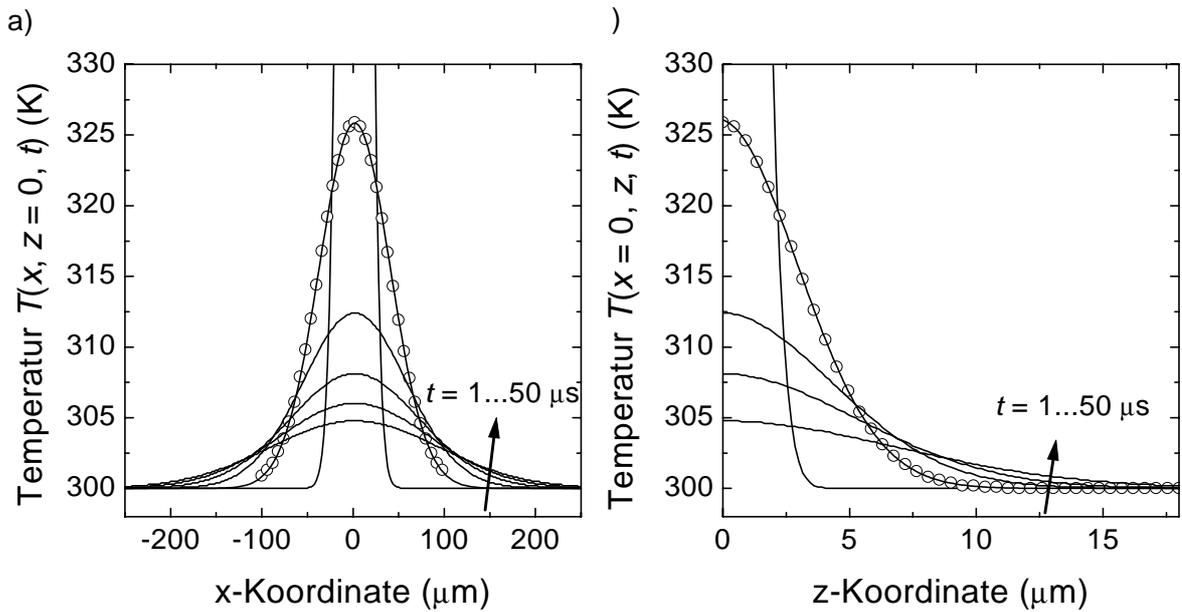


Abbildung 5.4: An die berechneten Temperaturprofile einer 300 nm dicken Schicht angepasste Gauß-Funktionen a) $T(x, z = 0, t)$ entlang der Oberfläche, bzw. b) $T(x = 0, z, t)$ im Glas, zu den Zeiten $t = 1, 10, 20, 30, 40, 50 \mu\text{s}$. Für $t = 10 \mu\text{s}$ sind zusätzlich die berechneten Temperaturen (offene Kreise) dargestellt.

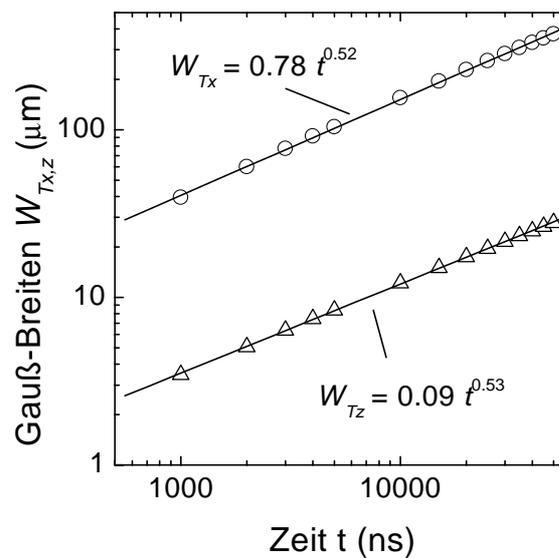


Abbildung 5.5: Gauß-Breiten W_{Tx} und W_{Tz} der Temperaturprofile einer 300 nm dicken Schicht als Funktion der Zeit.

Tabelle 5.1: Parameter B_t , B_x und n_x der Gln.(5.15) und (5.18) für verschiedene Schichtdicken d

Schichtdicke d (nm)	Fit Parameter		
	B_t (K ns ^{-1.1})	B_x ($\mu\text{m ns}^{-n_x}$)	n_x
50	1.5×10^5	1.48	0.57
150	3×10^5	1.12	0.55
200	4.2×10^5	1.08	0.55
300	6.6×10^5	0.78	0.52

$$W_{T_{x,z}} = B_{x,z} t^{n_{x,z}} \quad (5.18)$$

beschreiben.

Eine Anpassung von Geraden an die doppeltlogarithmische Auftragung der Abbn. 5.3 und 5.5 für die verschiedenen Schichtdicken liefert die Parameter B_t , B_x und n . Tabelle 5.1 zeigt, daß B_t und B_x stark von d abhängen und n nur eine schwache Abhängigkeit zeigt.

Die zeitliche Entwicklung des Temperaturprofils $T(x, z, t)$ nach der Kristallisation mit einem einzelnen Laserpuls erhält man durch Kombination der Gln. (5.16) und (5.17) und Einsetzen der Gln. (5.15) und(5.18) zu

$$T(x, z, t) = T_{Raum} + \frac{B_t}{t^{1.1}} e^{-8 \left[\left(\frac{x^2}{B_x t^{n_x}} \right)^2 + \left(\frac{z^2}{B_z t^{n_z}} \right)^2 \right]} \quad \text{für } t > 300 \text{ ns} \quad (5.19)$$

5.2.1.2 Wiederholter Laserbeschuß

Zur Beschreibung des Temperaturverhaltens während der Laserkristallisation reicht es nicht aus, einen einzelnen Laserpuls zu betrachten. Da die Temperatur nach Gl. (5.15) nach dem Laserpuls mit $T - T_{Raum} = \Delta T \propto t^{-1.1}$ abfällt, ist die Siliciumschicht zu Beginn des nächsten Laserpulses nicht auf die Umgebungstemperatur abgekühlt. Jeder um Δx verschobene Laserpuls erwärmt die Schicht zusätzlich, bis sich ein Gleichgewicht aus zugeführter Energie und durch Diffusion abgeleiteter Energie einstellt. In den Experimenten werden Laserrepetitionsraten $f = 20 \dots 100$ kHz, die Pulsabständen von $\Delta t = 50 \dots 10$

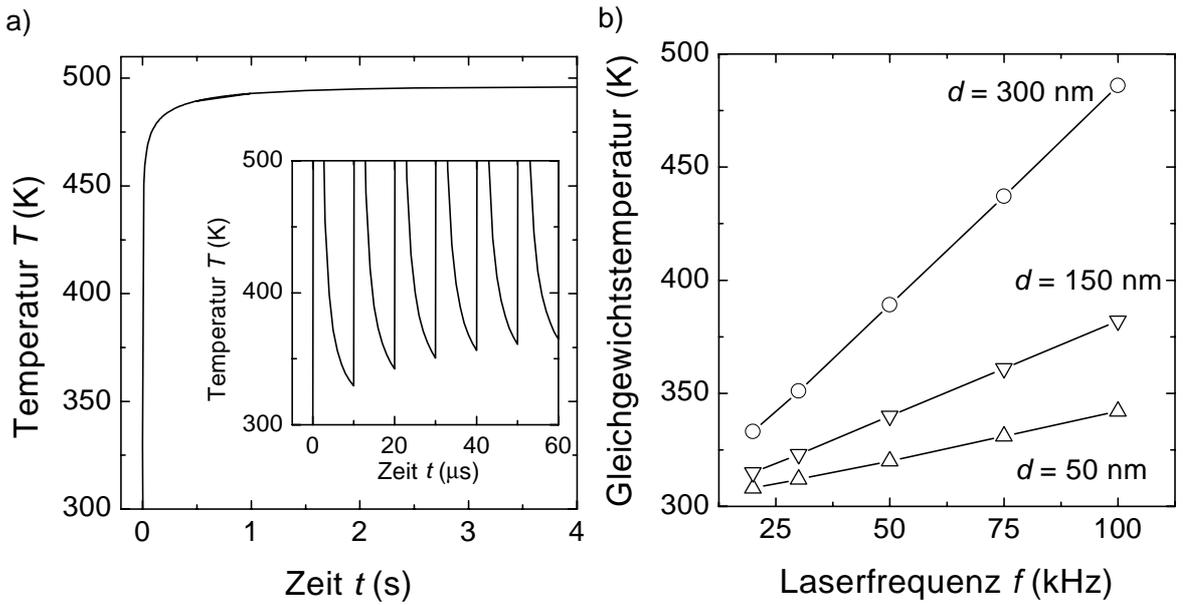


Abbildung 5.6: a) Temperaturverlauf bei wiederholtem Laserbeschuss. Dargestellt ist die Temperatur der Siliciumoberfläche zu Beginn eines jeden Laserpulses. Deswegen ist der Temperaturabfall nach den einzelnen Pulsen nicht zu sehen. Die eingefügte kleine Graphik zeigt den Temperaturverlauf während der ersten sechs Laserpulse. b) Gleichgewichtstemperatur für verschiedene Laserfrequenzen bei verschiedenen Siliciumdicken d .

μ s entsprechen, verwendet. Nach diesen Zeiten Δt gilt nach Abb. 5.3b bereits Gl. (5.15) und somit näherungsweise die lineare Wärmeleitungsgleichung (5.9). Das Temperaturprofil zum Zeitpunkt t kann deshalb durch Superposition der Temperaturprofile (5.19) der einzelnen Laserpulse, die bis zum Zeitpunkt t aufgetreten sind, angenähert werden. Man erhält somit

$$T(x, 0, t) = T_{Raum} + \sum_{k=0}^m \frac{B_t}{(t - t_k)^{1.1}} e^{-8 \left(\frac{x - x_k}{B_x (t - t_k)^n} \right)^2}, \quad \text{mit } m \Delta t \leq t < (m + 1) \Delta t \quad (5.20)$$

Dabei ist $t_k = k \Delta t$ der Zeitpunkt, an dem der k -te Laserpuls am Ort $x_k = k \Delta x$ auf das Silicium trifft. Der Verschiebetisch verschiebt das Substrat mit der Scangeschwindigkeit $v = \Delta x / \Delta t$. Um die Temperatur T_z im Zentrum eines jeden Laserpulses zu berechnen, setzt man in Gl. (5.20) $x = v t$ und erhält

$$T_z(t) = T_{Raum} + \sum_{k=0}^m \frac{B_t}{(t - k \Delta t)^{1.1}} e^{-8 \frac{v (t - k \Delta t)^{(2-2n)}}{B_x^2}}. \quad (5.21)$$

Wie Abb. 5.6a für eine 300 nm dicke Schicht zeigt, steigt die Temperatur zunächst

steil an und erreicht nach wenigen Sekunden die Maximaltemperatur T_{max} .

Dieser Grenzwert kommt dadurch zustande, daß die Breite der Temperaturprofile nach Gl. (5.18) näherungsweise mit \sqrt{t} zunimmt. Differenzieren und halbieren der Gl. (5.18) liefert die mit zunehmender Zeit immer langsamer werdende Diffusionsgeschwindigkeit

$$v_{Tx} \approx \frac{B_x}{2\sqrt{t}} \quad (5.22)$$

des Temperaturprofils. Eine Mikrosekunde nach dem Auftreffen eines Laserpuls auf eine 300 nm dicke Siliciumschicht ist die Geschwindigkeit z. B. $v_{Tx}(1\mu s) \approx 12$ m/s. Wegen der Abnahme der Geschwindigkeit ist die Temperaturfront nach einer Zeit

$$t > \left(\frac{B_x}{2v_{Scan}} \right)^2 \quad (5.23)$$

langsamer als das Substrat, das sich mit einer Scangeschwindigkeit v_{Scan} bewegt. Dies ist z. B. bei einer 300 nm dicken Schicht bei $v_{Scan} = 10$ mm/s nach $t \approx 1.5$ s der Fall.

Abbildung 5.6 zeigt die Schichtdickenabhängigkeit der Gleichgewichtstemperatur von der Schichtdicke d . Diese geht in Gl. (5.21) durch die Parameter B_t und B_x ein. Das Zeitintervall Δt ist antiproportional zur Frequenz f . Deswegen steigt die Gleichgewichtstemperatur mit Zunahme von f an.

5.2.2 Schmelz- und Kristallisationsdynamik

Dieser Abschnitt beschreibt das Verhalten der Siliciumschicht während des Laserpulses bzw. kurz nach dessen Abklingen. Zunächst wird das Aufschmelzen der Schicht untersucht und gezeigt, daß die Berücksichtigung von Mehrfachreflexionen nach Abschn. 2.2.3 für Schichtdicken unter 150 nm zwingend erforderlich ist. Danach wird der Einfluß der Schichtdicke auf die Geschwindigkeit der Kristallisationsfront untersucht.

5.2.2.1 Schmelzvorgang

Durch den Laserpuls erwärmt sich die Siliciumschicht sehr schnell. Abbildung 5.7a zeigt, wie, ausgehend von einer dünnen Schicht an der Oberfläche des Siliciums, im Zentrum des Laserpulses das kristalline Silicium flüssig wird. Im dargestellten Fall einer 300 nm dicken Siliciumschicht schmilzt bei einer Pulsenergie $E = 21 \mu\text{J}$ die Oberfläche nach 11 ns auf. Der geschmolzene Bereich breitet sich sehr schnell in lateraler Richtung aus, da

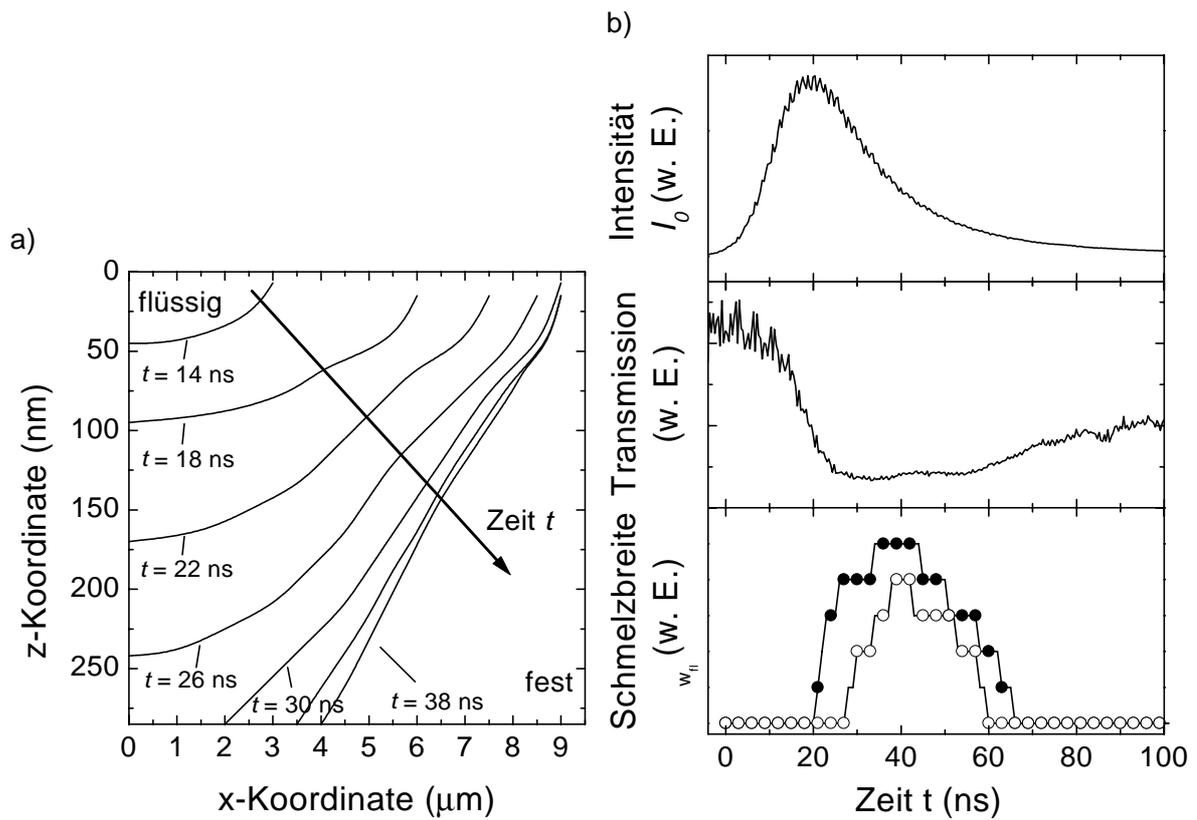


Abbildung 5.7: a) Lage der Grenzfläche flüssig/fest zu verschiedenen Zeiten t während des Aufschmelzens einer 300 nm dicken Siliciumschicht. b) Vergleich der gemessenen Laserintensität I_0 und Transmission der Silicium/Glasschicht mit dem simulierten Aufschmelzen einer 50 nm dicken Siliciumschicht. Die Transmission nimmt zunächst leicht ab, da die Absorption des Siliciums wegen der Temperaturerhöhung zunimmt. Sobald die Schicht beginnt aufzuschmelzen, steigt die Reflexion an und die Transmission nimmt ab. Für Zeiten $t > 70$ ns ist die Laserintensität zu klein, um die Transmission zuverlässig zu berechnen.

die Temperatur an der Oberfläche höher ist als im Substratinneren. Nach 29 ns erreicht das flüssige Silicium die Grenzfläche Silicium/Glas und breitet sich dort lateral aus, um nach 41 ns die größte Breite zu erreichen.

Das Aufschmelzen des Siliciums ist eine der wenigen experimentell beobachtbaren Vorgänge. Da sich durch den Phasenübergang die Reflexion sehr stark ändert, gelangt weniger Licht des Lasers, der zum Aufschmelzen benutzt wird, durch das Schichtsystem Silicium/Glas hindurch. Die Intensität des transmittierten Lichtes wird mit einer schnellen Photodiode (Hamatsu S5533) detektiert und mit einem Speicheroszilloskop (HP 54542 A)

aufgezeichnet. Abbildung 5.7b zeigt die sehr gute Übereinstimmung von Experiment und Simulation.

Zu Beginn des Laserpulses steigt die Temperatur des Siliciums und damit nach Gl. (2.6) auch die Absorption α an. Dies ist im leichten Abfall der Transmission in Abb. 5.7b zu Beginn des Pulses zu erkennen. Die Simulation zeigt, daß die Oberfläche der 50 nm dicken Siliciumschicht nach ca. 20 ns beginnt aufzuschmelzen. Wegen der erhöhten Reflektivität des flüssigen Siliciums fällt die gemessene Transmission zur gleichen Zeit stark ab, um nach 30 ns ihr Minimum zu erreichen. Zu diesem Zeitpunkt erreicht die Breite b_{fl} des geschmolzenen Siliciums ihre größte Ausdehnung. Nach 44 ns beginnt das Silicium an der Oberfläche zu kristallisieren, und die Breite des geschmolzenen Bereichs nimmt ab. Nach ca. 55 ns, wenn die Grenzfläche Silicium/Glas erstarrt ist, steigt die Transmission an. Sie erreicht in Abbildung 5.7b nicht wieder ihren Ausgangswert, da nach ca. 70 ns die Intensität des Laserpulses bereits so weit abgeklungen ist, daß sie in die Größenordnung der Detektionsschwelle der Photodiode kommt, und folglich die errechneten Transmissionswerte sehr ungenau werden.

5.2.2.2 Einfluß der Mehrfachreflexion

Größere Schichtdicken d benötigen eine größere Energie E , um von der Oberfläche her bis zur Grenzfläche Silicium/Glas aufgeschmolzen zu werden. Diese Energie erhält man in den Simulationen durch Variation der Pulsenergie bei verschiedenen Schichtdicken. Die Energie, die gerade ausreicht, um das Volumenelement in der Strahlmitte ($x = 0$) an der Grenzfläche ($z = d$) über die Schmelztemperatur zu erwärmen, wird im folgenden als Schmelzenergie E_{voll} bezeichnet. Experimentell ist diese Energie nur sehr schwer zu bestimmen. Hierzu wären z. B. Querschnitts-Transmissions-Elektronen-Mikroskopaufnahmen von mit einzelnen Laserpulsen bei verschiedenen Energien kristallisierten Bereichen geeignet. Einfacher, aber auch etwas ungenauer, ist der Vergleich von E_{voll} mit der Einsatzenergie E_{SLS} des superlateralen Wachstums aus Abb. 4.5. Letztere ist geringfügig höher als E_{voll} , da für den SLS-Prozeß die aufgeschmolzene Breite des Siliciums größer sein muß als der doppelte Abstand $2\Delta x = 1 \mu\text{m}$ zweier Laserpulse. Die hierzu nötige Energiedifferenz ist nach Abb. 4.3 ca. $E_{SLS} - E_{voll} \approx 1 \mu\text{J}$.

Abbildung 5.8 vergleicht die experimentell bestimmten Energie E_{SLS} mit den Werten

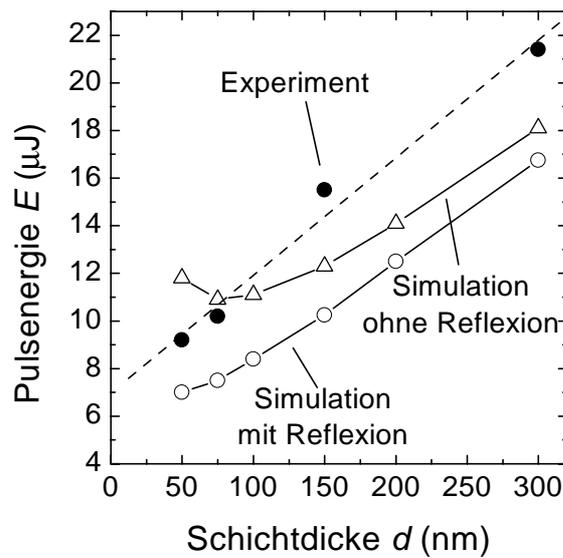


Abbildung 5.8: Vergleich der benötigten Energie, um eine Schicht der Dicke d gerade bis zur Grenzfläche Silicium/Glas aufzuschmelzen, mit der experimentell bestimmten Energieschwelle E_{SLS} des lateralen Wachstums.

von E_{voll} aus den Simulationen. Die Energie E_{voll} wurde dabei mit und ohne Berücksichtigung der inkohärenten Vielfachreflexionen in der Siliciumschicht bestimmt. Vielfachreflexionen führen für Schichtdicken $d \geq 150$ nm zu einer Absenkung der Energie E_{voll} um ca. $1.5 \mu\text{J}$ gegenüber dem ohne Reflexionen berechneten Wert. Die Steigung $\partial E_{voll}/\partial d$ ist in beiden Fällen etwa gleich groß. Bei Schichtdicken $d < 150$ nm wird die Abweichung größer und E_{voll} nimmt ohne Reflexionen für $d < 75$ nm sogar wieder zu, während sie mit Reflexion nur geringfügig abflacht. Der Anstieg bei sehr dünnen Schichten ist in den experimentellen Werten E_{SLS} nicht zu erkennen. Die an sie angepasste Gerade zeigt den nahezu konstanten Anstieg der Schmelzenergie mit der Schichtdicke. Ihre Steigung zeigt eine sehr gute Übereinstimmung von Experiment und Simulation mit Reflexionen, wenngleich die berechneten Werte um ca. $5 \mu\text{J}$ zu niedrig sind.

