

# Трёхмерное моделирование импульсного лазерного нагрева монокристалла кремния

**Р.И. Баталов, Р.Ф. Камалов (КФТИ ФИЦ КазНЦ РАН, Казань)**

E-mail: [batalov@kfti.knc.ru](mailto:batalov@kfti.knc.ru)

## Аннотация.

Моделирование импульсного лазерного нагрева кристаллов Si проводилось еще с 70-х годов. При этом решалось одномерное уравнение теплопроводности с распространением тепла вглубь материала аналитически или методом конечных разностей. С развитием вычислительных ресурсов стало возможным трёхмерное моделирование нагрева. Удобным пакетом для моделирования таких процессов является Comsol Multiphysics. В данной работе проводилось трёхмерное моделирование нагрева круглой Si пластины диаметром 10 мм при воздействии лазерных импульсов (10 нс) с длинами волн 355 и 532 нм с диаметром пучка 4 мм. Временная форма импульса и распределение энергии по сечению пучка задавались Гауссовыми. Получены данные по распределению температуры по времени и по поверхности и объёму кристалла Si в зависимости от величины плотности энергии импульса (W).

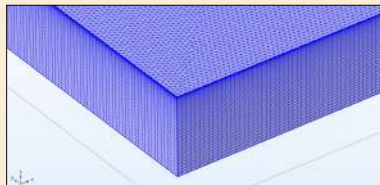
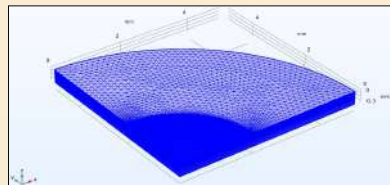


Рис. 2. Схематическое изображение вычислительной сетки по объёму Si. Размер сетки по поверхности воздействия лазерного луча на Si одинаковый, по глубине Si размер сетки уменьшается при приближении к поверхности.

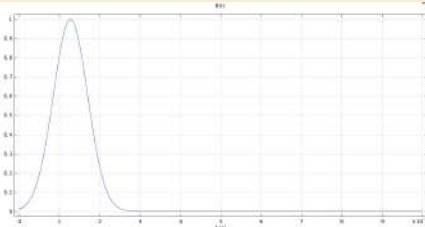


Рис. 3. Общее время расчета складывается из лазерного импульса Гауссовой формы (10нс) и времени остывания и равно 100 нс.

Equation form: Study controlled

Show equation assuming: Study 1, Time Dependent

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p u \cdot \nabla T + \nabla \cdot \mathbf{q} = Q + Q_{\text{rad}}$$

