

# 强激光作用下半导体材料的加热与 熔融的解析计算

沈中华 陆 建 倪晓武

(南京理工大学应用物理系 南京 210094)

**提要** 根据激光加热和熔融过程中的能量守恒方程,通过假设一种符合物理和数学要求的温度分布形式,得到材料熔融前后的温度分布、熔融界面推进速度和熔融深度变化的解析解,并以硅材料为例作了计算说明。

**关键词** 激光加热与熔融,解析计算,硅材料

## 1 引 言

激光加热及熔融现象的研究对认识激光打孔、激光切割及表面热处理等激光加工技术的物理机理有极其重要的意义。许多作者用数值模拟<sup>[1,2]</sup>和解析计算<sup>[3,4]</sup>的方法从不同方面对这一过程进行了研究。数值模拟方法简单,但计算工作量大。解析计算过程较为复杂,但物理概念清晰。

本文假设一种简单的温度分布形式,通过求解能量守恒方程来分析和描述这一过程。这种方法对于处理激光加热和熔融问题可以给出简单而清晰的解释,对于实际应用也具有重要意义。

## 2 计算理论及模型

在处理激光加热和熔融问题时,为简化理论计算,假设功率密度为  $q_0$  的激光垂直辐照到均匀材料表面,采用半无穷大模型,并假设材料固态的物理参数(用下标  $s$  表示)和液态的物理参数(用下标  $l$  表示)与温度无关,根据不同温度下的一些已知实验数据取平均值。

下面分阶段进行讨论。

### 2.1 材料表面发生熔融前

设材料内温度分布形式为

$$T(x, t) = (T_w - T_0) \exp\left| -\frac{x}{W(t)} \right| \quad (1)$$

式中  $T_w$  为材料表面温度,  $T_0$  为初始温度,  $W(t)$  为温渗距离。这一温度分布形式满足  $T(0, t) = T_w$ ,  $T(\infty, t) = T_0$  边界条件为

$$-k_s \left. \frac{\partial T(x,t)}{\partial x} \right|_{x=0} = q_s \quad (2)$$

式中,  $q_s = (1 - R)q_0$ ,  $R$  为材料表面的反射率。能量守恒方程为

$$\int_0^t q_s dt = \int_0^\infty C_s \frac{d}{dx} T(x,t) dx \quad (3)$$

其中  $d$  和  $C_s$  分别为材料的固态比热和密度。由 (2) 式可得

$$W(t) = \frac{k_s(T_w - T_0)}{q_s} \quad (4)$$

由 (3) 式可得

$$W(t) = \frac{q_s t}{C_s d (T_w - T_0)} \quad (5)$$

由 (4) 和 (5) 得到表面温度分布和温渗距离

$$T_w(t) = T_0 + \frac{q_s}{\sqrt{C_s d k_s}} t^{1/2} \quad W(t) = \sqrt{\lambda_s t}$$

其中,  $\lambda_s = \frac{k_s}{C_s d}$  令  $T_w(t) = T_m$ , 就可得到材料表面到达熔点所需时间为

$$t_m = \frac{(T_m - T_0)^2 C_s d k_s}{q_s^2}$$

式中  $T_m$  为材料熔点。

值得注意的是, 表面温度的表达式与其他作者用不同的数学方法得到的表达式相似。如 A. F. Hassan<sup>[5]</sup> 等得到的表达式是

$$T_w(t) = T_0 + \frac{q_s}{\sqrt{C_s d k_s}} (4t/3)^{1/2}$$

## 2.2 材料表面开始熔融到完全熔融

为计算材料表面开始熔融到完全熔融所需的时间, 引进一判断因子  $e(t)$  ( $t_m < t < t_l$ ) 来表征表面转化成液态的比例<sup>[6]</sup>, 则有

$$dL_m \frac{\partial e}{\partial t} = T q_s$$

式中,  $T$  为材料的吸收系数,  $L_m$  为材料的熔融潜热。当  $t = t_m$  时,  $e(t) = 0$ , 当  $t = t_l$  时,  $e(t) = 1$  由此得到材料表面完全熔融的时间为

$$t_l = t_m + \frac{dL_m}{q_s T} \quad (6)$$

## 2.3 材料表面温度继续上升直至到达气化点

设液态区域的温度分布形式为

$$T_l(x,t) = (T_w - T_0) \exp\left[-\frac{x}{W_1(t)}\right]$$

固态区域的温度分布形式为

$$T_s(x,t) = (T_m - T_0) \exp\left[-\frac{x - s(t)}{W_2(t)}\right]$$

式中  $W_1(t)$  和  $W_2(t)$  分别为液态和固态的温渗距离,  $s(t)$  为固态和液态的分界面。为简单起见, 假设这是一个理想界面, 即在此固、液分界面上材料保持熔点温度不变。则有

$$T_l(s,t) = (T_w - T_0) \exp\left[-\frac{s}{W_1}\right] = T_m - T_0 \quad (7)$$

液态区域的能量守恒方程(在脉冲强激光作用下,材料的熔融深度极浅,故可忽略熔融潜热)为

$$\int_{t_l}^t q_s dt = \int_0^s dC_l [T_l(x, t) - T(x, t_l)] dx + \int_{t_l}^t - k_l \frac{\partial T_l(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=s} dt \quad (8)$$