Die Abweichungen der Werte E_{SLS} von der Geraden deuten auf Interferenzeffekte hin, die nach Abbildung 2.2 die in der Schicht absorbierte Energie gegenüber dem Fall der inkohärenten Reflexion erhöhen oder erniedrigen können. Die Abweichungen in Abb. 5.8 sind allerdings nicht sehr groß, was die Näherung der inkohärenten Reflexion rechtfertigt. Erklären kann man dies durch die Oberflächenrauigkeit des Siliciums. Abbildung 5.9 zeigt Oberflächenprofile nach der Kristallisation mit einem einzigen Laserpuls bzw. nach

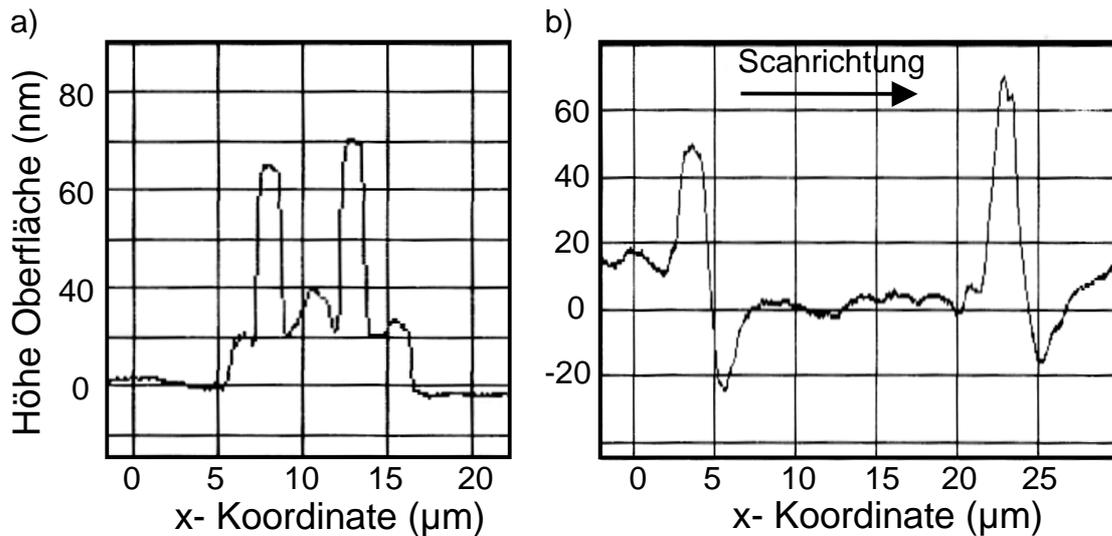


Abbildung 5.9: Oberflächenprofil nach a) einem einzelnen Laserpuls bzw. b) einem zweifach unterbrochenen Scan. Die Siliciumaufhäufungen eines einzelnen Laserpulses werden von den folgenden geglättet.

der Kristallisation mit dem SLS-Prozeß. Während des letzteren wurde der Laserstrahl von links nach rechts bewegt und dabei immer wieder für zehn Pulse unterbrochen. Während der Unterbrechungen wurde das Substrat um ca. $5 \mu\text{m}$ verschoben. Nach dem Einzelpuls in Abb. 5.9a sind zwei starke Erhebungen des Siliciums bis zu einer Höhe von $60 - 70 \text{ nm}$ über der Oberfläche vorhanden. Durch den SLS-Prozeß werden diese Erhebungen von den folgenden Pulsen wieder ausgeglichen, so daß die kristallisierte Schicht die deutlich glattere Oberfläche aus Abb. 5.9b aufweist. Der jeweils letzte Laserpuls hinterläßt aber jeweils die rechte der beiden Aufwerfungen auf der Schicht. Da während des Kristallisationsvorgangs die Translation $\Delta x = 0.5 \mu\text{m}$ zwischen zwei Pulsen kleiner ist als die Breite der Erhebungen trifft ein folgender Laserpuls stets auf einen Bereich mit sehr inhomogener Schichtdicke. Die Höhe der Dickenschwankungen liegen bei ca. 30% der Schichtdicke. Interferenzeffekte werden sich infolge dessen weitgehend herausmitteln.

Eine weitere Auffälligkeit in Abb. 5.8 ist, daß die experimentellen und simulierten Energien bei einer Extrapolation der Kurven zu $d = 0$ nicht durch den Ursprung gehen, sondern die Ordinate zwischen $E_{voll} = 6 \dots 8 \mu\text{J}$ schneiden. Dies ist die Energie, die aufgebracht werden muß, um eine infinitesimal dünne Siliciumschicht auf dem Glassubstrat aufzuschmelzen. Sie wird benötigt, um während des Heizens mit dem Laserpuls auch die

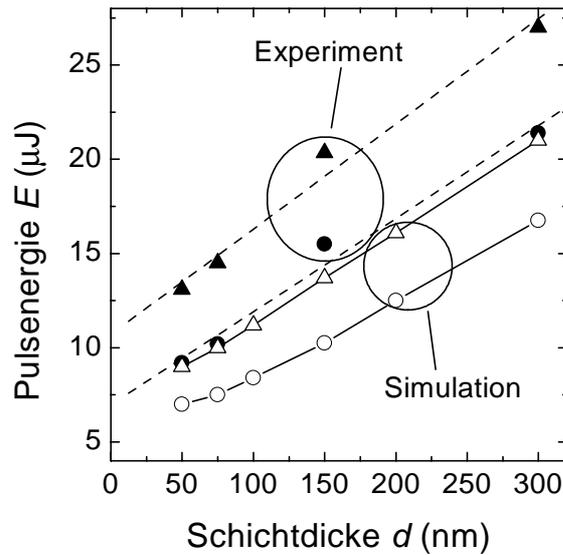


Abbildung 5.10: Vergleich der zur Laserkristallisation nutzbaren Pulsenergie in Experiment und Simulation. In den Experimenten muß die Pulsenergie E die Schwellenergie E_{SLS} (ausgefüllte Kreise) übersteigen. Für $E > E_{max}$ reißt die Siliciumschicht auf (ausgefüllte Dreiecke). In den Simulationen entspricht die untere Schwelle der Energie E_{voll} (unausgefüllte Kreise), während die Obergrenze (unausgefüllte Dreiecke) dem Erreichen der Siedetemperatur $T_{Siede} \approx 2700$ K entspricht.

Grenzfläche Silicium/Glas auf die Schmelztemperatur zu erwärmen. Da die Temperatur im Glas nicht sprunghaft ansteigen kann, muß die Energie $E_{voll}(d = 0)$ aufgebracht werden, um eine Schicht des Glases mit der Dicke der Eindringtiefe des Temperaturprofils aufzuwärmen.

5.2.2.3 Obergrenze der nutzbaren Pulsenergie

Wie in Abschnitt 4.2 erwähnt, gibt es bei den Experimenten eine Obergrenze E_{max} der Pulsenergie, ab der die Schicht beginnt aufzureissen. Die Größe E_{max} liegt, wie Abb. 5.10 zeigt, ca. $\Delta E = 4 \mu\text{J}$ über der Energie E_{SLS} , ab der der SLS -Prozeß einsetzt. Ein Vergleich mit den Simulationen ergibt, daß die maximale Temperatur des flüssigen Siliciums bei einer Pulsenergie $E = E_0 + \Delta E$ den Bereich des Siedepunktes $T_{Siede} \approx 2700$ K [14] des flüssigen Siliciums erreicht. Die Ursache für das experimentell beobachtete Aufreißen der Siliciumschichten liegt also in dem Beginn des Siedens der Schmelze.

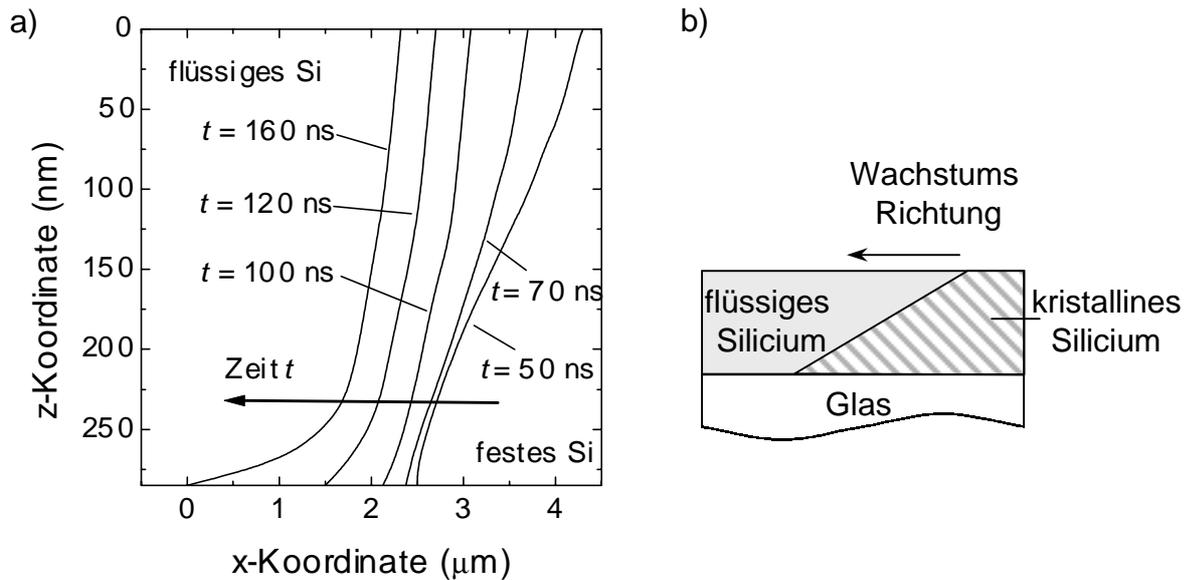


Abbildung 5.11: a) Kristallisationsfront einer 300 nm dicken Schicht während der Abkühlphase zu verschiedenen Zeiten t . b) Skizze der Lage der Grenzfläche flüssig/fest nach $t = 100$ ns im Probenquerschnitt.

5.2.2.4 Kristallisationsgeschwindigkeiten

Von dem Zeitpunkt an, ab dem die durch Wärmeleitung abgeführte Energie größer ist als die durch den Laser zugeführte, beginnt die Abkühlung des flüssigen Siliciums. Dadurch wird der Schmelzpunkt unterschritten und kristallines Wachstum verringert vom Rand her die Breite b_{fl} des flüssigen Streifens. Abbildung 5.11a zeigt die Kristallisationsfront einer 300 nm dicken Schicht, die mit einem Laserpuls mit $E = 21 \mu\text{J}$ beschossen wurde. An der Oberfläche beginnt sich die Front nach 46 ns in Richtung der flüssigen Phase zu bewegen, während an der Grenzfläche Silicium/Glas erst nach ca. 90 ns die Kristallisation beginnt. Wegen der unterschiedlichen Skalierung der Achsen in Abb. 5.11a liegt die Grenzfläche flacher, als es in der Abbildung erscheint. Abbildung 5.11b skizziert die tatsächliche Lage der Kristallisationsfront nach 100 ns im Probenquerschnitt. Die Kristallisationsfront liegt zu allen Zeiten t schräg in der Siliciumschicht und läuft an der Grenzfläche Silicium/Glas der Kristallisation der Oberfläche voraus.

Aus der Lage der Erstarrungsfront errechnet sich die Geschwindigkeit, mit der die Kristallisationsfront in die flüssige Phase voranschreitet. Wie Abbildung 5.12a zeigt, kann man die Breite b_{fl} des flüssigen Siliciums gut durch eine quadratische Gleichung annähern.

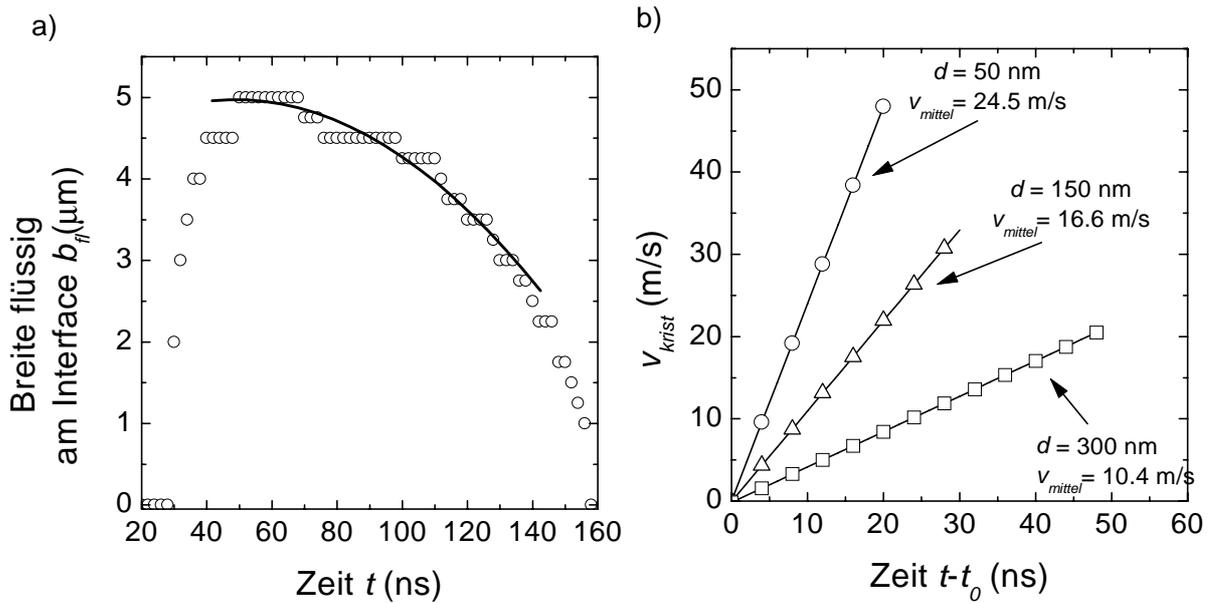


Abbildung 5.12: a) Breite b_{fl} des aufgeschmolzenen Bereichs einer 300 nm dicken Schicht an der Grenzfläche Silicium/Glas. Zu Beginn der Kristallisation läßt sich die Breite gut durch ein Polynom 2. Grades anpassen. b) Aus den angepassten Polynomen berechnete Kristallisationsgeschwindigkeiten v_{krist} , aufgetragen über die Zeitdifferenz $t - t_0$. Zur Zeit t_0 beginnt das kristalline Wachstum. Während der ersten $0.5 \mu\text{m}$ besitzen die Kristallisationsfronten die mittlere Geschwindigkeit v_{mittel} .

Durch Differenzieren von b_{fl} erhält man die Kristallisationsgeschwindigkeiten v_{krist} der Abb. 5.12b für Schichten mit einer Dicke $d = 50, 150, 300$ nm sowie die mittleren Kristallisationsgeschwindigkeiten v_{mittel} . Die Werte v_{mittel} sind die gemittelten Werte von v_{krist} während dem Voranschreiten der Kristallisationsfront auf den ersten $0.5 \mu\text{m}$. Die Mittelung wird auf die Strecke $\Delta x = 0.5 \mu\text{m}$ beschränkt, da durch den folgenden um Δx verschobenen Laserpuls der über Δx hinaus gewachsene Teil der Körner wieder aufgeschmolzen wird. Für den SLS-Prozeß spielt also das Wachstum auf den ersten $0.5 \mu\text{m}$ die entscheidende Rolle.

Die Geschwindigkeit v_{krist} steigt wegen der Näherung von b_{fl} durch eine quadratische Gleichung linear mit der Zeit an und nimmt mit einer Abnahme der Schichtdicke d stark zu. Da in den Simulationen die Physik des kristallinen Wachstums nicht berücksichtigt wird, entsprechen die Werte von v_{krist} eventuell nicht den realen Werten, aber die Größenordnung und die qualitativen Abhängigkeiten sind richtig.

Kapitel 6

Strukturuntersuchung und Wachstumsmechanismen

Zur Untersuchung der Struktur des laserkristallisierten Siliciums dienen Transmissions-elektronenmikroskop- (TEM) Aufnahmen. Mit ihnen lassen sich die Korngrößen des polykristallinen Siliciums sowie die Defektstruktur analysieren. Zur Bestimmung der Orientierung der Körner dient die Elektronen-Rückstreu-Diffraktometrie (EBSD = Electron Back Scattering Diffraction). Bei der Bezeichnung von Korngrenzen wird im folgenden zwischen zwei Hauptgruppen unterschieden. Während Kleinwinkelkorngrenzen aus einem Versetzungsnetzwerk bestehen [72], werden Großwinkelkorngrenzen durch die Fehlorientierung der benachbarten Körner beschrieben. Falls die benachbarten Körner der Großwinkelkorngrenzen ein Koinzidenzgitter besitzen, werden sie als Koinzidenzkorngrenzen bezeichnet [73]. Zur Bezeichnung dieser wird der charakteristische Σ -Parameter benutzt.

6.1 Struktur des polykristallinen Siliciums

Abbildung 6.1 zeigt typische TEM-Aufnahmen¹ von Schichten mit verschiedener Dicke. Man sieht in allen Aufnahmen lange Siliciumkristalle, die von Korngrenzen parallel zur Scanrichtung unterbrochen sind. Die dunklen, gebogenen Linien in den Aufnahmen werden von Verspannungen der Siliciumschicht hervorgerufen, die durch die Probenpräparation,

¹Alle hier vorgestellten TEM- Untersuchungen erfolgten in enger Kooperation mit Melanie Nerdling am Lehrstuhl für Mikrocharakterisierung der Universität Erlangen-Nürnberg. Für die hervorragende Zusammenarbeit und viele aufschlußreiche Diskussionen bedanke ich mich herzlich.

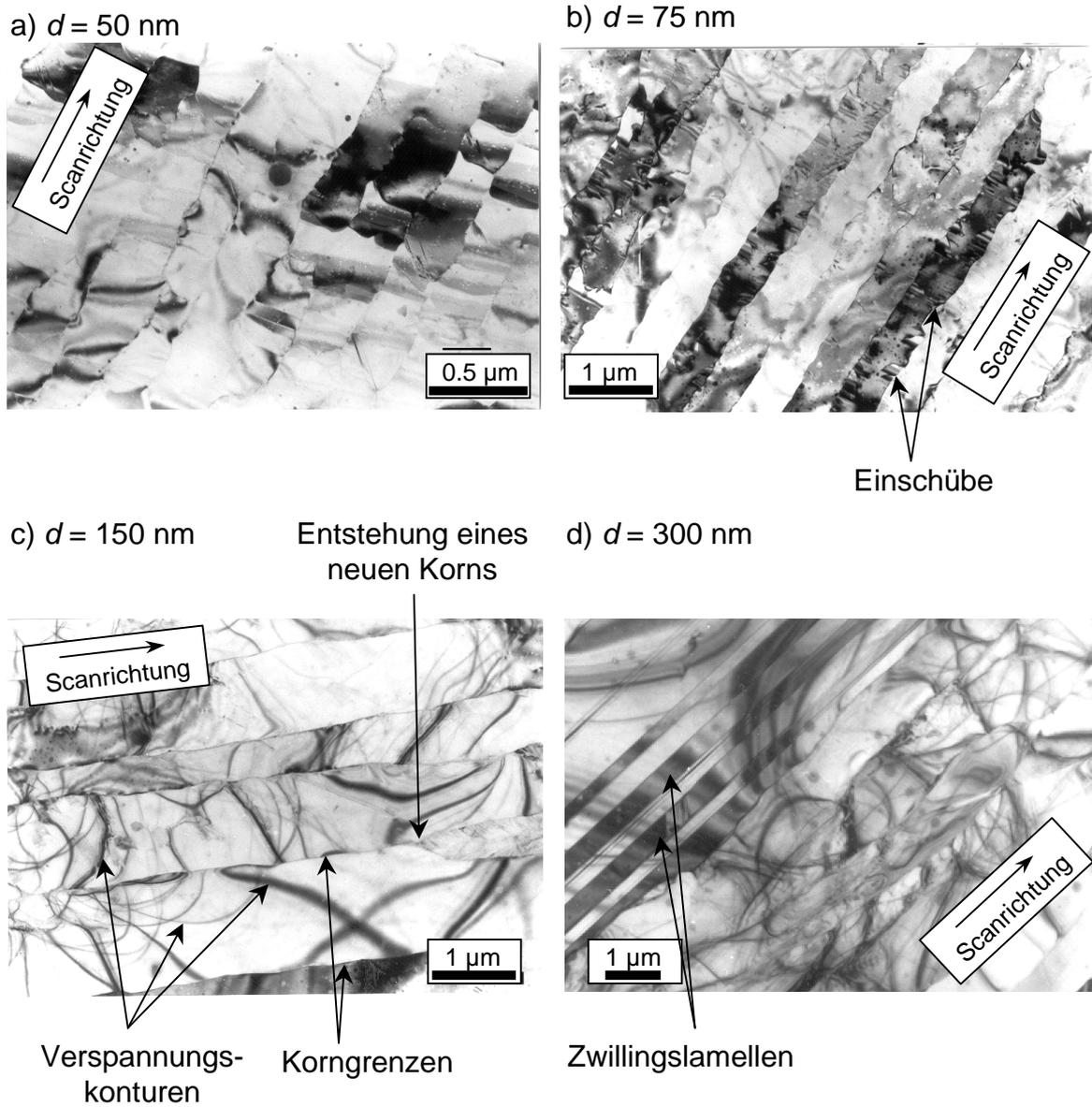


Abbildung 6.1: TEM-Aufnahmen von kristallisierten Siliciumschichten auf Glas mit verschiedener Schichtdicke d : a) $d = 50 \text{ nm}$, b) $d = 75 \text{ nm}$, c) $d = 150 \text{ nm}$, d) $d = 300 \text{ nm}$.

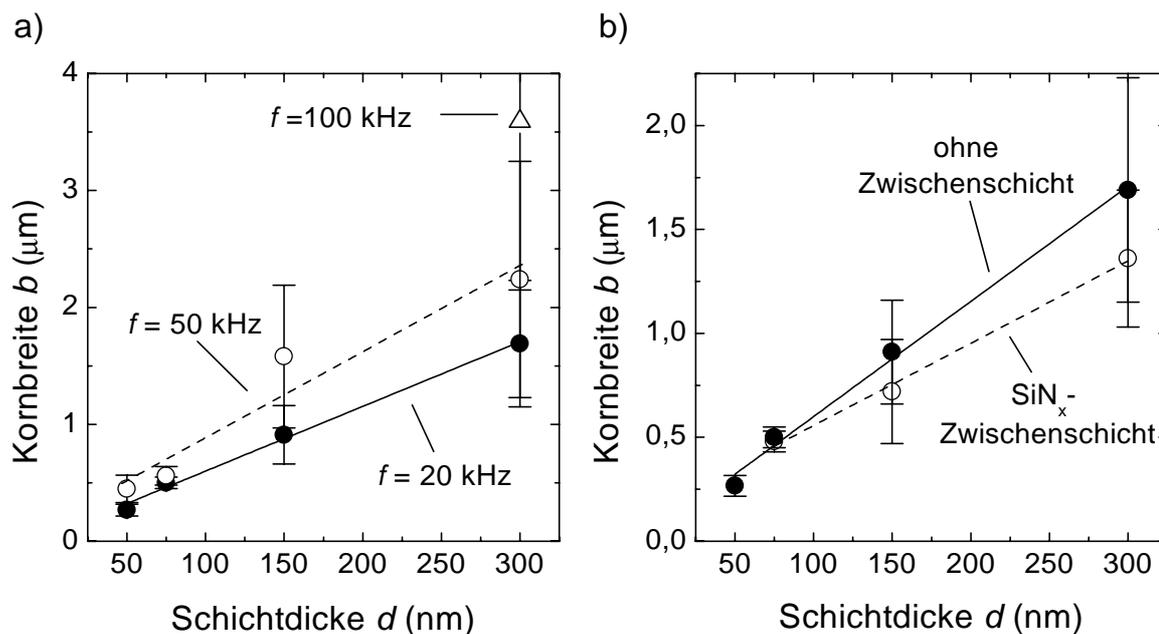


Abbildung 6.2: a) Kornbreite laserkristallisierter Siliciumschichten auf Glas in Abhängigkeit von der Siliciumschichtdicke. Eine Erhöhung der Repetitionsfrequenz f des Lasers verbreitert die Körner. b) Kristallisation mit $f = 20 \text{ kHz}$. Eine 200 nm dicke Siliciumnitridschicht zwischen Silicium und Glas reduziert die Kornbreite.

bzw. durch die Laserkristallisation in der Siliciumschicht entstehen.