$$\mathbf{q} = -k \nabla T$$

Уравнение теплопроводности в твердой и жидкой фазах

Name	Свойство	Значение	Описание
Tm	1587(K)	1687 K	Температура плавления Si / Melting temperature
Tv	3130(K)	3138 K	Температура испарения Si / Vaporization temperature
lm	50.2134(mol)/kg	1.707165 g/mol	Удельная теплота плавления Si / Latent heat of melting
lv	3830.6(mol)/kg	3.363767 kJ/kg	Удельная теплота испарения Si / Latent heat of evaporation
Mx	28.086(g/mol)	0.028086 kg/mol	Молярная масса молекулы Si / Molar mass of silicon
D_beam	4(mm)	0.004 m	Диаметр пучка лазера / Laser beam diameter
R_beam	D_beam/2	0.002 m	Радиус пучка лазера / Radius beam diameter
R_cylind	10(mm)	0.01 m	Радиус цилиндра / Cylinder radius
E_cylind	0.81(J/cm^2)	8100 J/m^2	Плотность энергии лазерного излучения / Pulse energy density of laser
lambda	355(nm)	3.55E-7 m	Длина волны лазерного излучения / Laser wavelength
alphaSi_1	14.5(1/cm)	147.1/m	Коэффициент поглощения кремния Si для соответствующей длины волны / Absorption coefficient
alphaSi_2	0.74(1/cm)	7.471/m	Коэффициент поглощения кремния Si для соответствующей длины волны
alphaSi_3	0.125	0.0125/m	Коэффициент отражения кремния Si для соответствующей длины волны
alphaSi_4	0.72	0.72	Коэффициент отражения кремния Si для соответствующей длины волны
E_pulse	E_cylind*pi*R_cylind^2	0.10053 J	Энергия импульса / Pulse energy
r_pulse	R_cylind/R_beam	0.005167 m	Радиус цилиндра / Cylinder radius
r_pulse2	R_cylind^2/R_beam^2	8.11E-5 m^2	Площадь поверхности цилиндра / Laser pulse power density
areaSi_1	0.7	0.7	Коэффициент излучения кремния Si в окружающую среду / Emissivity from Si to the ambient
areaSi_2	0.27	0.27	Коэффициент излучения кремния Si в окружающую среду
h1	10(W/m^2K)	10 W/(m^2K)	Коэффициент теплоотдачи от Si в окружающую среду / Heat transfer coefficient from Si to the ambient
T_amb	293.15(K)	200.15 K	Температура окружающей среды / Ambient temperature
T_Si	293.15(K)	200.15 K	Начальная температура Si / Initial temperature
h11	0.35(m)	3.5E-4 m	Высота внешней исследуемой области / Height of the total region of interest
h12	50(m)	5E-6 m	Высота внутренней исследуемой области / Height of the inner region of interest
h13	200(m)	2E-6 m	Высота 3-й исследуемой области
h14	1000(m)	1E-6 m	Высота 4-й исследуемой области
W1	10(m)/2	0.005 m	Ширина полной исследуемой области / Width of the full region of interest
W2	40(m)/2	0.02 m	Ширина внутренней исследуемой области / Width of the inner region of interest
W3	40(m)/2	0.002 m	Ширина 3-й исследуемой области
W4	40(m)/2	0.0002 m	Ширина 4-й исследуемой области
k_1	47(W/mK)	47 W/(mK)	Коэффициент теплопроводности кремния Si
Alpha	2.5e-6(1/K)	2.50E-6 1/K	Коэффициент температурного расширения Si
gammaSi	7350(N/m)	0.735 N/m	Поверхностное натяжение кремния Si

Рис. 1. Исходные данные для Si и лазера для мат. модели

Equation

Show equation assuming: Study 1, Time Dependent

$$-\mathbf{n} \cdot \mathbf{q} = 0$$

Условие теплоизоляции с обратной стороны Si

Equation

Show equation assuming: Study 1, Time Dependent

$$-\mathbf{n} \cdot \mathbf{q} = q_0$$

$$q_0 = h(T_{\text{ext}} - T)$$

Тепловой поток с поверхности и боковых граней Si

Equation

Show equation assuming: Study 1, Time Dependent

$$-\mathbf{n} \cdot \mathbf{q} = \epsilon \sigma (T_{\text{ext}}^4 - T^4)$$

Тепловое излучение с поверхности и боковых граней

Beam origin point:

x	0
y	0
z	0

Distribution type: Gaussian

$$I(r, \theta) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma^2}\right) \exp\left(-\frac{\theta}{\theta_0}\right)$$

Standard deviation:  $\sigma$

Beam profile: Built-in beam profiles

Deposited beam power: 23 mW

Интенсивность излучения лазера

Equation

Show equation assuming: Study 1, Time Dependent

$$\rho = \sum_{i=1}^{N_{\text{phases}}} \theta_i \rho_i$$

$$c_p = \frac{1}{\rho} \left( \sum_{i=1}^{N_{\text{phases}}} \theta_i \rho_i c_{p,i} \right) + \sum_{i=1}^{N_{\text{phases}}-1} L_{j \rightarrow j+1} \frac{d\alpha_{m,j \rightarrow j+1}}{dT}$$

$$\alpha_{m,j \rightarrow j+1} = \frac{1}{2} \frac{\theta_{j+1} \rho_{j+1} - \theta_j \rho_j}{\theta_{j+1} \rho_{j+1} + \theta_j \rho_j}$$

$$k = \sum_{i=1}^{N_{\text{phases}}} \theta_i k_i$$

$$\sum_{j=1}^{N_{\text{phases}}} \theta_j = 1$$

Sketch

The sketch shows the function as defined for the first phase transition.