In den Aufnahmen der Abbildung 6.1 sieht man deutliche Unterschiede der typischen Kornstrukturen bei den verschiedenen Schichtdicken. Die Korngrenzen der dicken Schichten mit $d = 150$ und 300 nm sind sehr gerade, während sie bei den dünnen Schichten mit $d = 50$ und 75 nm ausgefranst sind. In der TEM-Aufnahme in Abb. 6.1b sieht man z.B. sehr viele Einschübe von kleinen Körnern anderer Orientierung, die senkrecht zur Scanrichtung an den Rändern der durchgehenden Körner liegen. Bei Schichten mit Dicken $d \geq 150 \text{ nm}$ treten diese Einschübe nicht mehr auf. Schichten der Dicke $d = 300 \text{ nm}$ neigen zur Ausbildung von Zwillingslamellen parallel zur Scanrichtung, wie Abb. 6.1d zeigt. Diese Lamellen treten auch bei Siliciumschichten mit Dicken $d \geq 150 \text{ nm}$ auf einer SiN_x-Zwischenschicht auf.

Die Auswertung des Abstands der Korngrenzen von ca. $30\text{-}50 \text{ Körnern}^2$ liefert die mittlere Kornbreite b . Abbildung 6.2a zeigt für konstante Frequenzen f einen linearen

²Für die Auswertungen der Kornbreiten danke ich erneut Melanie Nerdling vom Lehrstuhl für Mikrocharacterisierung der Universität Erlangen-Nürnberg

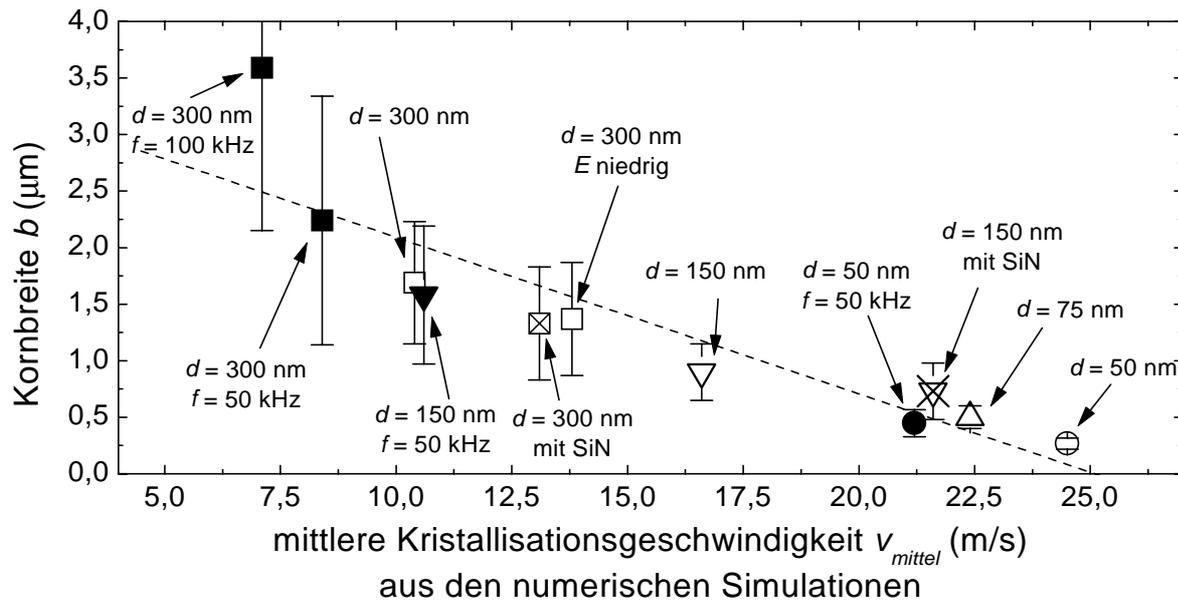


Abbildung 6.3: Die in TEM-Aufnahmen bestimmte Kornbreite b nimmt mit Zunahme der, in den numerischen Simulationen ermittelten, mittleren Kristallisationsgeschwindigkeit v_{mittel} ab. Wenn bei den Parameterangaben die Energie E weggelassen ist, entspricht E der jeweiligen Obergrenze gemäß Abb. 4.5. Bei der Angabe „ E niedrig“ liegt die Energie E etwa 20 % unter der Obergrenze. Bei Fehlen einer Frequenzangabe wurden die Schichten mit $f = 20$ kHz kristallisiert.

Anstieg der Kornbreite bei einer Zunahme der Schichtdicke von $d = 50$ nm auf $d = 300$ nm. Die Kristallisation mit höheren Frequenzen resultiert ebenso in einer Verbreiterung der Körner. Zusätzlich wird die Steigung der Kornbreite als Funktion der Schichtdicke steiler. Eine Siliciumnitrid-Zwischenschicht reduziert die Kornbreite b , wie Abb. 6.2b zeigt.

Da in den numerischen Simulationen die Kristallisationsdynamik nicht enthalten ist, erhält man auch keine Informationen über die Kristallstruktur und Faktoren, die sie beeinflussen. Abbildung 6.3 zeigt aber eine Korrelation der Kornbreite mit der in Abschn. 5.2.2.4 ermittelten mittleren Wachstumsgeschwindigkeit v_{mittel} . Mögliche Ursachen für diesen Zusammenhang werden in Abschn. 6.3.5 diskutiert.

6.2 Texturanalyse

Die Orientierung der Körner wird mit Elektronen-Rückstreu-Diffraktometrie (EBSD = Electron Back-Scattering Diffraction) untersucht³. Bei diesem Verfahren werden die sogenannten Kikuchi-Muster, die durch Interferenz der elastisch am Kristallgitter gestreuten Elektronen entstehen, analysiert. Anhand der Interferenzmuster kann man die Orientierung eines Kristalls in Bezug zu einem äußeren Koordinatensystem bestimmen. Durch Abrastern einer Probenoberfläche von $60 \times 60 \mu\text{m}$ erhält man orts aufgelöste Informationen über die Orientierung der einzelnen Kristallite. Die Ortsauflösung bei den durchgeführten Experimenten beträgt $1 \mu\text{m}$.

6.2.1 Darstellung der Orientierung als $\langle hkl \rangle$ -Histogramm

Die EBSD-Messungen liefern für jeden Meßpunkt die Orientierung der Einheitszelle in einem äußeren Koordinatensystem, das durch die Geometrie der Meßapparatur gegeben ist. Die Probe wird für die Messungen so ausgerichtet, daß die durch die Laserkristallisation ausgezeichneten Achsen (Scanrichtung und Oberflächennormale) mit zwei Achsen des äußeren Koordinatensystems zusammenfallen. Die dritte Achse, die senkrecht zur Oberflächennormalen und zur Scanrichtung ist, wird im folgenden als Transversale bezeichnet.

Zur Darstellung der Orientierung eines Kristallgitters muß man mindestens die Lage von zwei verschiedenen Richtungen $[hkl]$ bzw. $[uvw]$ angeben. In der Kristallographie wird hierzu häufig die stereographische Projektion benutzt [74]. Sie stellt für jede Achse des äußeren Koordinatensystems die zu ihr parallele Richtung des Kristallgitters als Punkt im sogenannten Standarddreieck grafisch dar. Durch diese Darstellung gehen bei polykristallinem Material Informationen über die Häufigkeit des Auftretens einer bestimmten Orientierung verloren, da gleiche Orientierungen zu gleichen Punkten im Standarddreieck führen. Deshalb werden in dieser Arbeit die Orientierungen der Kristallite in Form von $\langle hkl \rangle$ -Histogrammen dargestellt, da sie Häufungen von bestimmten Orientierungen hervorheben. Im Gegensatz zur stereographischen Projektion werden nicht die Richtungen dargestellt, die parallel zu den Koordinatenachsen liegen, sondern es wird die Lage

³Für die EBSD-Messungen und die zahlreichen, daraus entstandenen Diskussionen, bin ich abermals Melanie Nerding vom Lehrstuhl für Mikrocharakterisierung der Universität Erlangen-Nürnberg zu Dank verpflichtet.

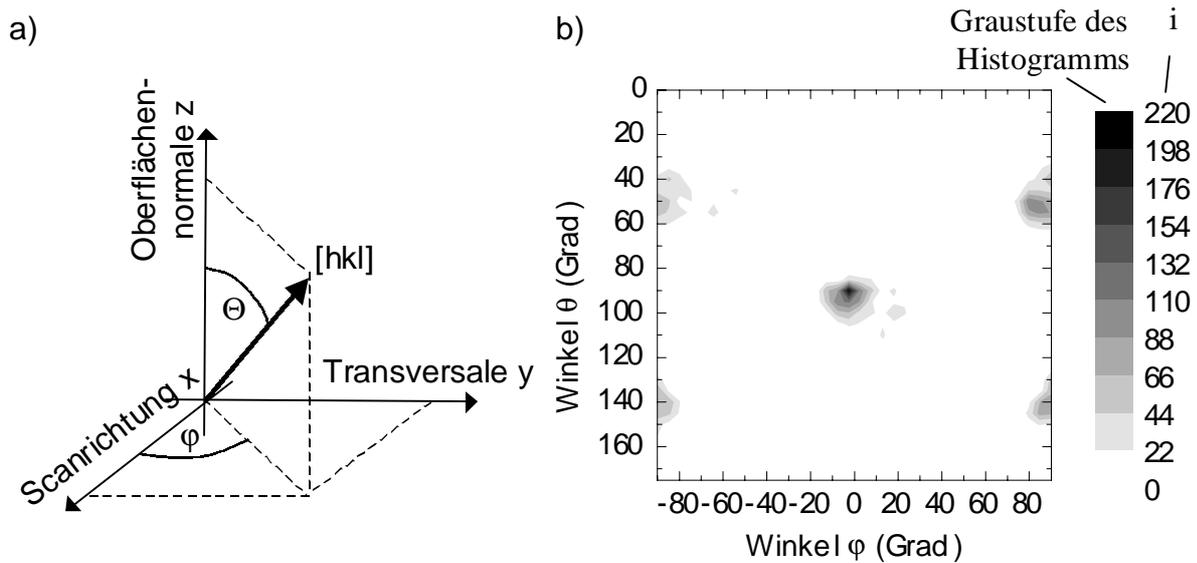


Abbildung 6.4: a) Definition der Polarkoordinaten des Vektors $[hkl]$. Der Winkel Θ ist der Winkel zwischen $[hkl]$ und der Oberflächennormalen. Die Projektion von $[hkl]$ in die Schichtebene schließt mit der Scanrichtung des Lasers den Winkel φ ein. b) Das $\langle 100 \rangle$ -Histogramm zeigt die Lage der $\langle 100 \rangle$ -Richtungen einer 50nm dicken Schicht. Der Häufungspunkt bei $\varphi = 0$ und $\Theta = 90^\circ$ entspricht einer $\langle 100 \rangle$ -Richtung, die parallel zur Scanrichtung liegt. Die Zahl i der Kristallite, deren $\langle 100 \rangle$ -Richtung mit der $\varphi - \Theta$ -Richtung zusammenfällt, ist als Graustufe dargestellt.

der $\langle hkl \rangle$ -Richtungen bezüglich des äußeren Koordinatensystems angegeben. Die Darstellung der räumlichen Orientierung einer $[hkl]$ -Richtung erfolgt in Polarkoordinaten φ und Θ , deren Definition Abb. 6.4 entnommen werden kann. Ein Computerprogramm berechnet für alle Richtungen (φ, Θ) zwischen $\varphi = -90^\circ \dots 90^\circ$ und $\Theta = 0 \dots 180^\circ$ in Intervallen von $\Delta\varphi, \Delta\Theta = 5^\circ$ die Zahl i der $\langle hkl \rangle$ -Richtungen, die in dem entsprechenden Intervall liegen. Die so ermittelten Häufigkeiten werden in einem zweidimensionalen φ - Θ -Koordinatensystem als Graustufen dargestellt. Je häufiger eine Orientierung auftritt, desto dunkler ist der entsprechende Punkt im Histogramm. Abbildung 6.4b zeigt das $\langle 100 \rangle$ -Histogramm einer 50nm dicken, laserkristallisierten Schicht auf Glas.

Für die Darstellung einer Kristallorientierung im $\langle hkl \rangle$ -Histogramm ist die Wahl der $\langle hkl \rangle$ -Richtung des Kristallkoordinatensystems willkürlich wählbar. Da alle n äquivalenten Richtungen berücksichtigt werden, wird die Darstellung mit Zunahme von n aber schnell unübersichtlich. Im folgenden werden deshalb die $\langle 100 \rangle$ -Richtungen betrachtet,

die mit $n_{100} = 6$ die niedrigste Zahl äquivalenter Richtungen haben. Außerdem stehen sie senkrecht aufeinander, was die geometrische Interpretation erleichtert. Durch diese Orthogonalität liegen auch im Falle eines einkristallinen Bereiches immer mindestens $n_{Histo} = 3$ $\langle 100 \rangle$ -Richtungen in dem in den Histogrammen dargestellten Winkelbereich. Wenn eine der $\langle 100 \rangle$ -Richtungen in der Normalen-Transversalen-Ebene liegt, werden $n_{Histo} = 4$ Richtungen dargestellt. Die Maximalzahl $n_{Histo} = 5$ erhält man, wenn, wie in Abb. 6.4b, eine $\langle 100 \rangle$ -Richtung parallel zur Scanrichtung liegt.

6.2.2 $\langle 100 \rangle$ -Histogramme von laserkristallisiertem Silicium auf Glas

Wie bereits in Abb. 6.4b zu sehen ist, zeigen die laserkristallisierten Schichten starke Ausprägungen von Vorzugsorientierungen. Die Kristallisationsparameter und die Schichtstruktur haben einen starken Einfluß auf die Orientierung. Abbildung 6.5 zeigt verschiedene $\langle 100 \rangle$ -Histogramme von Schichten, die bei unterschiedlichen Siliciumdicken d , Pulsenergien E und Repetitionsfrequenzen f kristallisiert wurden.

Nahezu alle Körner einer 50 nm dicken, polykristallinen, laserkristallisierten Schicht haben nach Abb. 6.5a bei niedrigen Pulsenergien und Frequenzen die gleiche Orientierung. Der Häufungspunkt in der Mitte des Histogramms, zu dem 93 % aller indizierten Kristallite beitragen, hat den Schwerpunkt $\varphi = 2^\circ \pm 9^\circ$, $\Theta = 95^\circ \pm 6^\circ$. Im Rahmen der Meßgenauigkeit liegt also bei allen indizierten Kristalliten eine $\langle 100 \rangle$ -Richtung mit einer Standardabweichung von weniger als 9° parallel zur Scanrichtung. In der von der Transversalen und der Normalen aufgespannten Ebene liegen für jeden Kristallit die vier senkrechten $\langle 100 \rangle$ -Richtungen bei $\varphi \approx \pm 90^\circ$, $\Theta \approx 45^\circ$ und $\varphi \approx \pm 90^\circ$, $\Theta \approx 135^\circ$. Das heißt in Richtung der Transversalen und der Normalen liegen $\langle 110 \rangle$ -Richtungen. Die entsprechende Orientierung der Elementarzelle des Siliciums zeigt Abb. 6.6a. Eine Erhöhung der Frequenz führt zu dem $\langle 100 \rangle$ -Histogramm in Abb. 6.5b. Es treten nun die zwei wiederum scharf definierten Orientierungen der Abb. 6.6b auf. Sie gehen aus Abb. 6.6a durch eine Drehung um je eine der beiden diagonal verlaufenden $\langle 100 \rangle$ -Richtungen hervor. Die beiden auftretenden Gitterorientierungen haben die Fehlorientierung einer $\Sigma=9$ -Korngrenze. Eine solche Beziehung sagt natürlich noch nichts über die tatsächliche Struktur der Korngrenzen aus, da hierzu die Orientierung zweier nebeneinanderliegender Körner sowie die

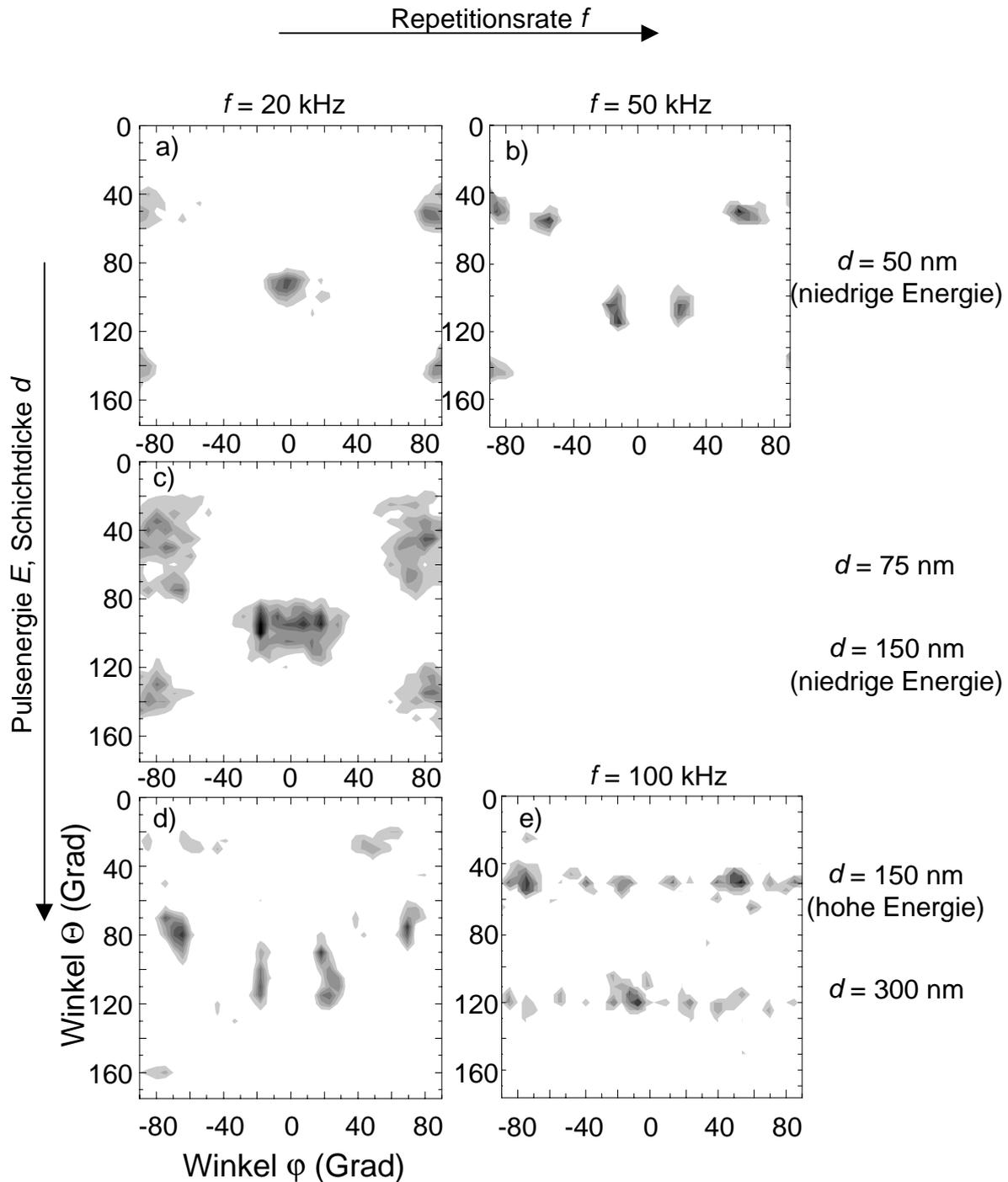


Abbildung 6.5: $\langle 100 \rangle$ -Histogramme von Siliciumschichten auf Glas. Histogramm a), c) und d) entstehen bei Kristallisation mit $f = 20$ kHz, b) bei 50 kHz und e) bei 100kHz. Die zugehörigen Schichtdicken und Energien stehen in den jeweiligen Zeilen rechts.

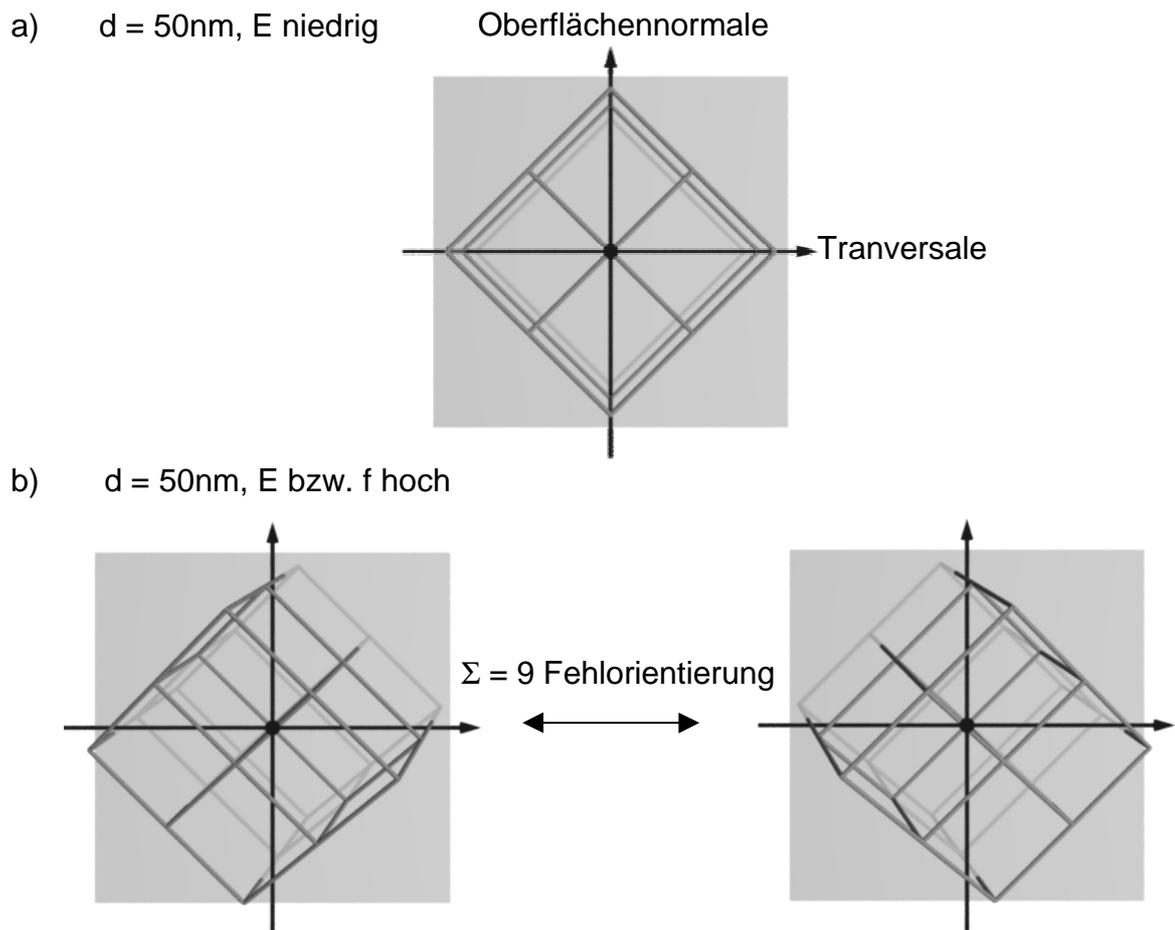


Abbildung 6.6: a) Orientierung der Elementarzelle des kubischen Siliciumgitters bei 50 nm dicken Schichten bei niedriger Energie und Frequenz. Die Scanrichtung zeigt aus der Abbildungsebene heraus. b) Eine Erhöhung der Pulsenergie bzw. der Frequenz resultiert in zwei möglichen Gitterorientierungen, die untereinander eine $\Sigma=9$ -Fehlorientierung besitzen.

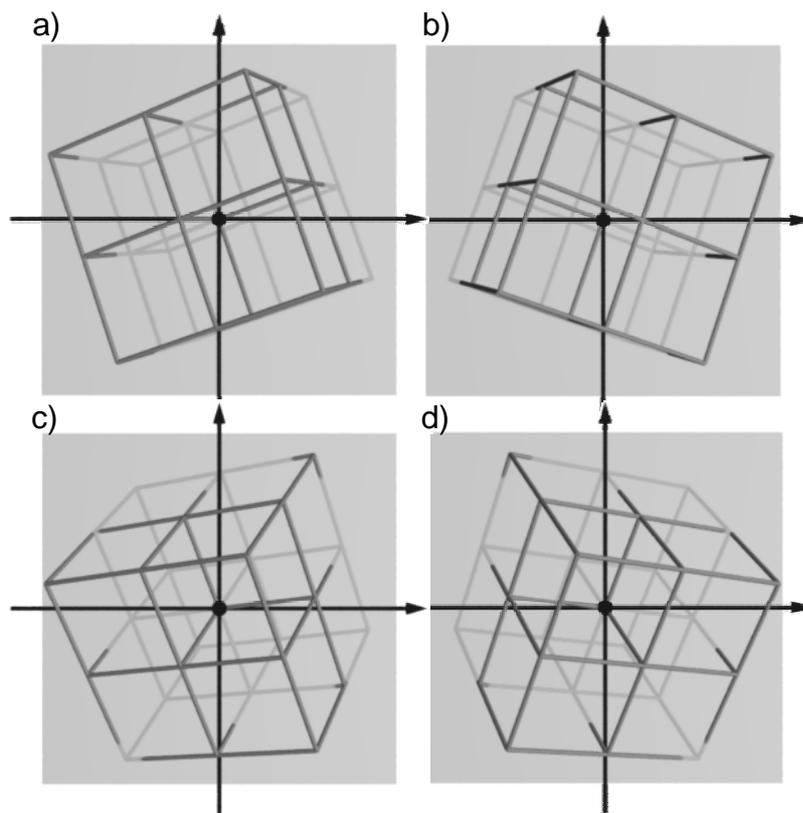


Abbildung 6.7: Bei 300 nm dicken Schichten treten vier Gitterorientierungen auf. Die Gitter a) und b) bzw. c) und d) besitzen eine Spiegelsymmetrie bezüglich der Scanrichtung-Normalenebene. Die Gitter a) und d) sowie b) und c) haben eine $\Sigma=3$ -Fehlorientierung

Korngrenzebene bestimmt werden muß. Abschnitt 6.2.4 untersucht die Korngrenzen genauer.

Eine Schichtdicke von 300 nm (bzw. 150 nm und hohe Pulsenergie) liefert typischerweise das $\langle 100 \rangle$ -Histogramm aus Abb. 6.5d. Es tritt nun eine Vielzahl von Häufungspunkten auf, die aber immer noch scharf definiert sind. Das Histogramm läßt sich aus den vier Gitterorientierungen der Abb. 6.7a-d aufbauen. Gitter a) und d) sowie b) und c) besitzen dabei eine $\Sigma=3$ -Fehlorientierung. Circa 90% aller von der EBSD-Messung indizierten Gitter besitzen mit einer Standardabweichung von $\Delta\varphi = 4^\circ$ und $\Delta\Theta = 8^\circ$ eine $\langle 311 \rangle$ -Richtung parallel zur Transversalen.

Zu den Orientierungen der Abb. 6.9c kommen bei hohen Frequenzen f zusätzlich die Orientierungen der Elementarzellen aus Abb. 6.10 hinzu. Sie besitzen hier aber nicht die feste räumliche Orientierung, die bei Verwendung der SiN_x -Zwischenschicht auftritt,

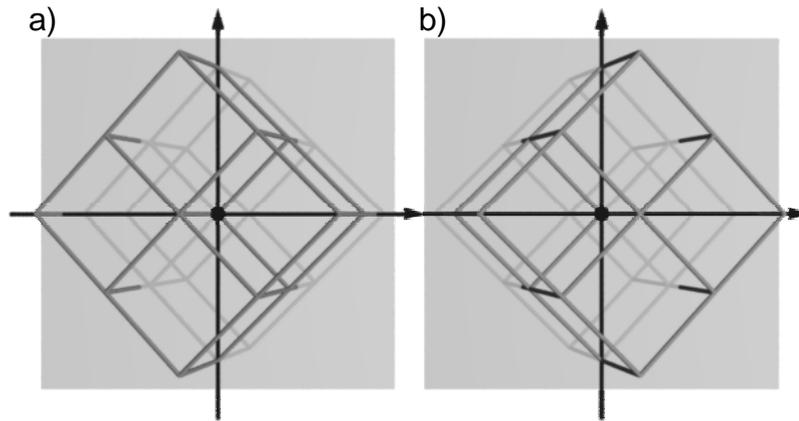


Abbildung 6.8: Orientierungen der Elementarzelle, wie sie bei 75 nm dicken Schichten sowie bei 150nm dicken Schichten (bei niedriger Energie) zusätzlich zu denen der Abbn. 6.6 und 6.7 auftreten. Gitter a) und b) haben eine $\Sigma=9$ -Fehlorientierung.

sondern sind um die Oberflächennormale verdrehbar. Diese Verdrehung erkennt man in Abb. 6.5e daran, daß die $\langle 100 \rangle$ -Richtungen auf Linien bei $\Theta \approx 55^\circ$, bzw. $\Theta \approx 125^\circ$ liegen.

Bei einer Schichtdicke $d = 75$ nm sowie bei $d = 150$ nm und niedriger Pulsenergie kommt es zu einer Überlagerung der Vorzugsorientierungen von 50 nm bzw. 300 nm dicken Schichten. Zusätzlich treten noch die beiden Gitterorientierungen aus Abb. 6.8 auf. Sie gehen aus Abb. 6.6 durch Drehung um die zur Oberflächennormalen parallelen $\langle 110 \rangle$ -Richtung um ca. 20° in positiver bzw. negativer Richtung hervor. Die beiden Gitter besitzen folglich eine $\Sigma=9$ -Fehlorientierung, die einer Drehung von 38.9° um die $\langle 110 \rangle$ -Richtung entspricht.

Bei einer Variation der Parameter gehen die Histogramme der Abb. 6.5 nicht durch kontinuierliche Verschiebung der Häufungspunkte ineinander über. Vielmehr findet eine Überlagerung der verschiedenen Histogramme statt, wie dies schon für 75 nm dicke Schichten beschrieben wurde. Auf die Orientierungen der Elementarzellen übertragen heißt das folglich, daß der Übergang der verschiedenen Vorzugsorientierungen nicht durch Drehungen der Zellen erfolgt. Vielmehr gibt es für bestimmte Parameter definierte Vorzugsorientierungen.

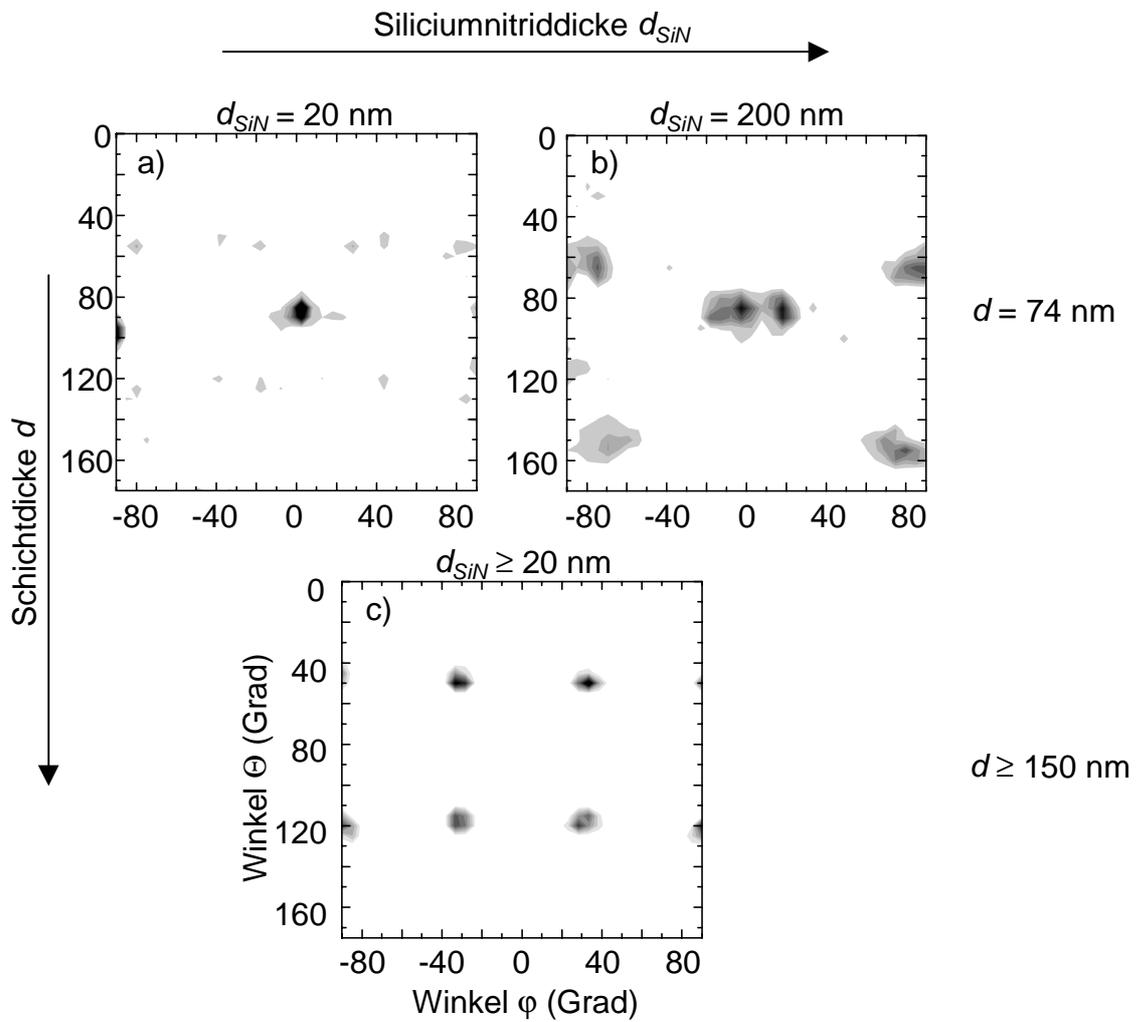


Abbildung 6.9: $\langle 100 \rangle$ -Histogramme von Siliciumschichten auf Siliciumnitrid-Zwischenschichten. Histogramm a) entsteht bei einer Schichtdicke $d = 74$ nm und einer SiN_x -Schichtdicke $d_{SiN} = 20$ nm, b) bei $d = 74$ nm und $d_{SiN} = 200$ nm und c) bei $d \geq 150$ nm und $d_{SiN} \geq 20$ nm.

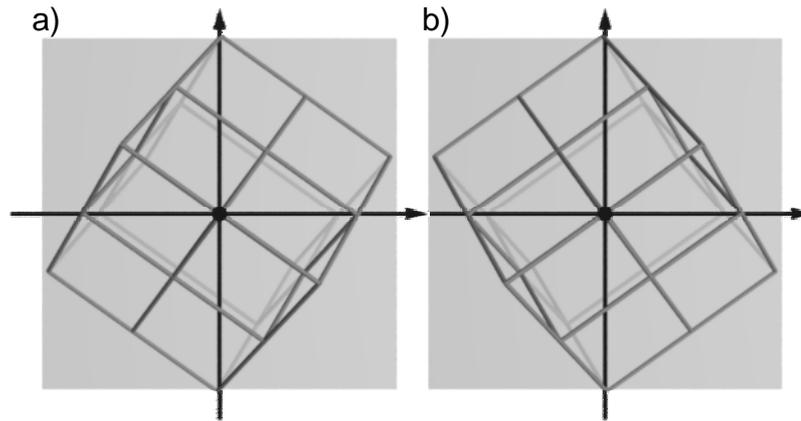


Abbildung 6.10: Gitterorientierungen für Siliciumschichten mit $d \geq 150$ nm auf SiN_x -Schichten beliebiger Dicke. In Richtung der Oberflächennormalen liegt die $[100]$ -, in der Transversalen eine $\langle 211 \rangle$ - sowie in der Scanrichtung eine $\langle 110 \rangle$ -Richtung. Die beiden Gitter haben eine $\Sigma=3$ -Fehlorientierung.

6.2.3 $\langle 100 \rangle$ -Histogramme von laserkristallisiertem Silicium auf Glas mit SiN_x -Zwischenschicht

Auf einer SiN_x -Zwischenschicht abgeschiedene Siliciumschichten besitzen nach der Laserkristallisation Orientierungen, die sich von denen auf Glas deutlich unterscheiden. Für Siliciumschichtdicken $d \geq 150$ nm ist die Textur der Abb. 6.9c von der Schichtdicke d , der Pulsenergie E , der Repetitionsrate f sowie der Dicke d_{SiN} der SiN_x -Schicht unabhängig. Es variiert lediglich die Standardabweichung der Häufungspunkte im $\langle 100 \rangle$ -Histogramm. Im dargestellten Fall einer Schicht der Dicke $d = 300$ nm ist die Abweichung vom Mittelwert mit nur 3° am geringsten. Das $\langle 100 \rangle$ -Histogramm besteht aus den zwei Gittern der Abb. 6.10. Beide besitzen eine $\langle 111 \rangle$ -Oberflächennormale und eine $\langle 110 \rangle$ -Richtung parallel zur Scanrichtung. In Richtung der Transversalen zeigt eine $\langle 211 \rangle$ -Richtung. Die beiden Gitter besitzen eine $\Sigma=3$ -Fehlorientierung.

Beim Übergang zu dünneren Siliciumschichten stellen sich Orientierungen ein, die mit denen auf Glas vergleichbar sind. Bei einer SiN_x -Dicke $d_{\text{SiN}} = 200$ nm und einer Siliciumdicke $d = 74$ nm ist die Textur der Abb. 6.9b vergleichbar mit der einer 50 nm dicken Schicht auf Glas. Eine Verringerung von d_{SiN} führt dazu, daß in Abb. 6.9a auch die Orientierungen der Abb. 6.9c erscheinen, allerdings ist ihr Anteil sehr gering.

Tabelle 6.1: Übersicht über die 5 Texturtypen und die Richtungen der Kristallite parallel zu den Achsen des äußeren Koordinatensystems. Es sind nur niedrig indizierte Richtungen angegeben, die den Orientierungen eindeutig zugeordnet werden können.

Texturtyp aus Abb.	Anzahl Kristallit- orientierungen	Normale	Transversale	Scanrichtung
6.6a	1	[110]	[110]	[100]
6.8	2	-	[221]	[210]
6.6b	2	[110]	-	-
6.7	4	-	[311]	-
6.10	2	[111]	[211]	[110]

6.2.3.1 Vorzugsorientierungen im äußeren Koordinatensystem

Tabelle 6.1 faßt die Orientierungen der verschiedenen Gitter im äußeren Koordinatensystem zusammen. Dabei sind nur niedrig indizierte Richtungen erfaßt, die charakteristisch für die jeweilige Textur sind. Die vier Gitter der Abb. 6.7 besitzen nach Abschnitt 6.2.2 z.B alle eine $\langle 311 \rangle$ -Richtung in der transversalen Richtung, während in den anderen Richtungen keine Kristallgitterrichtungen zusammenfallen.

6.2.4 Korngrenztypen

Die Orientierungen der Kristallite der verschiedenen Texturtypen haben, wie in den vorherigen Abschnitten gezeigt wurde, untereinander Fehlorientierungen, die charakteristisch für $\Sigma=3$ - und $\Sigma=9$ -Korngrenzen sind. Man kann aus diesen Orientierungen nicht direkt auf die Struktur der Korngrenzen schließen, da hierzu die Orientierung von zwei benachbarten Körnern und zusätzlich die Korngrenzebene bestimmt werden muß. Dies ist bei den laserkristallisierten Schichten nicht in allen Fällen problemlos möglich, da die Kornbreite für Schichten mit einer Dicke $d < 150$ nm kleiner ist als der Abstand $\Delta x = 1 \mu\text{m}$ zweier Meßpunkte der EBSD-Messungen. Deshalb ist für die dünnen Schichten keine direkte Bestimmung der Korngrenzen möglich. Für Schichten mit $d \geq 150$ nm lassen sich aus den EBSD-Messungen die Fehlorientierungen benachbarter Körner bestimmen und daraus die

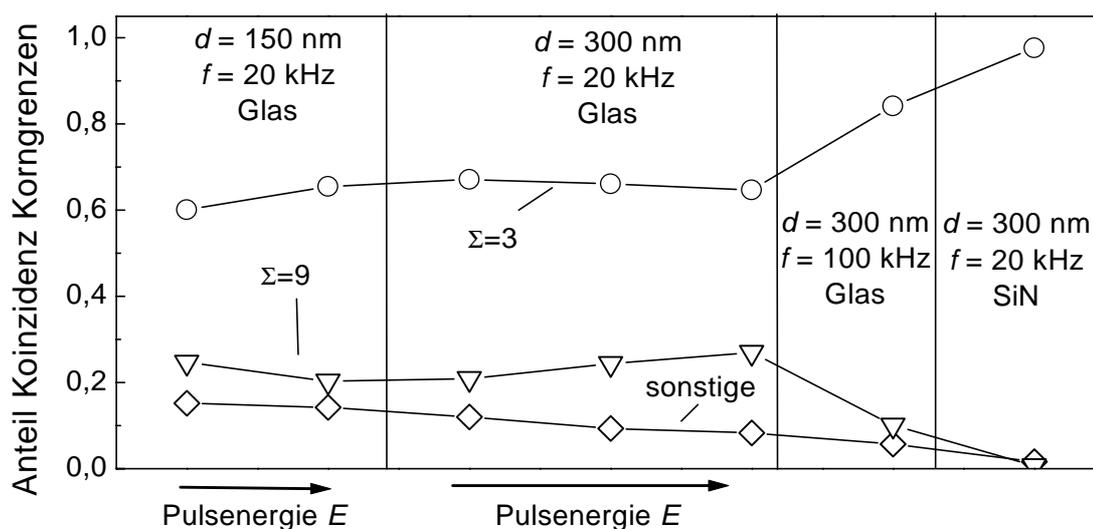


Abbildung 6.11: Anteil der $\Sigma=3$ -, $\Sigma=9$ - und aller übrigen Korngrenzen für verschiedene Schichtdicken d , Pulsenergien E , Repetitionsraten f sowie verschiedene Substratmaterialien.

Korngrenzpopulationen der Abb. 6.11 berechnen. Die zur vollständigen Charakterisierung der Korngrenze nötige Angabe der Korngrenzebene ist aus den EBSD-Daten nicht möglich. Der Anteil der $\Sigma=3$ -Korngrenzen an der Gesamtzahl der Korngrenzen dominiert in allen untersuchten Fällen deutlich und liegt zwischen 60% und 98% bei 150 nm dicken Schichten auf Glas bzw. 300 nm dicken Schichten auf einer SiN_x -Zwischenschicht. Korngrenzen vom Typ $\Sigma=9$ treten am zweithäufigsten mit einem Anteil von ca. 23% bei den 150 nm und 300 nm dicken Schichten auf. Die Korngrenzpopulation ist von der Pulsenergie nahezu unabhängig. Bei der Kristallisation von Siliciumschichten mit $d \geq 150$ nm bei hohen Repetitionsraten geht die Textur über zu der, die sich auf SiN_x -Zwischenschichten einstellt. Diesen Übergang sieht man auch in Abb. 6.11 im Anstieg des Anteils der $\Sigma=3$ -Korngrenzen bei hohen Frequenzen.

6.3 Modellhafte Beschreibung der Kristallisation

Die Texturen, die sich bei der Laserkristallisation während des SLS-Prozesses ausbilden, entstehen unter anderem durch Konkurrenz verschiedener Körner während des lateralen Wachstums. Wie Abb. 4.1c zeigt, werden bereits während des ersten Laserpulses einige Körner sehr breit und verdrängen dadurch andere. Diese Verdrängung kann man durch die

unterschiedlichen Wachstumsgeschwindigkeiten verschieden orientierter Körner erklären. Transmissions-Elektronen-Mikroskopaufnahmen zeigen aber auch während des Scans immer wieder die Entstehung und Verdrängung von Kristalliten. Dies kann nicht alleine an unterschiedlichen Wachstumsgeschwindigkeiten liegen, da aufgrund der Verdrängung nach einiger Zeit nur noch Orientierungen günstiger Wachstumsrichtung vorliegen sollten. Es existieren deshalb noch andere Faktoren, die das laterale Wachstum der Körner und somit die Textur beeinflussen.

Im folgenden wird der kinetische Aspekt des Wachstums sowie Einflüsse der Grenzflächen zum Substrat und zu benachbarten Körnern erläutert. Wegen der Ähnlichkeit der Orientierung der Korngrenzen parallel zur Scanrichtung bzw. wegen der vergleichbaren Wachstumsgeschwindigkeiten wird hier kurz auf die vielfach untersuchten Wachstumsmechanismen bei der Zonenschmelzrekristallisation (ZMR) bzw. der Explosivkristallisation eingegangen.

6.3.1 Vergleich mit anderen Verfahren

Bei der ZMR wird ein schmaler Streifen einer dünnen Siliciumschicht z. B. durch Heizen mit Lampen aufgeschmolzen. Während der lateralen Bewegung der Lampen über das Substrat, kristallisiert das Silicium an der der Bewegungsrichtung abgewandten Kante der Schmelzzone. Die verwendeten Schichtdicken liegen zwischen $d = 500$ nm und einigen Mikrometern. Details können dem Übersichtsartikel von Miaoulis et al. [75] entnommen werden. Die ZMR unterscheidet sich von der Laserkristallisation nach dem SLS-Verfahren im wesentlichen durch die kontinuierliche Energiezufuhr und durch die langsameren Kristallisationsgeschwindigkeiten von bis zu einigen Millimetern pro Sekunde. Die Kristallisation aus der Schmelze erfolgt nicht an einer ebenen Kristallisationsfront, sondern je nach Experiment an facettierten, zellularen oder dendritischen Grenzflächen [76, 77, 78]. Die verschiedenen Interfacemorphologien wurden unter anderem durch ein Modell des facettierten Wachstums [79, 80], Schichtdickeninhomogenitäten [78], Instabilitäten durch die Änderung der Reflektivität des Siliciums während der Kristallisation [81] sowie durch das Auftreten von Korngrenzen [78] erklärt.