$$T_{pc, j \rightarrow j+1} - \frac{\Delta T_{j \rightarrow j+1}}{2} \quad T_{pc, j \rightarrow j+1} \quad T_{pc, j \rightarrow j+1} + \frac{\Delta T_{j \rightarrow j+1}}{2}$$

Фазовый переход – твердое тело-расплав (уравнение Хевисайда)

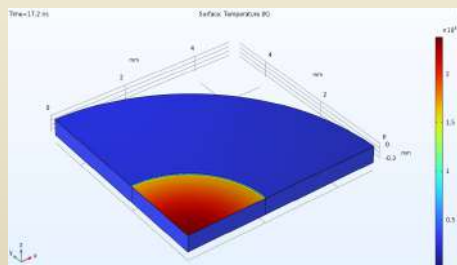


Рис.4. Нагрев сектора Si-пластины (R=5мм) УФ-лазером (3-я гарм., λ=355нм, τ=10нс, W=1.2 Дж/см²) с радиусом пучка 2мм.

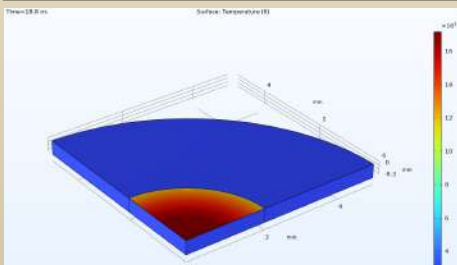


Рис.7. Нагрев сектора Si-пластины (R=5мм) зелёным лазером (2-я гарм., λ=532нм, τ=10нс, W=1.6 Дж/см²) с радиусом пучка 2мм.

## Результаты расчётов

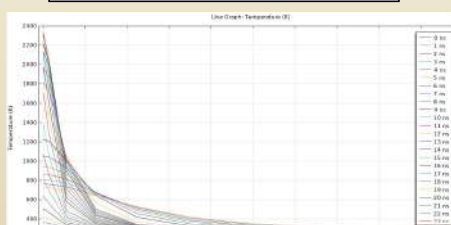


Рис.5. Распределение температуры по глубине Si в различные моменты времени (1.2 Дж/см²).

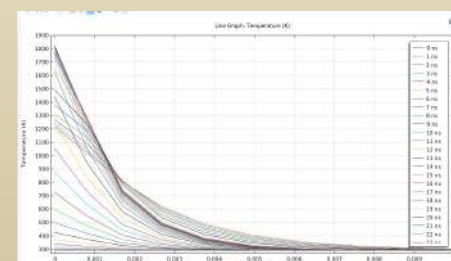


Рис.8. Распределение температуры по глубине Si в различные моменты времени (1.6 Дж/см²).

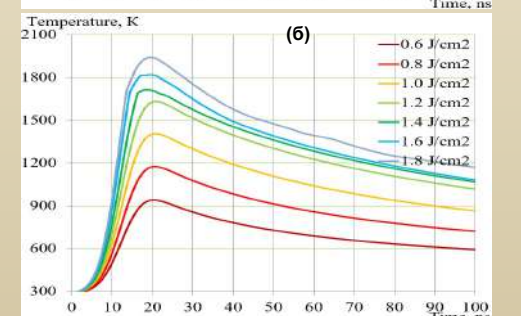
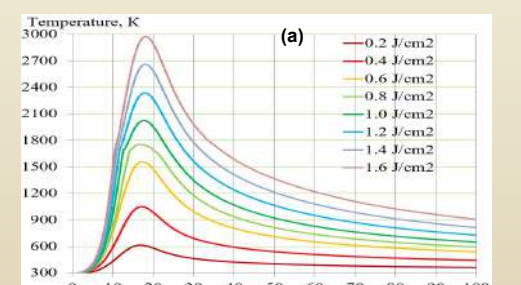


Рис.9. Распределение температуры на поверхности Si по времени при разных значениях плотности энергии: (а) λ=355нм и (б) λ=532 нм.