Bei allen Interfacetypen der ZMR treten Bereiche auf, an denen die Wachstumsfront weiter in die Schmelze hineinreicht, sowie Stellen, an denen sie weiter zurückliegt. Der

Abstand der zurückliegenden Bereiche korreliert bei der ZMR mehr oder weniger mit dem Abstand der auftretenden Kleinwinkelkorngrenzen nach der Kristallisation. Beim Modell des facettierten Wachstums bilden sich am Interface verschiedene $\{111\}$ -Facetten aus, die im Falle von Silicium die Ebenen mit der geringsten Wachstumsgeschwindigkeit sind. Nach Pfeiffer et al. [82] liegt die $[110]$ -Richtung parallel zur Scanrichtung, weil sie eine schnelle Wachstumsrichtung ist.

Bei hohen Scangeschwindigkeiten im Bereich von einigen Millimetern pro Sekunde tritt das sogenannte selbstfacettierte Wachstum auf. Kristallite mit einer $\langle 111 \rangle$ -Oberflächennormalen können durch Verzwilligung die Wachstumsgeschwindigkeit der $\{111\}$ -Facetten erhöhen, da an den inneren Kanten die Anlagerung einzelner Siliciumatome möglich ist [83], was nach Abschnitt 2.5.2 die Bildungsenergie neuer Wachstumsstufen auf den $\{111\}$ -Ebenen erniedrigt. Durch die Ausbildung der Zwillinge erfolgt das Wachstum in $\langle 112 \rangle$ -Richtung.

Auch bei der Explosivkristallisation von a-Si erfolgt das Wachstum an $\{111\}$ -Ebenen. Hierbei bewegt sich eine ca. 500 nm dicke Schicht flüssigen Siliciums mit Geschwindigkeiten von bis zu 15 m/s lateral über Distanzen von über 100 μm durch das amorphe Silicium [84]. An der Rückseite dieser flüssigen Schicht bildet sich durch Kristallisation poly-Si. In Wachstumsrichtung der Kristallite treten wie bei der ZMR bevorzugt $\langle 110 \rangle$ - und $\langle 112 \rangle$ -Richtungen auf [40].

6.3.2 Form der Wachstumsfront

Durch REM- und TEM-Aufnahmen lassen sich keine Aussagen über die Form der Wachstumsfront während der Laserkristallisation machen, da sie die Situation nach dem Zusammenstoß der lateral wachsenden Körner mit denen im Bereich der homogenen Nukleation darstellen. In REM-Aufnahmen sieht man aber etliche Körner, die auf eine Krümmung der Kristallisationsfront hindeuten. In Analogie zur ZMR wird hier deshalb angenommen, daß die Wachstumsfront an den Korngrenzen zwischen den Körnern etwas zurückhängt und eine konvexe Krümmung besitzt, so daß die Mitte eines Kornes weiter in die flüssige Phase reicht. Das Zustandekommen einer solchen Wachstumsfront kann man sich mit dem folgenden Modell für das Aufschmelzen und Kristallisieren der Kristallite erklären.

Das Aufschmelzen von poly-Si erfolgt nicht nur von der Oberfläche in Richtung Sub-

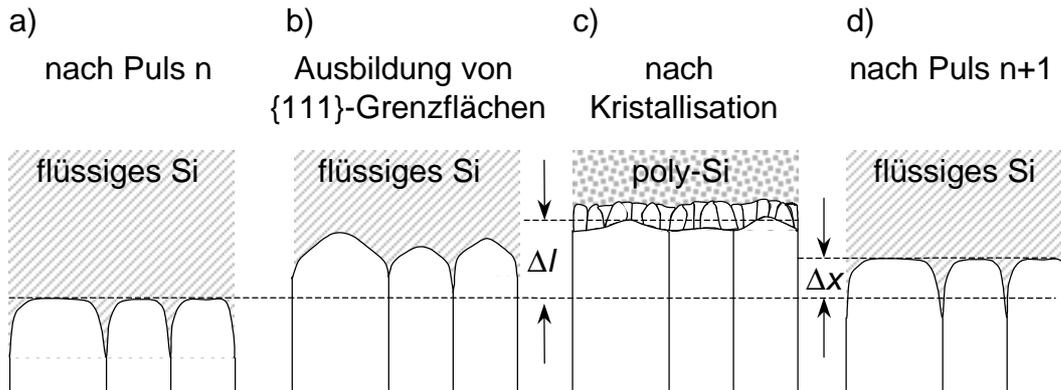


Abbildung 6.12: Modellhafte Beschreibung der Wachstumsfront: a) Während des Laserpulses schmilzt das Silicium auch an den Korngrenzen auf, so daß sich Einkerbungen der Grenzfläche ergeben. b) Während des Wachstums bilden sich $\{111\}$ -Grenzflächen aus. Die Korngrenzen hängen zurück, da für ihren Aufbau zusätzliche Energie benötigt wird. c) Nach der homogenen Nukleation wachsen die zurückhängenden Korngrenzen für eine längere Zeit als die Spitzen, bis sie mit den Kristalliten aus dem Bereich der homogenen Nukleation zusammenstoßen. Nach der vollständigen Erstarrung liegen sie deshalb nicht mehr so weit zurück wie bei b). d) Nach dem nächsten Laserpuls sieht die Front wieder wie nach dem vorherigen aus. Die $\{111\}$ -Grenzflächen können sich nicht dauerhaft ausbilden.

strat, sondern auch an den Korngrenzen, da dort die Bindungsenergie der Siliciumatome erniedrigt ist [85, 86]. Nach dem Abklingen des Laserpulses erhält man dadurch keine glatte Wachstumsfront, sondern Einschnitte an den Korngrenzen, wie Abb. 6.12a zeigt. Während der Abkühlung setzt das kristalline Wachstum ein. Wegen der Anisotropie der Kristallisationsgeschwindigkeiten erfolgt der Zuwachs des Kristalls zunächst hauptsächlich in die schnellen Richtungen. Nach einiger Zeit bilden sich, wie Abb. 6.12b zeigt, die Oberflächen mit geringster Wachstumsgeschwindigkeit aus, die in der Folge die Kristallisationsgeschwindigkeit festlegen [87]. Im Falle von Silicium sind dies die $\{111\}$ -Oberflächen. Zum Aufbau von Korngrenzen während des lateralen Wachstums wird zusätzliche Energie benötigt. Sie werden deshalb während der Kristallisation gegenüber der Mitte eines Kornes zurückhängen [78]. Die bereits nach dem Aufschmelzen vorhandenen Einschnitte werden dadurch noch größer.

Die Kristallite wachsen nun solange weiter, bis die Schicht so stark unterkühlt, daß die homogene Nukleation das laterale Wachstum stoppt. Dies friert die Kristallisations-

front allerdings nicht abrupt ein. Nach Abschnitt 4.1 wird die an der Kristallisationsfront freiwerdende latente Kristallisationswärme auch lateral abgeführt und dadurch die Temperatur in ihrer Umgebung erhöht. In der Nähe der Grenzfläche bleibt deshalb noch eine Schicht flüssigen Siliciums zurück. Im Bereich zwischen den Körnern ist diese Temperaturerhöhung besonders ausgeprägt, da hier Wärme von zwei Seiten zugeführt wird. Folglich ist dort der Abstand der Kristallisationsfront zu dem Bereich der homogenen Nukleation größer, und der zurückliegende Bereich kann eine längere Zeit wachsen. Dies führt dazu, daß die Distanz zwischen den Spitzen und den zurückhängenden Bereichen an den Korngrenzen wieder kleiner wird, wie Abb. 6.12c zeigt. Gestoppt wird das laterale Wachstum schließlich durch Kollision mit den in Abschnitt 4.1 beschriebenen, lateral aus der Mitte herauswachsenden Körnern.

Durch den nächsten um $\Delta x = 0.5 \mu\text{m}$ verschobenen Laserpuls schmilzt das Silicium wieder auf, und man erhält die Grenzfläche der Abb. 6.12d, die von der Form her mit der aus Abb. 6.12a identisch, jedoch gegenüber dieser um $0.5 \mu\text{m}$ verschoben ist.

6.3.3 Entstehung der diskreten Orientierungen

Nach Tab. 6.1 liegen bei der Laserkristallisation die $\langle 110 \rangle$ -Richtungen nur bei dicken Siliciumschichten, die entweder eine SiN_x -Zwischenschicht besitzen oder bei den höchsten Repetitionsfrequenzen kristallisiert wurden, parallel zur Scanrichtung. Bei allen anderen Schichten und Kristallisationsparametern weichen die Orientierungen in Scanrichtung deutlich von denen der ZMR oder Explosivkristallisation ab. Der Hauptmechanismus des kristallinen Wachstums ist deshalb nicht das (facettierte) Wachstum von $\{111\}$ -Grenzflächen. Dies liegt daran, daß der SLS-Prozeß im Gegensatz zu den beiden anderen Prozessen kein kontinuierlicher Wachstumsprozeß ist, beim dem die Grenzflächen zwischen Kristall und Flüssigkeit die Ebenen mit den langsamsten Wachstumsraten sind. Vielmehr ist nach dem Modell des vorherigen Abschnitts die Grenzfläche zwischen Kristallit und Flüssigkeit, die direkt nach dem Aufschmelzen vorliegt, für das Wachstum entscheidend.

6.3.3.1 Kristallisationsgeschwindigkeit

Abbildung 6.13 zeigt, daß bei den größten Kristallisationsgeschwindigkeiten die $\langle 100 \rangle$ -Richtung der Kristallite des laserkristallisierten Siliciums in Scanrichtung liegen. Für klei-

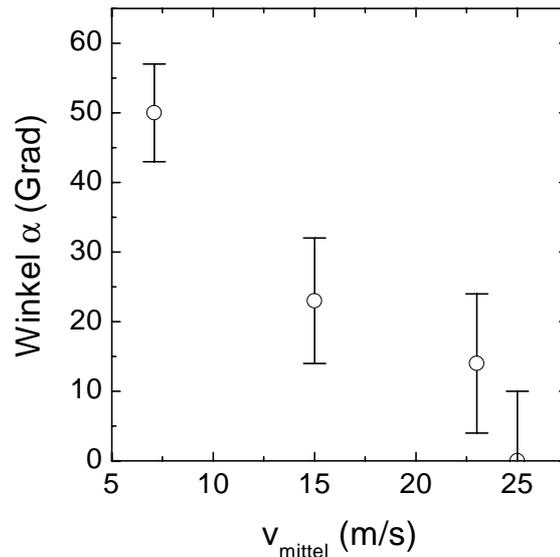


Abbildung 6.13: Der Winkel α , den die $\langle 100 \rangle$ -Richtungen mit der Scanrichtung einschließen, nimmt mit einer Zunahme der in numerischen Simulationen berechneten Kristallisationsgeschwindigkeit v_{mittel} ab. Die Winkel α sind aus den $\langle 100 \rangle$ -Histogrammen 6.5a), c), d), e) berechnet, die Geschwindigkeiten v_{mittel} stammen aus Abb. 6.3.

ner werdende Geschwindigkeiten v_{mittel} wird der Winkel α zwischen den $\langle 100 \rangle$ -Richtungen und der Scanrichtung immer größer. Damit sich eine beliebige $\langle hkl \rangle$ -Richtung in Scanrichtung ausbilden kann, muß sie schneller sein als die in den numerischen Simulationen berechnete Kristallisationsgeschwindigkeit v_{krist} . Die Kristallisationsgeschwindigkeit v_{hkl} der $\langle hkl \rangle$ -Richtung muß deshalb die Bedingung

$$v_{\text{hkl}} \geq v_{\text{krist}} \quad (6.1)$$

erfüllen. Für die größten Geschwindigkeiten v_{krist} ist diese Bedingung nur von der $\langle 100 \rangle$ -Richtung erfüllt, da sie nach Abschnitt 2.5.2 die schnellste Wachstumsrichtung von Silicium ist. Mit einer Abnahme von v_{krist} weichen die $\langle 100 \rangle$ -Richtungen in Abb. 6.13 immer mehr von der Scanrichtung ab, da nun auch andere Richtungen Gl. (6.1) erfüllen. Gleichung (6.1) erklärt ebenfalls das Verhalten der 74 nm dicken Schichten mit SiN_x -Zwischenschichten verschiedener Dicke aus Abb. 6.9. Bei der 200 nm dicken SiN_x -Schicht ist die Wärmeabfuhr aus der Siliciumschicht größer als bei der 20 nm dicken SiN_x -Schicht. Die Kristallisationsgeschwindigkeit ist deshalb bei der dicken Schicht größer und nur die $\langle 100 \rangle$ -Richtung kann sich in Scanrichtung ausprägen. Bei der 20 nm dicken SiN_x -Schicht

existieren zusätzlich die Orientierungen, die bei den dickeren Siliciumschichten auftreten.

6.3.3.2 Korngrenzen

Gleichung (6.1) erklärt allerdings nicht die stets scharf definierten Orientierungen der einzelnen Kristallite der Abbn. 6.5 und 6.9. Die Entstehung dieser Vorzugsorientierungen läßt sich durch die, im folgenden beschriebene, Berücksichtigung der Bildungsenergien von Korngrenzen im Modell des vorherigen Abschnitts erklären.

Korngrenzen mit hoher Bildungsenergie schmelzen während des Laserpulses schneller auf als solche mit niedrigen Bildungsenergien. Zwischen den Körnern entsteht folglich ein tieferer Einschnitt. Im allgemeinen ist die Bildungsenergie von Koinzidenzkorngrenzen niedriger als die von Großwinkelkorngrenzen ohne Koinzidenzgitter. Die niedrigste Bildungsenergie besitzt dabei die $\Sigma=3$ -, gefolgt von der $\Sigma=9$ -Zwillingskorngrenze [88]. Da während der Abkühlung Korngrenzen mit hoher Bildungsenergie langsamer wachsen, vergrößert sich der Einschnitt zwischen den Körnern weiter. Folglich bleibt der Bereich zwischen zwei Körnern mit Korngrenzen hoher Bildungsenergie länger flüssig und unterkühlt stärker als bei niedrigen Bildungsenergien. Dies erhöht die Wahrscheinlichkeit der Nukleation eines neuen Korns im Einschnitt zwischen den Körnern. Bei der Nukleation in nächster Nähe eines bestehenden Korns hat die Grenzflächenenergie zwischen Keim und bestehendem Korn einen erheblichen Einfluß auf die Wachstumsrate des neugebildeten Korns. Beim Vorliegen einer Korngrenze mit hoher Bildungsenergie ist der Anteil der freien Energie der Korngrenze an der gesamten freien Energie des kleinen Korns sehr hoch. Folglich wächst das Korn sehr langsam und kann so klein bleiben, daß es vom nächsten Laserpuls komplett aufgeschmolzen wird. Ist die Bildungsenergie der Korngrenze jedoch klein, so kann das Korn nach der Nukleation schneller wachsen. Außerdem wird es dann von dem folgenden Puls mit geringerer Wahrscheinlichkeit aufgeschmolzen.

Nach diesem Szenario werden sich wegen ihrer niedrigen Bildungsenergie bevorzugt $\Sigma=3$ - und $\Sigma=9$ -Korngrenzen durchsetzen. Somit lassen sich die diskreten Texturen sowie das bevorzugte Auftreten dieser Korngrenzen in Abb. 6.11 erklären. Allerdings stellt sich die jeweilige Orientierung nicht sofort zu Beginn eines Scans ein sondern benötigt eine gewisse Strecke. Dies ist im Einklang mit eigenen Experimenten, bei denen der SLS-Prozeß zur Rekristallisation von SOI- (Semiconductor on Insulator) Wafern benutzt wird.

Hier dient ein einkristalliner Bereich als Saat für das laterale Wachstum. Das Wachstum erfolgt zunächst einkristallin, um nach wenigen Mikrometern in polykristallines Wachstum umzuschlagen. Die Orientierungen des polykristallinen Siliciums unterscheiden sich direkt nach dem Umschlag von den Orientierungen aus Abschn. 6.2.2 [89]. Nach einigen 100 μm lassen sich die Strukturen im REM aber nicht mehr von den üblichen unterscheiden.

6.3.4 Entstehung der Oberflächentextur

Gleichung (6.1) sowie der Einfluß von Korngrenzen können die Entstehung einer Oberflächentextur nicht erklären. Als Ursache für deren Ausprägung bei dünnen polykristallinen Schichten werden in der Literatur die Minimierung der freien Energie der Oberfläche sowie Verspannungseffekte genannt. Bei der Festphasenkristallisation von dünnen a-Si-Schichten bildet sich z. B. während der sekundären Kristallisation [90, 91] wegen der niedrigsten Oberflächenenergie eine $\{111\}$ -Oberfläche aus. Die Minimierung der freien Energie führt auch bei der ZMR von dünnen Siliciumschichten [92] sowie bei der großflächigen Laserkristallisation von 50 nm dicken Schichten [45] zur Ausprägung der $\{111\}$ -Textur. Bei der ZMR von dickeren Schichten verursachen Verspannungen eine $\{100\}$ -Oberflächentextur [93, 94].

Beim SLS-Prozeß entstehen bei dünnen Schichten $\{110\}$ -Oberflächen, während bei dicken Schichten auf SiN_x bzw. bei hohen Frequenzen eine $\{111\}$ -Oberfläche entsteht.

Die Kristallisationsgeschwindigkeit v_{krist} ist nicht der bestimmende Faktor bei der Ausbildung der Oberflächentextur. Dies zeigt die Einführung der SiN_x -Zwischenschicht bei einer 150nm dicken Siliciumschicht. Nach Abb. 6.3 wird durch die höhere Wärmeleitfähigkeit des SiN_x die Kristallisationsgeschwindigkeit von $v_{krist} \approx 17$ m/s ohne SiN_x -Schicht auf $v_{krist} \approx 22$ m/s (dies ist etwa die Geschwindigkeit, mit der eine 75 nm dicke Schicht auf Glas kristallisiert) erhöht. Mit der SiN_x -Zwischenschicht tritt jedoch eine $\{111\}$ -Oberflächentextur auf, während eine 150 nm dicke Schicht ohne SiN_x mit deutlich langsamerer Kristallisationsgeschwindigkeit keine eindeutige Textur aufweist. Ohne SiN_x -Schicht tritt eine $\{111\}$ -Textur erst bei Kristallisationsgeschwindigkeiten $v_{krist} \approx 7$ m/s auf.

Die Ausbildung von $\{111\}$ -Oberflächen deutet auf eine Minimierung der Oberflächen- und Grenzflächenenergie γ_{XS} zwischen der kristallinen Siliciumschicht und dem Substrat

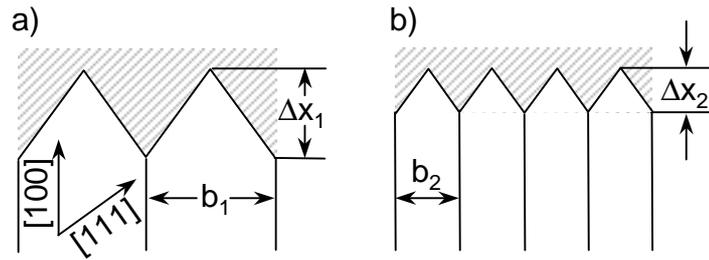


Abbildung 6.14: Nach Ausbildung der $\{111\}$ -Ebenen liegen die zurückhängenden Bereiche bei breiten Körnern (a) weiter zurück als bei schmalen Körnern (b). Dadurch steigt die Wahrscheinlichkeit, daß zwischen den Körnern neue Körner nukleieren.

hin. Allerdings kann sie sich nicht bei den höchsten Kristallisationsgeschwindigkeiten v_{krist} ausbilden, da bei einer $\{111\}$ -Oberfläche die $\langle 100 \rangle$ -Richtung wegen des 54.7° Winkels zwischen ihnen nicht in Scanrichtung liegen kann. Wird d größer und somit v_{krist} kleiner, so tritt die $\{111\}$ -Textur zuerst bei Schichten mit einer SiN_x -Zwischenschicht auf. Bei Siliciumschichten auf Glas tritt sie erst bei den dicksten Schichten und hohen Frequenzen auf. Dieser Effekt kann an einer unterschiedlichen Grenzflächenenergie γ_{XS} von $\{111\}$ -Oberflächen auf Glas und SiN_x liegen. Möglicherweise ist die Absenkung der freien Energie bei Ausbildung einer $\{111\}$ -Grenzfläche, im Vergleich zu anderen Grenzflächen, auf SiN_x stärker als auf Glas. Nach meinem Kenntnisstand der Literatur sind die entsprechenden Werte allerdings nicht bekannt. Bekannt ist lediglich, daß die Grenzflächenenergie γ_{LS} von flüssigem Silicium auf Glas größer ist als auf SiN_x [95, 96].

6.3.5 Kornbreite

Nach Abb. 6.3 korreliert die Kornbreite des poly-Si mit der Kristallisationsgeschwindigkeit. Die physikalische Ursache dafür könnte in der Unterkühlung des flüssigen Siliciums liegen. Nach Simulationen von Grabow et al. [97] und Messungen bei hohen Kristallisationsgeschwindigkeiten von Yater und Thompson [98] kann die Kristallisationsgeschwindigkeit der $[100]$ -Richtung (in m/s), mit der Unterkühlung $\Delta T = T_m - T$, als

$$v_{krist} = 0.12 \Delta T \quad (6.2)$$

geschrieben werden [99]. Die Unterkühlung nimmt also linear mit v_{krist} zu. Für die Kristallisationsgeschwindigkeiten, die nach Abb. 6.3 zwischen $v_{krist} \approx 7 \dots 25$ m/s liegen,

liefert Gl. (6.2) Unterkühlungen zwischen $\Delta T = 58 \dots 208$ K.

Mit zunehmender Kristallisationsgeschwindigkeit sinkt die Temperatur der Kristallisationsfront und damit auch die Temperatur der flüssigen Phase zwischen den einzelnen Körnern. In ihr nimmt somit die Nukleationsrate nach Gl. (2.21) zu. Da nach Abb. 6.14 das Volumen des flüssigen Siliciums zwischen den Körnern mit der Kornbreite b ansteigt, ist auch die Wahrscheinlichkeit der Nukleation zwischen zwei breiten Körnern größer als zwischen zwei schmalen. Geht man von der Kornbreite b_1 und unterschiedlichen Kristallisationsgeschwindigkeiten $v_1 < v_2$ aus, so werden im Falle von v_2 solange neue Körner entstehen, bis sich die Breite b_2 aus Abb. 6.14b eingestellt hat.

Kapitel 7

Dünnschichttransistoren aus laserkristallisiertem Silicium

In diesem Kapitel werden die Eigenschaften von TFTs mit laserkristallisiertem Silicium im Kanal untersucht. Es wird der Einfluß der Schichtdicke und der Orientierung des Kanals bezüglich der Laserscanrichtung auf die Kenngrößen der Transistoren untersucht. Sämtliche Kristallisationen zur TFT-Herstellung wurden mit LPCVD-Silicium auf einer 200 nm dicken SiO₂-Pufferschicht durchgeführt. Als Glassubstrat wird Hoya-NA 40-Glas verwendet.¹

7.1 Einfluß der Kristallisationsparameter auf die Transistoreigenschaften

7.1.1 Kanalarorientierung und -dimension

Abbildung 7.1 zeigt typische Drainstrom-Gatespannung- (I_{DS} - V_{GS}) Kennlinien² von TFTs mit einem laserkristallisierten Kanal mit den Abmessungen $W = 30 \mu\text{m}$ und $L = 15 \mu\text{m}$. Die Kennlinien der Transistoren sind stark abhängig von der Orientierung des Kanals bezüglich der Laserscanrichtung und damit der Richtung, in der die Körner late-

¹Die Dünnschichttransistoren wurden in enger Zusammenarbeit mit der Groupe de Microélectronique et Visualisation der Universität Rennes (Frankreich) prozessiert. Für die sehr erfolgreiche und interessante Zusammenarbeit danke ich Youri Helen, Karine Mourgues und Tayeb Mohammed-Brahim.

²Für die Messung der Kennlinien bedanke ich mich bei Youri Helen von der Universität Rennes

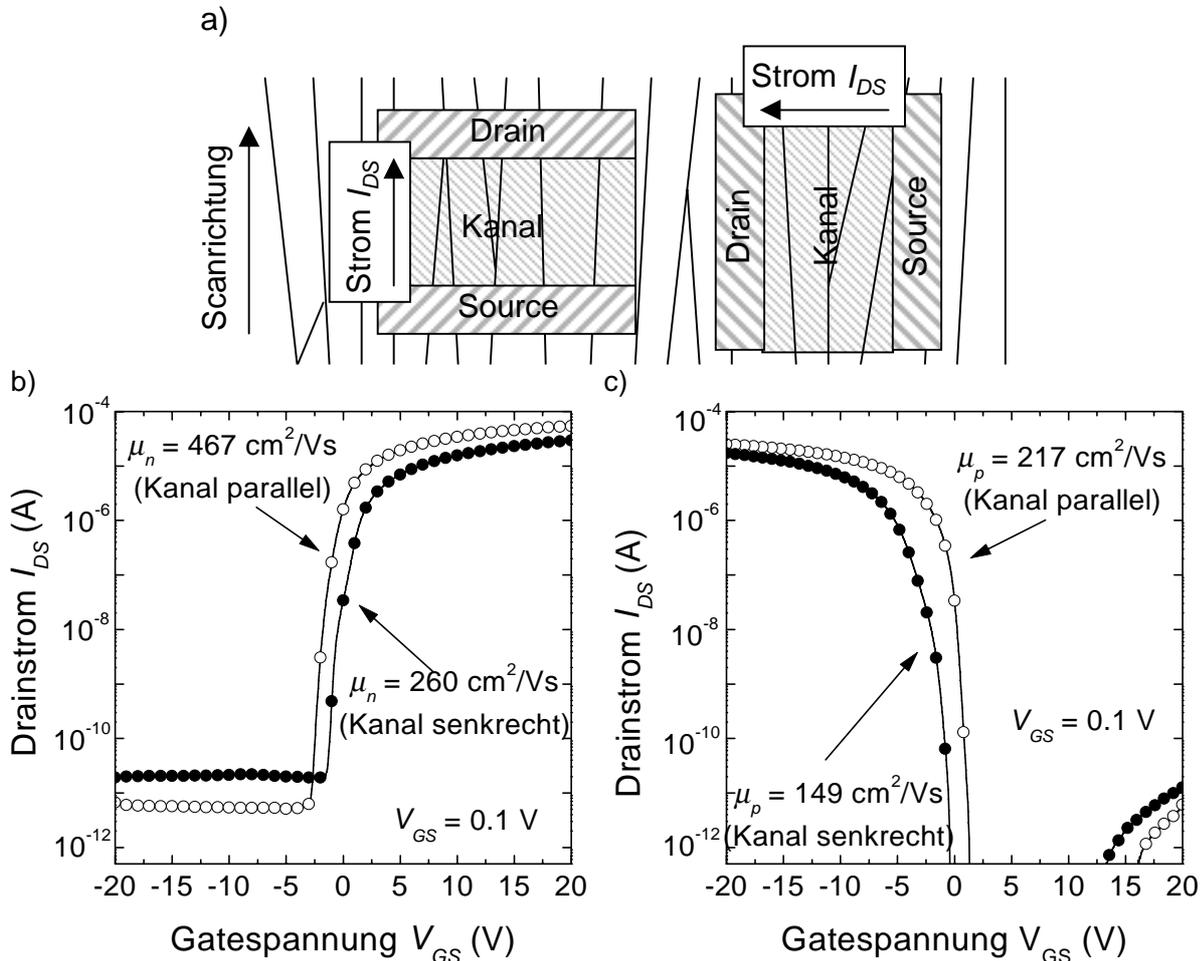


Abbildung 7.1: a) Bei einer Ausrichtung des Kanals parallel zur Scanrichtung muß der Strom I_{DS} weniger Korngrenzen überwinden, als bei der senkrechten Ausrichtung. b) Typische Kennlinie von n-Kanal-TFTs mit einer Kanalbreite $W = 30 \mu\text{m}$ und -länge $L = 15 \mu\text{m}$, deren Kanal parallel bzw. senkrecht zur Scanrichtung des Lasers liegt. Die mittleren Elektronenfeldeneffektbeweglichkeiten in den beiden Fällen ist $\mu_n = 467 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ bzw. $\mu_n = 260 \text{ cm}^2/\text{Vs}$. c) Für p-Kanal-TFTs beträgt die typische Loch-Feldefektbeweglichkeit $\mu_p = 217 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ bei Transistoren mit dem Kanal parallel zur Scanrichtung und $\mu_p = 149 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ bei senkrechtem Kanal.

Tabelle 7.1: Gemittelte Kenngrößen aus den Transistorkennlinien von n- und p-Kanal-TFTs mit unterschiedlichen Geometrien und Orientierungen.

Kenngröße	Kanal- größe (W/L)	n-Kanal		p-Kanal	
		Scan	⊥ Scan	Scan	⊥ Scan
μ (cm^2/Vs)	30/15	467	260	217	149
	63/22	360	210	151	-
V_T (V)	30/15	0	1	-1.8	-4.7
	63/22	-0.1	0.7	-1.8	-
S (V/dec)	30/15	0.3	0.3	0.3	0.3
	63/22	0.6		0.2	-

ral verlängert sind. So ist zum Beispiel bei einem Kanal parallel zur Scanrichtung der Leckstrom I_{off} um einen Faktor zwei kleiner, der maximale Strom I_{on} um einen Faktor zwei größer als bei einem Kanal senkrecht zur Scanrichtung. Aus den Kennlinien von ca. 50 Transistoren ergeben sich die mittleren Feldeffektbeweglichkeiten $\mu_n = 467 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ und $\mu_p = 217 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ bzw. $\mu_n = 260 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ und $\mu_p = 149 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ bei parallelem bzw. senkrechtem Kanal. Die Standardabweichung liegt in allen Fällen bei nur 5%. Die besten Transistoren haben eine Feldeffektbeweglichkeit $\mu_n = 510 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ bzw. $\mu_p = 230 \text{ cm}^2/\text{Vs}$.

Eine Vergrößerung des Kanals auf $W = 63 \mu\text{m}$ und $L = 22 \mu\text{m}$ führt zu einer Verschlechterung der TFT-Eigenschaften. Die mittlere Elektronenbeweglichkeit bei einer Kanalrichtung parallel zur Scanrichtung nimmt z. B. von $\mu_n = 467$ auf $\mu_n = 360 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ ab. Den Einfluß von Orientierung und Größe des Transistors auf die Feldeffektbeweglichkeiten μ , die Schwellspannungen V_T sowie die Steigung S des Stroms unterhalb von V_T faßt Tab. 7.1 für n- und p-Kanal-TFTs zusammen.

Die elektrischen Eigenschaften der laserkristallisierten Schichten korrelieren sehr gut mit den strukturellen Eigenschaften, die in Abschnitt 6.2 beschrieben wurden. Die Orientierungsabhängigkeit der Feldeffektbeweglichkeit resultiert aus der stark anisotropen Korngröße des SLS-Prozesses. Die Länge der meisten Körner ist insbesondere bei den kleinen TFTs größer als die Kanallänge $W = 15 \mu\text{m}$, während die Breite klein gegen die Bauelementgröße ist. Dadurch wird der Ladungsträgertransport bei einem Stromfluss in

Scanrichtung nicht durch Potentialbarrieren an den Korngrenzen behindert. Fließt der Strom hingegen senkrecht zur Scanrichtung, müssen die Potentialbarrieren der Korngrenzen überwunden werden, was die Feldeffektbeweglichkeit erniedrigt [100].

Die Reduktion der Beweglichkeit als Folge der Änderung der Kanaldimensionen von $W = 30 \mu\text{m}$ bzw. $L = 15 \mu\text{m}$ auf $W = 63 \mu\text{m}$ bzw. $L = 22 \mu\text{m}$ zeigt, daß auch beim Stromfluß in Scanrichtung einzelne Korngrenzen überwunden werden müssen. Die Zahl dieser nimmt mit der Kanallänge zu, was die mittlere Feldeffektbeweglichkeit verkleinert. Die Korngrenzen stammen von Körnern, die nicht exakt parallel zur Scanrichtung liegen sowie von Körnern die innerhalb des Kanals aufhören oder entstehen, wie Abb. 7.1a zeigt.

Ein Vergleich der Schichten des in dieser Arbeit verwendeten SLS-Prozesses mit denen, die mittels großflächiger Excimerlaserkristallisation hergestellt wurden, zeigt den Einfluß der Korngrenzen auf die Feldeffektbeweglichkeit. Die Korngröße des Excimer-Prozesses liegt etwa in der gleichen Größenordnung wie die Kornbreite von 150 nm dicken Schichten nach dem SLS-Prozeß. Der gleiche Transistorprozeß liefert jedoch eine Feldeffektbeweglichkeit von ca. $150 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ bei großflächiger Kristallisation [101] bzw. $260 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ mit der Kanalrichtung quer zur SLS-Scanrichtung. Die höhere Beweglichkeit deutet auf die Reduktion der Potentialbarrieren durch den hohen Anteil an elektrisch inaktiven $\Sigma=3$ -Korngrenzen hin [102].

7.1.2 Variation von Energie und Schichtdicke

Mit einer Zunahme der Siliciumdicke von $d = 70$ auf $d = 250$ nm steigt die mittlere Feldeffektbeweglichkeit von $\mu = 275 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ auf $\mu = 380 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ an, wie Abb. 7.2 zeigt. Der Abbildung entnimmt man weiterhin, daß bei einer Schichtdicke $d = 250$ nm die Beweglichkeit nicht von der Pulsenergie abhängt. Bei 150 nm dicken Schichten hingegen steigt die Beweglichkeit bei einer Zunahme der Energie von $16 \mu\text{J}$ auf $16.5 \mu\text{J}$ von $245 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ auf $356 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ an. Eine weitere Energieerhöhung bei konstanter Schichtdicke beeinflußt μ_n nicht mehr.

Nach Kapitel 6 ändern sich bei einer Erhöhung der Pulsenergie und der Schichtdicke sowohl die Kornbreite, die Vorzugsorientierungen als auch Struktur der Korngrenzen. All diese Effekte können die TFT-Eigenschaften beeinflussen. Bei den dünnsten Schichten mit $d = 75$ nm weisen die Korngrenzen nicht die Geradlinigkeit der Korngrenzen der

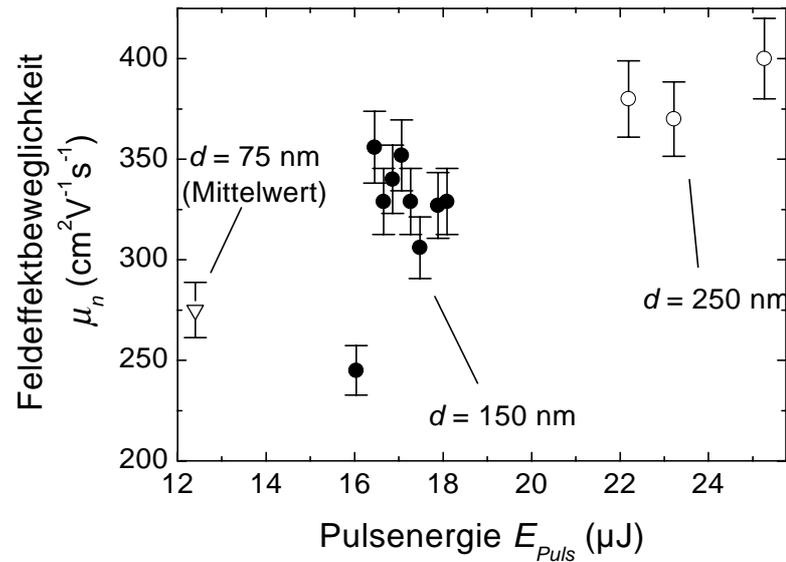


Abbildung 7.2: Elektronen-Feldefektbeweglichkeit von Transistoren, deren Kanal mit den Abmessungen $W/L = 63\mu\text{m}/22\mu\text{m}$ bei verschiedenen Dicken d mit unterschiedlicher Pulsenergie E_{Puls} kristallisiert wurde.

dickeren Schichten auf und besitzen Einschübe kleinerer Kristallite. Außerdem sind die Vorzugsorientierungen der 75 nm dicken Schichten derart, daß vermutlich deutlich weniger $\Sigma=3$ -Korngrenzen zwischen den einzelnen Körnern existieren als bei den dickeren Schichten. Beide Effekte erhöhen die Zahl der Korngrenzdefektzustände und damit die Barrierenhöhen im Kanal der TFTs im Vergleich zu den dickeren Schichten. Deshalb ist die Beweglichkeit der 70 nm dicken Schichten deutlich kleiner als bei 150 oder 250 nm dicken Schichten.

Der Rückgang der Beweglichkeit bei den 150 nm dicken Schichten bei der niedrigsten Pulsenergie E , in Abb. 7.2, auf einen Wert, wie er typischerweise bei 70 nm dicken Schichten auftritt, korreliert mit dem Texturumschlag, der in diesem Energiebereich stattfindet. Nach Abschnitt 6.2 besitzen die 150 nm dicken Schichten bei sehr niedrigen Energien eine Textur, die denen der 75 nm dicken Schichten entspricht. Bei hohen Energien hingegen ist die Textur identisch mit der von 300 nm dicken Schichten. Deswegen deutet die reduzierte Beweglichkeit auf die erhöhte elektrische Aktivität der Korngrenzen und damit auf eine Erhöhung der Potentialbarrieren hin.

Die Erhöhung der Beweglichkeit beim Übergang von 150 nm zu 250 nm dicken Schichten liegt an der größeren Kornbreite der dickeren Schichten, da die Textur gleich bleibt.

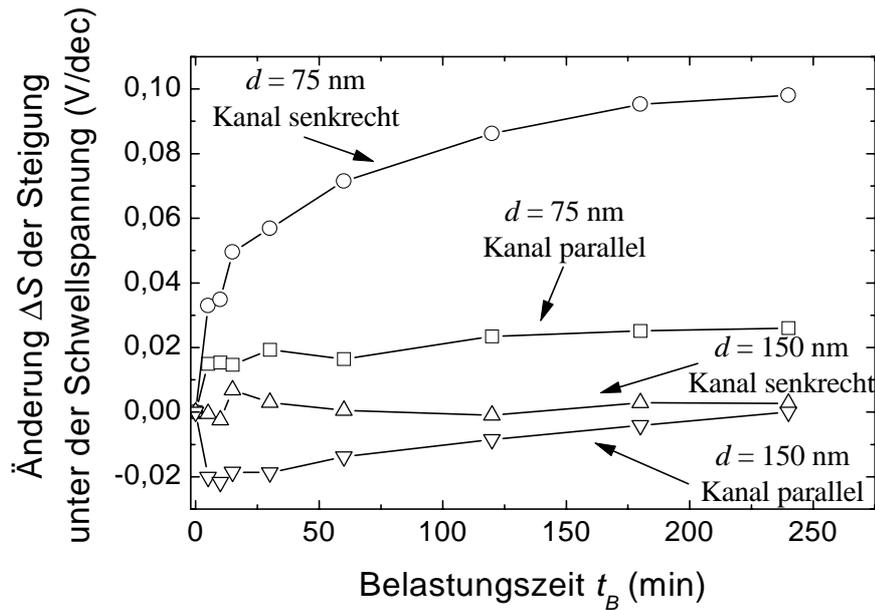


Abbildung 7.3: Variation der Steigung der Kennlinie unter der Schwellspannung V_T nach dem Anlegen einer Spannung $V_{GS} = -15V$ an das Gate der TFTs für die Belastungszeit t_B . Bei 150 nm dicken Schichten hat die Belastung nahezu keinen Einfluß.

7.1.3 Stabilität der TFTs

Um die Stabilität von TFTs zu testen, eignen sich Belastungstests, bei denen für eine Zeit t_B eine Gleichspannung V_{GS} an das Gate angelegt wird, die deutlich größer ist als die Spannung, bei der der Transistor im Normalbetrieb arbeitet. Source- und Drainkontakt sind bei den Experimenten kurzgeschlossen. Abbildung 7.3 zeigt die Auswirkung der Spannung $V_{GS} = -15$ V auf die Steigung S der Transistorkennlinie unterhalb der Schwellspannung³. Die Spannung V_{GS} ist so gewählt, daß keine Injektion von Ladungen in das Gatedielektrikum durch Fowler-Nordheim-Tunneln stattfindet. Bei 75 nm dicken Schichten mit dem Kanal senkrecht zu den Korngrenzen nimmt S mit der Belastungszeit stark zu. Mit der Stromrichtung parallel zu den Körnern ist ebenfalls eine deutliche, aber wesentlich geringere Zunahme von S zu sehen. Die 150 nm dicken Schichten zeigen sowohl bei einer Ausrichtung des Kanals parallel wie auch senkrecht zur Scanrichtung nahezu keine Änderung der Steigung S der Transistorkennlinie unterhalb der Schwellspannung.

Die Degradationsmechanismen bei hohen elektrischen Feldern sind vor allem an a-Si-

³Für die Stabilitätsuntersuchungen der TFTs danke ich H. Toutah von der Site Universitaire, LUSAC in Octeville (Frankreich).

TFTs vielfach untersucht worden und werden üblicherweise durch Ladungsträgereinfang im Gatedielektrikum oder Erzeugung von nicht abgesättigten Siliciumbindungen im Kanal des TFTs erklärt [103, 104, 105]. Wegen der Erhöhung der Steigung S durch die angelegte Spannung liegt hier der zweite Effekt vor.

Im Gegensatz zu a-Si-TFTs, bei denen im gesamten Volumen elektrisch aktive Störstellen erzeugt werden können, wird dies bei polykristallinem Material bevorzugt an Defekten der Kristallstruktur, z.B. an den Korngrenzen, geschehen. Zusammen mit den TEM-Aufnahmen der Abb. 6.1 und der Korngrenzpopulation der Abb. 6.11 erklärt dies die Schichtdicken- und Orientierungsabhängigkeiten der Abb. 7.3. Bei Schichten mit 75 nm Dicke sind die Korngrenzen ausgefranst, und es gibt viele Störungen der Kristallstruktur durch Einschübe von kleinen Kristalliten, während 150 nm dicke Schichten zum Großteil sehr gerade $\Sigma=3$ -Korngrenzen besitzen, bei denen jede Siliciumbindung abgesättigt ist. Die Kristalldefektdichte, und somit auch der Einfluß durch hohe elektrische Felder auf S , ist bei den 75 nm dicken Schichten wesentlich größer. Bei einem Stromfluß parallel zur Scanrichtung ist die Zahl der zu überwindenden Korngrenzen geringer als bei senkrechtem Stromfluß. Im wesentlichen wird der Ladungsträgertransport nun durch die Korngrenzen, die durch die Einschübe entstehen, gehemmt. Folglich ist auch die Degradation der TFT-Eigenschaften nicht so ausgeprägt.

Kapitel 8

Ausblick

Das in der vorliegenden Arbeit verwendete sequentielle laterale Laserkristallisationsverfahren ermöglicht die Herstellung von Dünnschichttransistoren mit hervorragenden elektronischen Eigenschaften mit sehr geringen Streuungen auf Flächen von $5 \times 5 \text{ cm}^2$. Diese Transistoren liefern mittlere Beweglichkeiten von $\mu_n = 467 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ und $\mu_p = 217 \text{ cm}^2/\text{Vs}$. Die elektronischen Eigenschaften sind auf die geringe elektrische Aktivität der Korngrenzen zurückzuführen. Noch bessere Eigenschaften sind von Dünnschichttransistoren auf einer SiN_x -Schicht zu erwarten. Dieses Ausgangsmaterial besitzt großes Potential für künftige elektronische Anwendungen, da nur Korngrenzen auftreten, die in der Literatur für ihre sehr geringe elektrische Aktivität bekannt sind.

Die Analyse der Wärmeenergieeffusion während der Kristallisation und die Korrelation mit den strukturellen Eigenschaften des polykristallinen Siliciums gibt die Richtung für künftige Verbesserungen vor. Durch eine weitere Verlangsamung der Abkühlung sollten noch breitere Körner entstehen. Möglichkeiten dazu wurden in der Literatur im Zusammenhang mit anderen Kristallisationsverfahren bereits vorgestellt:

- Einfügen einer Wärmeisolationsschicht aus porösem SiO_2
- Verwendung einer Substratheizung
- Zeitlich versetzte Laserpulse, die noch während der Abkühlung dem Silicium erneut Energie zuführen
- Verwendung von Lasern mit noch höheren Repetitionsraten als 100 kHz

- Aufbringen von Deckschichten, die Wärmeenergie speichern und zusätzlich den direkten Kontakt des flüssigen Siliciums mit Luft vermeiden.

Die Abkühlung kann jedoch nicht beliebig verlangsamt werden, da sonst das Silicium zwischen zwei Laserpulsen nicht mehr erstarrt und somit ein Übergang zu den Kristallisationverfahren mit kontinuierlichen Lasern stattfindet. Dadurch werden die von solchen Verfahren bekannten Probleme der Diffusion von Verunreinigungen aus dem Glas auftreten.

Der in dieser Arbeit erstmalig verwendete diodengepumpte Festkörperlaser mit einer sehr hohen Repetitionsrate von bis zu 100 kHz ermöglicht deutlich schnellere Prozesse als bei Verwendung der heute üblichen Excimerlaser. Für eine industrielle Umsetzung des Prozesses zur Kristallisation von Silicium mit Raten bis zu $35 \text{ cm}^2/\text{s}$ muß noch die Tauglichkeit von heute bereits erhältlichen, leistungsstarken Lasersystemen bestätigt werden.

Anhang A

Näherungsfunktionen

Abbildung A.1 zeigt den Verlauf der spezifischen Wärmekapazitäten c_p^{Si} bzw. c_p^{Glas} von Silicium bzw. Glas sowie der Wärmeleitfähigkeiten λ^{Si} bzw. λ^{Glas} von Silicium bzw. Glas für Temperaturen zwischen $T = 290$ K und 1800 K. Um die tatsächlichen Daten in die Simulationen einzubeziehen und dabei den Rechenaufwand nicht zu groß werden zu lassen, werden die Literaturwerte durch die Polynome der Tab. A.1 mit möglichst niedriger Ordnung angepasst.

Da die spezifische Wärme $c_p = \partial H / \partial T$ mit der Enthalpie H zusammenhängt, wird die Schmelzenthalpie ΔH in die spezifische Wärme einbezogen, um den Simulationsalgorithmus zu vereinfachen. Am Schmelzpunkt T_S hat die Enthalpie wegen des Phasenübergangs 1. Ordnung eine Unstetigkeitsstelle und springt um den Wert ΔH . Die Ableitung nach der Temperatur ist folglich unendlich, was einer Deltafunktion der spezifischen Wärme entspricht. Solche Sprünge führen in Simulationen zu Instabilitäten. Deshalb wird die Deltafunktion der spezifischen Wärme durch eine Gauß-Funktion angenähert und der Beitrag der Schmelzenthalpie zur spez. Wärme als

$$c_p^{\Delta H}(T) = \frac{\Delta H}{\Delta T \sqrt{\pi/2}} e^{-2(T-T_S)^2/(\Delta T)^2}. \quad (\text{A.1})$$

geschrieben. In den Simulationen wird die Gauß-Breite $\Delta T = 14$ K benutzt. Das Integral über Gl. (A.1) ist gerade die Schmelzenthalpie ΔH . In den Simulationen wird

$$c_p^{Si,ges}(T) = c_p^{Si}(T) + c_p^{\Delta H}(T) \quad (\text{A.2})$$

als spezifische Wärme von Silicium eingesetzt.

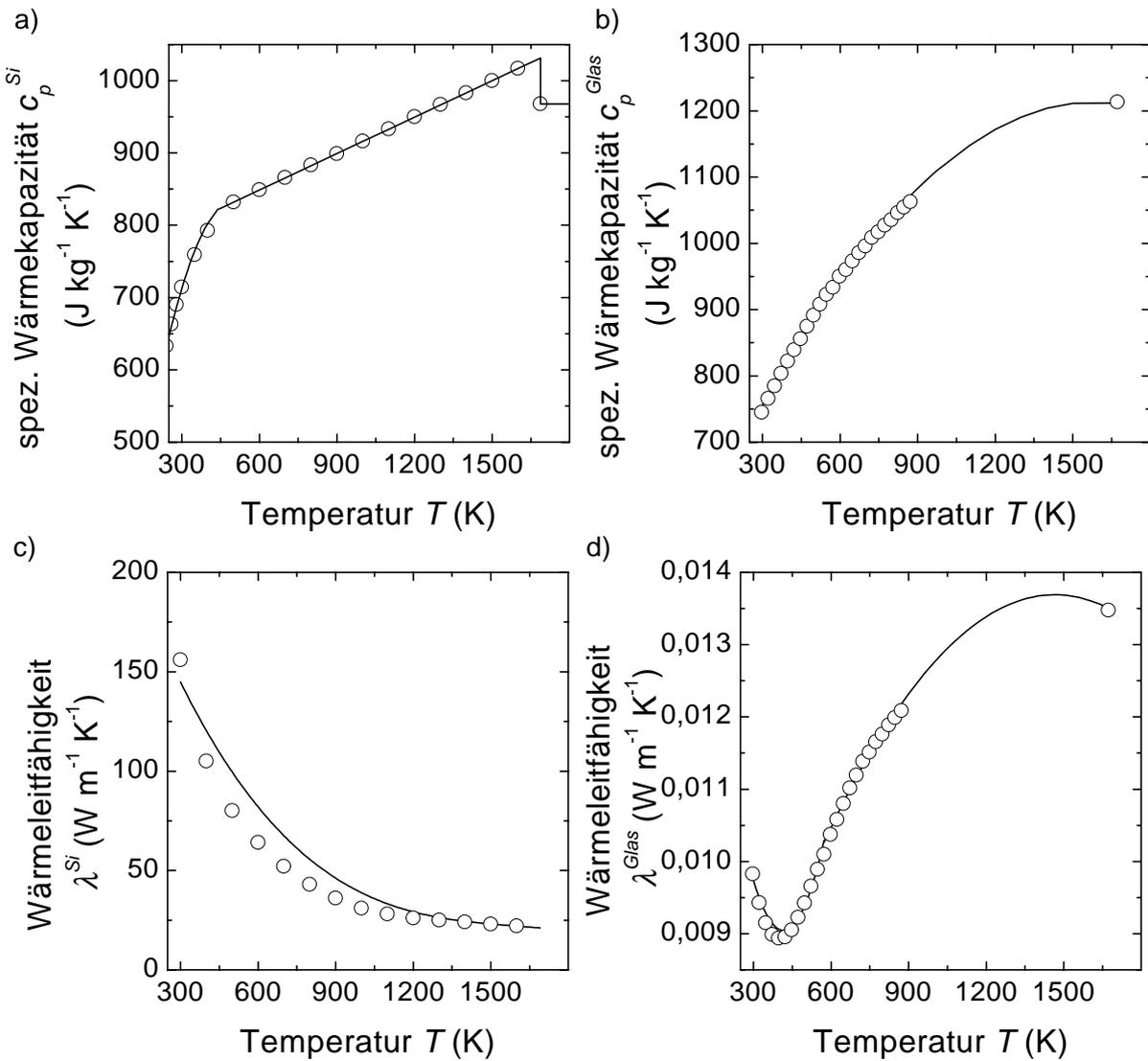


Abbildung A.1: Die offenen Kreise sind die Literaturwerte [14] der a) spez. Wärmekapazität c_p^{Si} von Silicium, b) spez. Wärmekapazität c_p^{Glas} von Glas, c) Wärmeleitfähigkeit λ^{Si} von Silicium, d) Wärmeleitfähigkeit λ^{Glas} von Corning 1737F Glas. Die durchgezogenen Linien sind die Näherungsfunktionen der Tab. A.1, die für die Simulationen benutzt werden.

Tabelle A.1: In den Simulationen verwendete Näherungsfunktionen für die spezifischen Wärmen sowie die Wärmeleitfähigkeiten von Silicium und Glas. Die gesamte spezifische Wärme $c_p^{Si,ges}$ von Silicium setzt sich aus der tatsächlichen spezifischen Wärme c_p^{Si} sowie dem Anteil $c_p^{\Delta H}$ zusammen, der die Schmelzenthalpie des Phasenübergangs beim Schmelzen berücksichtigt.

Variable	Näherungsfunktion	
	$-2.9 \cdot 10^{-3} T^2 + 2.93T + 94.3$: 439 K $\geq T$
c_p^{Si}	$0.168T + 748$: 439 K $< T \leq T_S$
	968	: $T_S < T$
$c_p^{\Delta H}$	$\frac{\Delta H}{\Delta T \sqrt{\pi/2}} e^{-2(T-T_S)^2/(\Delta T)^2}$	
$c_p^{Si,ges}$	$c_p^{Si}(T) + c_p^{\Delta H}(T)$	
c_p^{Glas}	$-2.76 \cdot 10^{-4} T^2 + 0.877T + 517$	
λ^{Si}	$-5 \cdot 10^{-8} T^3 + 2.4 \cdot 10^{-4} T^2 - 0.374T + 242.8$: 1600 K $\geq T$
	22	: 1600 K $< T$
λ^{Glas}	$5.1 \cdot 10^{-8} T^2 + 4.25 \cdot 10^{-5} T + 0,0179$: 573 K $\geq T$
	$-4.3 \cdot 10^{-9} T^2 + 1.26 \cdot 10^{-5} T + 4,46 \cdot 10^{-3}$: 573 K $< T$

Die Dichte von kristallinem Silicium nimmt zwischen $T = 300$ K und 1500 K nur um ca. 2% ab und wird deshalb in den Simulationen mit $\rho_{Si} = 2.3 \text{ g cm}^{-3}$ konstant gesetzt [14].

Die thermodynamischen Daten von SiN stammen aus [106]. In den Simulationen wird die Dichte $\rho_{SiN} = 2.2 \text{ g cm}^{-3}$, die Wärmeleitfähigkeit $\lambda^{SiN} = 2.5 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ sowie die spezifische Wärmekapazität $c_p^{SiN} = 1444 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ verwendet. Die Temperaturabhängigkeit wird nicht berücksichtigt, da zum Teil keine genauen Daten vorliegen, oder die Temperaturabhängigkeit kleiner ist als von Glas oder Silicium.

Anhang B

Diskretisierung der Wärmeleitungsgleichung

Zur Diskretisierung wird das Substrat in x- und z-Richtung in Zellen der Größe Δx und Δz unterteilt. Die kontinuierlichen Variablen $T(x, z, t)$, $\lambda(T(x, z))$, $c_p(T(x, z))$ sowie $\alpha(T(x, z))$ werden durch die Werte T_{x_n, z_m, t_l} , λ_{x_n, z_m, t_l} , c_{x_n, z_m, t_l} und α_{x_n, z_m, t_l} , die sie in der Mitte der Zelle (x_n, z_m) zum Zeitpunkt t_l einnehmen, ersetzt.

Umschreiben der Differentialgleichung (5.2) als Differenzgleichung liefert die Temperatur der Zelle (x_n, z_m) zum Zeitpunkt t_{l+1}

$$\begin{aligned} T_{x_n, z_m, t_{l+1}} = & T_{x_n, z_m, t_l} + \frac{\Delta t}{c_p \rho} \left[\lambda_{x_n, z_m, t_l} \frac{T_{x_{n+1}, z_m, t_l} - 2T_{x_n, z_m, t_l} + T_{x_{n-1}, z_m, t_l}}{\Delta x^2} \right. \\ & + \lambda_{x_n, z_m, t_l} \frac{T_{x_n, z_{m+1}, t_l} - 2T_{x_n, z_m, t_l} + T_{x_n, z_{m-1}, t_l}}{\Delta z^2} \\ & + \frac{(\lambda_{x_{n+1}, z_m, t_l} - \lambda_{x_{n-1}, z_m, t_l})(T_{x_{n+1}, z_m, t_l} - T_{x_{n-1}, z_m, t_l})}{4\Delta x^2} \\ & + \frac{(\lambda_{x_n, z_{m+1}, t_l} - \lambda_{x_n, z_{m-1}, t_l})(T_{x_n, z_{m+1}, t_l} - T_{x_n, z_{m-1}, t_l})}{4\Delta z^2} \\ & \left. + \frac{E_{x_n, z_{m-1}, t_l}}{\Delta z} (1 - e^{-\alpha_{x_n, z_m, t_l} \Delta z}) \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

Hierin ist

$$E_{x_n, z_m} = E_{x_n, z_{m-1}, t_l} e^{-\alpha_{x_n, z_m} \Delta z}. \quad (\text{B.2})$$

die Energie des Laserlichtes in der Zelle (x_n, z_m) zur Zeit t_l . An der Oberfläche im Punkt

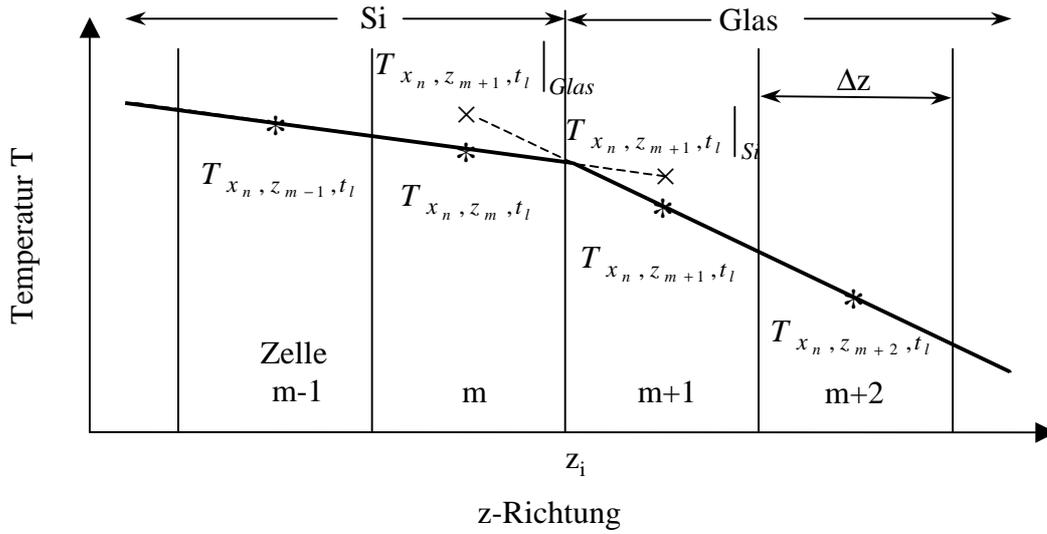


Abbildung B.1: Der Übergang zwischen Silicium und Glas liegt zwischen den Zellen mit z_m und z_{m+1} . Zur Ermittlung der Temperatur bei z_i dienen die Hilfstemperaturen.

$(x_n, 0)$ beträgt die Pulsenergie

$$E_{x_n, 0, t_l} = \frac{(1-R)E_{Puls}}{HW\tau} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1.5} e^{-2\left(\frac{x_n-x_0}{\tau}\right)^2 - 2\left(\frac{t_l-t_0}{\tau}\right)^2}. \quad (B.3)$$

B.1 Behandlung der Grenzflächen

Abbildung B.1 verdeutlicht das Prinzip der Diskretisierung der Randbedingung 5.5. Der Übergang zwischen Silicium und Glas liegt zwischen den Zellen m mit den Zellen z_m und z_{m+1} , deren Temperaturen in der Zellmitte T_{x_n, z_m} und $T_{x_n, z_{m+1}}$ betragen. Die Temperatur am Übergang T_{x_n, z_i, t_l} ist zunächst nicht bekannt. Um sie zu bestimmen, denkt man sich zunächst das Silicium um eine Hilfsschicht mit der Dicke einer Zelle verbreitert und erhält mit der Hilfstemperatur $T_{x_n, z_{m+1}, t_l} |_{Si}$ in dieser Schicht

$$T_{x_n, z_i, t_l} |_{Si} = \frac{1}{2}(T_{x_n, z_m, t_l} + T_{x_n, z_{m+1}, t_l} |_{Si}). \quad (B.4)$$

Ebenso kann man sich das Glas verbreitert denken und entsprechend die Temperatur

$$T_{x_n, z_i, t_l} |_{Glas} = \frac{1}{2}(T_{x_n, z_m, t_l} |_{Glas} + T_{x_n, z_{m+1}, t_l}) \quad (B.5)$$

an der Grenzfläche berechnen. Die Hilfstemperaturen $T_{x_n, z_{m+1}, t_l} |_{Si}$ und $T_{x_n, z_m, t_l} |_{Glas}$ werden so gewählt, daß die Wärmemenge, die durch die Grenzfläche tritt, für beide gedachten

Hilfsschichten gleich groß ist. Durch Diskretisierung von Gl. (5.5) erhält man dafür

$$\frac{T_{x_n, z_m, t_l} - T_{x_n, z_{m+1}, t_l} \Big|_{Si}}{T_{x_n, z_m, t_l} \Big|_{Glas} - T_{x_n, z_{m+1}, t_l}} = \frac{\lambda^{Glas}}{\lambda^{Si}} \quad (B.6)$$

Setzt man die Gln. (B.4) und (B.5) gleich, löst nach $T_{x_n, z_m, t_l} \Big|_{Glas}$ auf und setzt dies in Gl. (B.6) ein, so erhält man die Hilfstemperatur

$$T_{x_n, z_{m+1}, t_l} \Big|_{Si} = \frac{T_{x_n, z_m, t_l} (\lambda^{Si} - \lambda^{Glas}) + 2T_{x_n, z_{m+1}, t_l} \lambda^{Glas}}{\lambda^{Si} + \lambda^{Glas}} \quad (B.7)$$

Analog bestimmt man

$$T_{x_n, z_m, t_l} \Big|_{Glas} = \frac{T_{x_n, z_{m+1}, t_l} (\lambda^{Glas} - \lambda^{Si}) + 2T_{x_n, z_m, t_l} \lambda^{Si}}{\lambda^{Si} + \lambda^{Glas}} \quad (B.8)$$

Mit den so ermittelten Hilfstemperaturen berechnet sich die Temperatur der Si-Zelle (x_n, z_m) zur Zeit t_{l+1} zu

$$T_{x_n, z_m, t_{l+1}} = T_{x_n, z_m, t_l} + \frac{\Delta t \lambda_{x_n, z_m, t_l}^{Si}}{c_p \rho} \left[\frac{T_{x_n, z_{m+1}, t_l} \Big|_{Si} - 2T_{x_n, z_m, t_l} + T_{x_n, z_{m-1}, t_l}}{\Delta z^2} \right]. \quad (B.9)$$

Analog gilt für die Temperatur der Glaszelle (x_n, z_{m+1}) zur Zeit t_{l+1}

$$T_{x_n, z_{m+1}, t_{l+1}} = T_{x_n, z_{m+1}, t_l} + \frac{\Delta t \lambda_{x_n, z_{m+1}, t_l}^{Glas}}{c_p \rho} \left[\frac{T_{x_n, z_{m+2}, t_l} - 2T_{x_n, z_{m+1}, t_l} + T_{x_n, z_m, t_l} \Big|_{Glas}}{\Delta z^2} \right]. \quad (B.10)$$

Formelzeichen und Abkürzungen

Formelzeichen

A	Fläche
A, A_m	Gesamtamplitude bzw. Amplitude des m -ten Teilstrahls der Feldstärke der reflektierten Wellen
A_N, A_S	Konstanten zur Beschreibung der Nukleationsrate in der Schmelze bzw. der Bildung eines Flächenkeims
A_0, A_0^*	Amplitude der einfallenden elektr. Feldstärke bzw. deren komplex Konjugierte
b	Kornbreite
b_{fl}	Breite des aufgeschmolzenen Bereichs
B, B_m	Gesamtamplitude bzw. Amplitude des m -ten Teilstrahls der Feldstärke der transmittierten Wellen
B_t	Konstante zur Beschreibung der zeitlichen Temperaturabnahme an der Probenoberfläche
B_x, B_z	Konstante zur Beschreibung der Wärmeausbreitung in x- bzw. z-Richtung
c	Vakuumlichtgeschwindigkeit
C_{OX}	Kapazität des TFT-Gateoxids
c_p	spezifische Wärmekapazität
d	Siliciumschichtdicke
d_{lat}	Distanz zwischen den von beiden Seiten des aufgeschmolzenen Bereichs lateral in die Mitte wachsenden Körnern
d_D	Abstand Detektor-Brennebene sphärische Linse

d_S	Abstand Substrat-sphärische Linse
d_{SiN}	SiN _x -Schichtdicke
D	Energiedichte der Laserstrahlung
D_T	Diffusionskonstante der Wärmeenergie
$D_{teil}, D_{SLS}, D_{voll}$	Energiedichte, die für das Aufschmelzen einer infinitesimal dicken Oberflächenschicht, für den Einsatz des lateralen Wachstums bzw. für das Aufschmelzen der gesamte Siliciumschicht benötigt wird
E	Pulsenergie
$E_{teil}, E_{SLS}, E_{voll}$	Pulsenergie, die nötig ist für das Aufschmelzen einer infinitesimal dicken Oberflächenschicht, für den Einsatz des SLS-Prozeß bzw. für das vollständige Aufschmelzen der Si-Schicht
E_0, E_R	elektrische Feldstärke des einfallenden bzw. des reflektierten Laserstrahls
E_g	Bandlücke zwischen Valenz- und Leitungsband
E_{grenz}	Pulsenergie, ab der die Optik die Kristallisationsrate limitiert
E_{max}	Pulsenergie, ab der die Siliciumschicht aufreißt.
f	Flächenanteil der Kristalloberfläche, von dem ein auftreffendes Atom während des kristallinen Wachstums gebunden werden kann.
f_{Zyl}, f_{sph}	Brennweite der Zylinder- bzw. der sphärischen Linse
F_A, F_K	Freie Energie der Grenzfläche bzw. Kristallisation von flüssigem Si
ΔF^*	Freie Energie zur Bildung eines stabilen Nukleationskeims
g_m	Steigung der I_{DS} - V_{GS} -Kurve
h	Planksches Wirkungsquantum
h_{teil}, h_{voll}	Höhe des teilweise bzw. vollständig aufgeschmolzenen Bereichs
H	Gauß-Höhe (in x-Richtung) der Energiedichte des Laserstrahl an der Probenoberfläche
$\Delta H_a, \Delta H_c$	Schmelzenthalpie des amorphen bzw. kristallinen Siliciums.
i	Zahl der Kristallite, deren $\langle hkl \rangle$ -Richtung in die φ - Θ -Richtung orientiert sind.
I	Intensität der Laserstrahlung
I_1, I_2	Ströme des Autofokusdetektors

I_P	Strom durch die Pumpdioden des Lasers
I_0, I_R, I_A, I_T	Intensität der einfallenden, reflektierten, absorbierten bzw. transmittierten Laserstrahlung
I_{DS}	Drainstrom von TFTs
I_{off}, I_{on}	Leck- bzw. maximaler Drainstrom
k	Boltzmannkonstante
k_i	Rate, mit der Atome während des kristallinen Wachstums auf die Kristalloberfläche treffen
K	Wellenzahl der Laserstrahlung
Δl	laterale Wachstumslänge
L	Länge des TFT-Kanals
L_{Diff}	Diffusionslänge der Wärmeenergie während des Laserpulses
m	Summationsindex
n	Ladungsträgerdichte der Elektronen
n_i	intrinsische Ladungsträgerdichte
n_B, n_{Ph}	Konzentration der Bor- bzw. Phosphordotieratome
$n_{Si}, n_{SiN}, n_{Glas}$	Brechungsindex von Silicium, SiN bzw. Glas
n_x, n_z	Konstante zur Beschreibung der Verbreiterung des Temperaturprofils in x- bzw. z-Richtung
N	Zahl der Nukleationskeime
P	Leistung
Q	Wärmeenergie
r	Radius
r, r_{max}	Kristallisationsrate bzw. maximale Kristallisationsrate
R	Reflexionsvermögen
R_1, R_2	Reflexionsvermögen der Grenzfläche Luft/Silicium bzw. Silicium/Glas
S	Subschwellschwellensteigung
t_n	Zeit zwischen Start des lateralen Wachstums und homogener Nukleation
T	Temperatur

T_i	Temperatur der Grenzfläche zwischen flüssigem und festem Silicium
T_m	Schmelzpunkt von kristallinem Silicium
T_R	Konstante zur Berechnung des temperaturabhängigen Absorptionskoeffizienten
T_{Raum}	Raumtemperatur
v_{hkl}	Kristallisationsgeschwindigkeit der $\langle hkl \rangle$ -Richtungen
v_{Scan}	Geschwindigkeit, mit der die Probe während der Kristallisation bewegt wird
v_{krist}	Kristallisationsgeschwindigkeit
v_{mittel}	mittlere Kristallisationsgeschwindigkeit, während die Kristallisationsfront die ersten $0.5 \mu\text{m}$ wächst
V	Volumen
V_1, V_2	Ausgangsspannung des Autofokusdetektors
ΔV_{AF}	Differenz $V_1 - V_2$
V_{DS}, V_{GS}	Drain-, Gatespannung
V_T	TFT-Schwellschpannung
$w_{teil}, w_{voll}, w_{SLS}$	Breite des teilweise bzw. vollständig aufgeschmolzenen Bereichs; Breite des Bereichs des lateralen Wachstums
W	Breite des TFT-Kanals
W	Gauß-Breite (in y-Richtung) der Energiedichte des Lasersrahl an der Probenoberfläche
W_{Tx}, W_{Ty}	Gauß-Breiten der Temperaturprofile in x- bzw. y-Richtung
X	Abmessung des Rechengebietes in den numerischen Simulationen
Δx	Versatz der Probe in Scanrichtung zwischen zwei aufeinanderfolgenden Laserpulsen
Δx_R	Ort der Ramanmessung
X	Abmessung des Rechengebietes in den numerischen Simulationen
Δy	Versatz der Probe senkrecht zur Scanrichtung zwischen zwei aufeinanderfolgenden Laserscans
$\Delta y'$	Abweichung des Autofokuslaserstrahls am Detektor
Z	Abmessung des Rechengebietes in den numerischen Simulationen

α, α'	Absorptionskoeffizient bzw. effektiver Absorptionskoeffizient
α_0	Konstante zur Berechnung des temperaturabhängigen Absorptionskoeffizienten
α_{Th}, α_{OI}	Anteil der thermisch bzw. der optisch induzierten Ladungsträger zum Absorptionskoeffizienten
β_1, β_2	Konstanten zur Berechnung der Bandlücke E_g
γ_{LS}	freie Oberflächenenergie pro Flächeneinheit zwischen kristallinem und flüssigem Si
γ_{XS}	freie Grenzflächenenergie pro Flächeneinheit zwischen kristallinem Si und dem Substrat
δ	Phasenverschiebung zweier Wellen
ϵ_0	dielektrische Konstante des Vakuums
Θ	Polarwinkel der Polarkoordinatendarstellung
λ	Wellenlänge der Laserstrahlung
λ	Wärmeleitfähigkeit
μ	Beweglichkeit
μ_n, μ_p	Beweglichkeit der Elektronen bzw. der Löcher
ν	Frequenz der Laserstrahlung
ρ	Dichte
σ_{FL}	Absorptionsquerschnitt freier Ladungsträger
τ	Pulslänge des Laserpulses
τ_{AF}	Zeitkonstante des Autofokussystems
τ_{Auger}	Zeitkonstante für Augerrekombination
τ_{ph}	Relaxationszeit von angeregten Elektronen unter Emission von Phononen
τ_{Pl}	Zeitkonstante der Relaxation der Elektronen durch Plasmonemission und Stöße untereinander
ϕ	Winkel des Autofokuslaserstrahls mit der Probennormale
φ	Azimutwinkel der Polarkoordinatendarstellung
ω	Kreisfrequenz der Laserstrahlung
$\Delta\omega$	Ramanverschiebung

Abkürzungen

a-Si	amorphes Silicium
AMLCD	Active Matrix Liquid Crystal Display
APCVD	Atmospheric Pressure Chemical Vapor Deposition
c-Si	kristallines Silicium
EBSD	Electron Backscattering Diffraction
LPCVD	Low Pressure Chemical Vapor Deposition
MOS	Metal Oxide Semiconductor Bauelement
NDIC	Normansky Differential Contrast
TEM	Tranmissions-Elektronen-Mikroskopie
TFT	Thin Film Transistor
PECVD	Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition
poly-Si	polykristallines Silicium
REM	Raster-Elektronen-Mikroskopie
Si	Silicium
SLG	Super Lateral Growth
SLS	Sequential Lateral Solidification
ZMR	Zone Melting Recrystallization

Eigene Veröffentlichungen

Teile dieser Arbeit wurden veröffentlicht in:

1. R. B. Bergmann, J. R. Köhler, R. Dassow, C. Zaczek und J. H. Werner, *Nucleation and growth of Crystalline Silicon films on Glass for Solar Cells*, Phys. Status Solidi **166**, 587 (1998).
2. R. B. Bergmann, R. M. Hausner, N. Jensen, M. Grauvogl, L. Oberbeck, T. J. Rinke, M. B. Schubert, C. Zaczek, R. Dassow, J. R. Köhler, U. Rau, S. Oelting, J. Krinke, H. P. Strunk und J. H. Werner, *High Rate, Low Temperature Deposition of Crystalline Silicon Films for Thin Film Solar Cells on Glass*, in *Proc. 2nd. World Conf. on Photovolt. Energy Conv.*, hrsg. v. J. Schmid, H. A. Ossenbrink, P. Helm, H. Ehmman, und E. D. Dunlop (E. C. Joint Res. Centre, Luxembourg, 1998).
3. R. Dassow, J. R. Köhler, M. Grauvogl, R. B. Bergmann und J. H. Werner, *Laser-Crystallized Polycrystalline Silicon on Glass for Photovoltaic Applications*, Solid State Phen. **67-68**, 193 (1999).
4. J. R. Köhler, R. Dassow, R. B. Bergmann, J. Krinke, H. P. Strunk und J. H. Werner, *Large Grained Polycrystalline Silicon on Glass by Copper Vapor Laser Annealing*, Thin Solid Films **337**, 129 (1999).
5. Y. Helen, R. Dassow, K. Mougues, O. Bonnaud, T. Mohammed-Brahim, F. Raoult, J. R. Köhler, J. H. Werner und D. Lemoine, *Reproducible high field effect mobility polysilicon thin film transistors involving pulsed Nd:YVO₄ laser crystallization*, in *International Electron Devices Meeting 1999. Technical Digest* (IEEE, Piscataway, 1999), 297.

6. R. B. Bergmann, T. J. Rinke, L. Oberbeck, und R. Dassow, *Low-Temperature Processing of Crystalline Si Films on Glass for Electronic Applications*, in *Perspectives, Science, and Technologies for Novel Silicon on Insulator Devices*, hrsg. v. P. L. F. Hemment, V. S. Lysenko, und A. N. Nazarov, NATO Science Series 3. High Technology - Vol. 73 (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2000), 109.
7. R. Dassow, J. R. Köhler, Y. Helen, K. Mourgues, O. Bonnaud, T. Mohammed-Brahim und J. H. Werner, *Laser crystallization of silicon for high-performance thin-film transistors*, *Semicond. Sci. Technol.* **15**, 31 (2000).
8. R. Dassow, J. R. Köhler, M. Nerding, H. P. Strunk, Y. Helen, K. Mourgues, O. Bonnaud, T. Mohammed-Brahim und J. H. Werner, *Nd:YVO₄ Laser Crystallization for Thin Film Transistors with a high mobility*, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **621**, in Druck.
9. M. Nerding, S. Christiansen, J. Krinke, R. Dassow, J. R. Köhler und H.-P. Strunk, *Grain populations in laser-crystallized silicon thin films on glass substrates*, *Thin Solid Films* **383**, 110 (2001).
10. Y. Helen, R. Dassow, M. Nerding, K. Mourgues, F. Raoult, J. R. Köhler, T. Mohammed-Brahim, R. Rogel, O. Bonnaud und J. H. Werner, *High mobility thin film transistors by Nd:YVO₄-laser crystallization*, *Thin Solid Films* **383**, 143 (2001).
11. H. Toutah, B. Tala-Ighil, J. F. Llibre, A. Rahal, K. Mourgues, Y. Helen, T. Mohammed-Brahim, R. Dassow und J. R. Köhler, *Stability of Unhydrogenated Polysilicon TFTs and Structural Quality of the Channel Material*, *Thin Solid Films* **383**, 299 (2001).
12. J. H. Werner, R. Dassow, T. J. Rinke, J. R. Köhler und R. B. Bergmann, *From Polycrystalline to Single Crystalline Silicon on Glass*, *Thin Solid Films* **383**, 95 (2001).

Literaturverzeichnis

- [1] J. A. Castellano, in *Euro Display '99*, ITG/VDE/SID/Eurel (VDE-Verlag, Offenbach, 1999), 191.
- [2] T. Tsukada, in *Technology and Applications of Amorphous Silicon*, hrsg. v. R. A. Street (Springer-Verlag, Berlin, 2000).
- [3] J. B. Boyce und P. Mei, in *Technology and Applications of Amorphous Silicon*, hrsg. v. R. A. Street (Springer-Verlag, Berlin, 2000).
- [4] S. D. Brotherton, *Semicond. Sci. Technol.* **10**, 721 (1995).
- [5] J. B. Boyce, *Phys. Status Solidi A* **166**, 729 (1998).
- [6] A. Mimura, N. Konishi, K. Ono, J.-I. Ohwada, Y. Hosokawa, Y. A. Ono, T. Suzuki, K. Miyata, und H. Kawakami, *IEEE Trans. Electron Dev.* **36**, 351 (1989).
- [7] D. B. Meakin, P. A. Coxon, P. Migliorato, J. Stoemenos, und N. A. Economou, *Appl. Phys. Lett.* **50**, 1894 (1987).
- [8] F. Petinot, F. P. D. Mencaraglia, P. Legagneux, C. R. O. Huet, und D. Pribat, *J. Non-Cryst. Solids* **227-230**, 1207 (1998).
- [9] S. Takenaka, M. Kunii, H. Oka, und H. Kurihara, *Jpn. J. Appl. Phys.* **29**, L2380 (1990).
- [10] M. A. Crowder, P. G. Carey, P. M. Smith, R. S. Sposili, H. S. Cho, und J. S. Im, *IEEE Electron Dev. Lett.* **8**, 306 (1998).
- [11] R. Ishihara und M. Matsumura, *Jpn. J. Appl. Phys* **36**, 6167 (1997).

- [12] A. P. Constant, T. Witt, K. A. Bratland, H. R. Shanks, und A. R. Landin, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **557**, 683 (1999).
- [13] D. P. Gosain, T. Noguchi, und S. Usui, *Jpn. J. Appl. Phys.* **39**, L179 (2000).
- [14] *Properties of Silicon, EMIS Datareview Series No. 4* (INSPEC, London, 1988).
- [15] M. F. von Allmen, *Laser Annealing of Semiconductors* (Academic Press, New York, 1982), Seiten 43–74.
- [16] E. Rimini, in *Surface Modification and Alloying*, hrsg. v. J. N. Poate, G. Foti, und D. C. Jacobsen (Plenum Press, New York, 1983), 15.
- [17] S. M. Sze, *Semiconductor Devices*, zweite Aufl. (John Wiley, New York, 1985), Seiten 12–16.
- [18] J. G. E. Jellison und F. A. Modine, *Phys. Rev. B* **27**, 7466 (1983).
- [19] D. Bäuerle, *Laser Processing and Chemistry*, 2. Aufl. (Springer-Verlag, Heidelberg, 1996), Seiten 120–123.
- [20] M. Stehle, *J. Non-Cryst. Solids* **218**, 218 (1997).
- [21] E. J. Yoffa, *Phys. Rev. B* **21**, 2415 (1980).
- [22] A. Bhattacharyya und B. G. Streetman, *Solid State Commun.* **36**, 671 (1980).
- [23] K. G. Svantesson und N. G. Nilson, *Physica Scripta* **1978**, 405 (1978).
- [24] G. Lubberts und B. C. Burkley, *J. Appl. Phys.* **55**, 760 (1984).
- [25] W. Demtröder, *Laserspektroskopie*, 2. Aufl. (Springer Verlag, Heidelberg, 1991), Seiten 85–90.
- [26] M. Combescot, *Phys. Lett. A* **85**, 308 (1981).
- [27] J. Boneberg und P. Leiderer, *Phys. Status Solidi A* **166**, 643 (1998).
- [28] J. C. Brice, *The growth of crystals from liquids*, Band 12 aus *Selected topics in solid state physics* (North-Holland, Amsterdam, 1973), Seiten 89–97.

- [29] W. B. Hillig und D. Turnbull, J. Chem. Phys. **14**, 914 (1956).
- [30] D. Turnbull, J. Chem. Phys. **66**, 609 (1962).
- [31] J. Faust und H. John, J. Phys. Chem. Solids **23**, 1119 (1962).
- [32] F. S. Spaepen und D. Turnbull, in *Laser Annealing of Semiconductors*, hrsg. v. J. M. Poate und W. Mayer (Academic Press, New York, 1982), Seiten 15–42.
- [33] K. A. Jackson, in *Surface modification and alloying*, hrsg. v. J. M. Poate, G. Foti, und D. C. Jacobson (Plenum Press, New York, 1983), Seiten 51–79.
- [34] P. K. Weimer, Proc. IRE **50**, 1462 (1962).
- [35] R. A. Lemons, M. A. Bosch, A. H. Dayem, J. K. Grogan, und P. M. Mankiewich, Appl. Phys. Lett. **40**, 469 (1982).
- [36] M. Yamada, S. Hara, K. Yamamoto, und K. Abe, Jpn. J. Appl. Phys. **19**, L261 (1980).
- [37] T. Sameshima, S. Usui, und H. Tomita, Jpn. J. Appl. Phys. **26**, L1678 (1987).
- [38] K. Sera, F. Okumura, H. Uchida, S. Ito, S. Kaneko, und K. Hotta, IEEE Trans. Electron Devices **36**, 2868 (1989).
- [39] D. A. Kurtze, Phys. Rev. B **30**, 1398 (1984).
- [40] E. Glaser, G. Andrae, H. Bartsch, K. Drenda, und G. Goetz, Phys. Status Solidi A **94**, 781 (1986).
- [41] T. Sameshima und S. Usui, J. Appl. Phys. **70**, 1281 (1991).
- [42] J. S. Im und H. J. Kim, Appl. Phys. Lett. **63**, 1969 (1993).
- [43] G. K. Giust und T. W. Sigmon, Appl. Phys. Lett. **70**, 767 (1997).
- [44] R. Ishihara und M. Matsumura, Jpn. J. Appl. Phys. **34 Part 1**, 3976 (1995).
- [45] H. Kuriyama, T. Nohda, S. Ishida, T. Kuwahara, S. Noguchi, S. Kiyama, S. Tsuda, und S. Nakano, Jpn. J. Appl. Phys. **32**, 6190 (1993).

- [46] H. J. Kim und J. S. Im, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **358**, 903 (1995).
- [47] H. J. Kim und J. S. Im, *Appl. Phys. Lett.* **68**, 1513 (1996).
- [48] N. Nakata, C.-H. Oh, und M. Matsumura, *2000 MRS Spring Meeting* (Materials Research Society, Pittsburgh, PA, 2000).
- [49] B. Rezek, C. E. Nebel, und M. Stutzmann, *Jpn. J. Appl. Phys.* **38**, 1083 (99).
- [50] M. Matsumura, *Phys. Status Solidi* **166**, 715 (1998).
- [51] P. C. van der Wilt und R. Ishihara, *Phys. Status Solidi A* **166**, 619 (1998).
- [52] W.-C. Yeh und M. Matsumura, *Jpn. J. Appl. Phys.* **38**, 177 (1999).
- [53] R. S. Sposili und J. Im, *Appl. Phys. Lett.* **69**, 2864 (1996).
- [54] J. S. Im, R. S. Sposili, und M. A. Crowder, *Appl. Phys. Lett.* **70**, 3434 (1997).
- [55] J. S. Im, M. A. Crowder, R. S. Sposili, J. P. Loenhard, H. J. Kim, J. H. Yoon, V. V. Gupta, H. J. Song, und H. S. Cho, *Phys. Status Solidi A* **166**, 603 (1998).
- [56] A. T. Voutsas, A. M. Marmorstein, und R. Solanki, *J. Electrochem. Soc.* **146**, 3500 (1999).
- [57] G. K. Giust, T. W. Sigmon, J. B. Boyce, und J. Ho, *IEEE Electron Dev. Lett.* **20**, 77 (1999).
- [58] A. Kohno, T. Sameshima, N. Sano, M. Sekiya, und M. Hara, *IEEE Trans. Electron. Dev.* **42**, 251 (1995).
- [59] T. Sameshima, M. Sekiya, M. Hara, N. Sano, und A. Kohno, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **358**, 927 (1995).
- [60] K. Winer, G. B. Anderson, S. E. Ready, R. Z. Bachrach, R. I. Johnson, F. A. Ponce, und J. B. Boyce, *Appl. Phys. Lett.* **57**, 2222 (1990).
- [61] F. Secco d'Arragona, *J. Electrochem. Soc.* **119**, 948 (1972).
- [62] J. S. Im und H. J. Kim, *Appl. Phys. Lett.* **64**, 2303 (1994).

- [63] S. D. Broterton, D. J. McCulloch, J. P. Gowers, J. R. Ayres, und M. J. Trainor, *J. Appl. Phys.* **82**, 4086 (1997).
- [64] J. R. Koehler, R. Dassow, R. B. Bergmann, J. Krinke, H. P. Strunk, und J. H. Werner, *Thin Solid Films* **337**, 129 (1999).
- [65] W. Staudt, S. Borneis, und K.-D. Pippert, *Phys. Status Solidi A* **166**, 743 (1998).
- [66] *Produktinformation*, Elektronik Laser Systeme GmbH, Groß-Zimmern.
- [67] *Display Grade Products*, Corning, 1995.
- [68] C. Gerthsen und H. Vogel, *Physik*, 18. Aufl. (Springer-Verlag, Berlin, 1995), Seiten 569–575.
- [69] K. Kluge und G. Neugebauer, *Grundlagen der Thermodynamik* (Spektum Akademischer Verlag, Heidelberg, 1994), Seiten 291–304.
- [70] K. Stephan und F. Mayinger, *Thermodynamik*, 12. Aufl. (Springer-Verlag, Berlin, 1986), Band 1 Einstoffsysteme, Seiten 374–381.
- [71] P. D. Desai, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **15**, 976 (1986).
- [72] D. Hull und D. J. Bacon, *Introduction to dislocations*, Band 37 aus *International series on materials science and technology* (Pergamon Press, Oxford, 1984).
- [73] W. Bollman, *Crystal Defect and Crystalline Interfaces* (Springer, Berlin, Heidelberg, 1970), Seiten 143–185.
- [74] I. Kleber, H.-J. Bautsch, und J. Bohm, *Einführung in die Kristallographie* (Verlag Technik GmbH, Berlin, 1990).
- [75] I. N. Miaoulis, P. Y. Wong, S. M. Yoon, R. D. Robinson, und C. K. Hess, *J. Electrochem. Soc.* **139**, 2687 (1992).
- [76] J. S. Im, C. V. Thompson, und H. Tomita, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **74**, 555 (1987).
- [77] J. S. Im, C. K. Chen, C. V. Thompson, M. W. Geis, und H. Tomita, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **107**, 169 (1988).

- [78] D. Dutartre, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. **107**, 157 (107).
- [79] M. W. Geis, H. I. Smith, B.-Y. Tsaur, J. C. Fan, D. J. Silversmith, und R. W. Mountain, J. Electrochem. Soc. **129**, 2812 (1982).
- [80] M. W. Geis, H. I. Smith, D. J. Silversmith, und R. W. Mountain, J. Electrochem. Soc. **130**, 1178 (1983).
- [81] M. A. Bosh und R. A. Lemons, Phys. Rev. Lett. **47**, 1151 (1981).
- [82] L. Pfeiffer, A. E. Gelman, K. A. Jackson, K. W. West, und J. L. Batstone, Appl. Phys. Lett. **51**, 1256 (1987).
- [83] R. Drosd und J. Washburn, J. Appl. Phys. **53**, 397 (1982).
- [84] G. Götz, Appl. Phys. A **40**, 29 (1986).
- [85] J. Q. Broughton und G. H. Gilmer, Phys. Rev. Lett. **56**, 2692 (1986).
- [86] S. R. Phillpot, J. F. Lutsko, D. Wolf, und S. Yip, Phys. Rev. B **40**, 2831 (1989).
- [87] J. M. Blakely, *Introduction to the Properties of Crystal Surfaces*, Band 12 aus *International Series on Materials Science and Technology* (Pergamon Press, Oxford, New York, 1973), Seiten 7–19.
- [88] H.-H. Singer, Dissertation, Technische Universität Hamburg-Harburg, 1987.
- [89] M. Nerding, (private Mitteilung).
- [90] C. V. Thompson und H. I. Smith, Appl. Phys. Lett. **58**, 603 (1984).
- [91] C. V. Thompson, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. **106**, 115 (1988).
- [92] C. V. Thompson, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. **35**, 711 (1984).
- [93] J. M. Gibson, L. N. Pfeiffer, K. W. West, und D. C. Joy, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. **53**, 289 (1986).
- [94] Y. Komen und Z. A. Weinberg, J. Appl. Phys. **56**, 2213 (1984).
- [95] E. Kuroda, M. Matsuda, und M. Maki, Phys. Status Solidi A **48**, 105 (1978).

- [96] C. K. Chen, L. Pfeiffer, K. W. West, M. W. Geis, S. Darack, und G. Achaibar, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **53**, 53 (1986).
- [97] M. H. Grabow, G. H. Gilmer, und A. F. Baker, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **141**, 349 (1989).
- [98] J. A. Yater und M. O. Thompson, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 1496 (1982).
- [99] K. M. Beatty und K. A. Jackson, *J. Cryst. Growth* **211**, 13 (2000).
- [100] J. Levinson, F. R. Shepherd, P. J. Scanlon, W. D. Westwood, G. Este, und M. Rider, *J. Appl. Phys* **53**, 1193 (1982).
- [101] Y. Helen, K. Mourgues, F. Raoult, T. Mohammed-Brahim, O. Bonnaud, R. Rogel, S. Prochasson, P. Boher, und D. Zahorski, *Thin Solid Films* **337**, 133 (1999).
- [102] J. Krinke, M. Albrecht, W. Dorsch, A. Voigt, H. P. Strunk, B. Steiner, und G. Wagner, *Conference Record of the Twenty Fith IEEE Photovoltaic Specialists Conference - 1996* (IEEE, New York, 1996), 473.
- [103] F. R. Libsch und J. Kanicki, *Appl. Phys. Lett.* **62**, 1286 (1993).
- [104] C. van Berkel und M. J. Powell, *Appl. Phys. Lett.* **1987**, 1094 (1987).
- [105] M. J. Powell, *Appl. Phys. Lett.* **43**, 597 (1983).
- [106] *Gmelin Handbook of Inorganic and Organometallic Chemistry*, 8. Aufl. (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1996), Band B5b1.

Lebenslauf

Name:

Ralf Dassow

geboren am 25.02.1970 in Ludwigshafen/Rhein

Schulbildung:

1976 - 1980

Grundschule Ludwigshafen-Pfingstweide

1980 - 1989

Wilhelm-von-Humboldt-Gymnasium

Grundwehrdienst:

06/1989 - 08/1990

Fernmeldeinstandsetzung in Koblenz

Studium:

10/1990 - 03/1993

Studium der Physik an der Universität Heidelberg

04/1993 - 09/1996

Studium der Physik an der Universität Stuttgart;

Diplomarbeit: „Herstellung und Strukturierung von $\text{Cu}(\text{DCNQI})_2$ Radikalionensalzschichten“

wissenschaftliche Tätigkeit:

10/1996 - 07/1997

wissenschaftlicher Angestellter am Institut für Technische Physik des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt (DLR) in Stuttgart

08/1997- 03/2001

wissenschaftlicher Angestellter am Institut für Physikalische Elektronik (*ipe*) der Universität Stuttgart

Danksagung

Ich danke:

Herrn Prof. Dr. J. H. Werner für die freundliche Aufnahme in sein Institut, die Unterstützung und sein stetes Interesse an dieser Arbeit.

Herrn Prof. Dr. H. Hügel für die Übernahme des Mitberichtes.

Herrn Dr. J. Köhler für die intensive Unterstützung, zahlreiche Anregungen sowie für die freundschaftliche Zusammenarbeit in der Arbeitsgruppe „Laserprozesse“.

Der Arbeitsgruppe „Kristallines Silicium“, insbesondere Dr. R. B. Bergmann, Dr. R. Hausner, L. Oberbeck, T. Rinke, J. Schirmer, T. Wagner und B. Winter für die Unterstützung bei der Probenpräparation und zahlreiche fruchtbare Diskussionen.

Frau M. Nerding am Lehrstuhl für Mikrocharakterisierung der Universität Erlangen-Nürnberg für die tolle Zusammenarbeit, die zahlreichen Transmissionselektronenmikroskopaufnahmen und Elektronenrückstreuanalysen und die daraus entstandenen Diskussionen.

Den Mitarbeitern der Groupe de Microélectronique et Visualisation der Universität Rennes, insbesondere Y. Helen, K. Mourgues und T. Mohammed-Brahim für die Fertigung der Dünnschichttransistoren.

Meinen Kollegen am Institut für Physikalische Elektronik, insbesondere N. Jensen und G. Kron für die stets gute Zusammenarbeit auch zu fortgeschrittenerer Stunde.

Den Mitarbeitern der Institutswerkstatt A. Reiß, M. Schwarz und F. Scheuermann für die schnelle Hilfe bei technischen Problemen.

Herrn Dr. T. Ruckstuhl und besonders Herrn H. Dassow für wertvolle Anregungen beim Schreiben dieser Arbeit.

Meiner Freundin Stephanie.