边界条件为

$$- k_l \frac{\partial T_l(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=0} = q_s \quad (9)$$

将(7)式代入(8)式积分后得

$$q_s(t - t_l) = dC_l W_1(t) [T_w(t) - T_m] + \int_{t_l}^t \frac{k_l (T_m - T_0)}{W_1} dt \quad (10)$$

由(9)式得

$$T_w - T_0 = q_s W_1 / k_l \quad (11)$$

将(11)式代入(10)式,求导后再积分得

$$\frac{W_1}{\lambda_l} + \frac{k_l (T_m - T_0) W_1}{\lambda_l q_s} + \frac{k_l^2 (T_m - T_0)^2}{\lambda_l q_s^2} \ln [k_l (T_m - T_0) - q_s W_1] = t + C_0 \quad (12)$$

式中,  $\lambda_l = \frac{k_l}{C_l d}$ ,  $C_0$  为积分常数. 再根据  $W_1(t) = k_l (T_m - T_0) / q_s$ , 将(12)式化简后得

$$W_1(t) = \left| \lambda_l t + \frac{k_l^2 (T_m - T_0)^2}{q_s^2} - \lambda_l t_l \right|^{1/2} \quad (13)$$

将(13)式代入(11)式得到材料表面的温度分布

$$T_l(0, t) = T_0 + \frac{q_s [\lambda_l (t - t_l) + \frac{k_l^2 (T_m - T_0)^2}{q_s^2}]^{1/2}}{k_l} \quad (14)$$

令  $T_l(0, t) = T_v$ ,  $T_v$  为材料的气化温度. 代入上式得到材料表面达到气化所需的时间

$$t_v = \frac{k_l^2}{q_s^2 \lambda_l} [(T_v - T_0)^2 - (T_m - T_0)^2] + t_l \quad (15)$$

固态区域的能量守恒方程为

$$\int_{t_l}^t - k_s \frac{\partial T_s}{\partial x} \Big|_{x=s} dt = \int_s^\infty dC_s [T_s(x, t) - T(x, t_l)] dx \quad (16)$$

求导化简后得

$$W_2(t) = (2\lambda_s t + C_1)^{1/2} \quad (17)$$

当  $t = t_l$  时, 有  $T_s = (T_m - T_0) \exp \left[ - \frac{x}{\sqrt{\lambda_s t_l}} \right]$ , 代入(15)式得

$$W_2(t) = (2\lambda_s t - \lambda_s t_l)^{1/2} \quad (18)$$

界面移动方程为

$$dL_m \frac{ds(t)}{dt} = k_s \frac{\partial T_s(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=s} - k_l \frac{\partial T_l(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=s} = \frac{k_l (T_m - T_0)}{W_1(t)} - \frac{k_s (T_m - T_0)}{W_2(t)} \quad (19)$$

即固、液界面向前推进的速度为

$$v(t) = \frac{(T_m - T_0)}{dL_m} \left| \frac{k_l}{W_1(t)} - \frac{k_s}{W_2(t)} \right| \quad (20)$$

将  $W_1(t)$ ,  $W_2(t)$  的表达式代入上式并根据初始条件  $s(t_l) = 0$ , 可以得到界面位置随时间的变化

$$s(t) = \frac{2k_l (T_m - T_0)}{dL\lambda_l} \left| \sqrt{\lambda_l (t - t_l) + \frac{k_l^2 (T_m - T_0)^2}{q_s^2}} - \frac{k_l (T_m - T_0)}{q_s} \right| -$$

$$\frac{k_s(T_m - T_0)}{dL\lambda_s} \left| \sqrt{2\lambda_s t} - \lambda_s t_i - \sqrt{\lambda_s t_i} \right| \quad (21)$$

### 3 计算实例

为对上面的讨论作一说明,下面以硅材料为例作一计算。假设脉宽为 15 ns,波长为  $1.06\mu\text{m}$ ,功率密度为  $a_0 = 1.9 \times 10^8 \text{ W/cm}^2$  的激光垂直辐照到硅材料表面,硅材料的物理参数选择来源于文献 [7],列入表 1 环境温度取 300 K

图 1~4 给出了部分计算结果,图 1 的结果与文献 [5] 得到的结果近似,说明这一理论计算模型的可靠性。材料表面在 4.9 ns 左右到达熔点,在 6.2 ns 左右到达气化点温度。从图 2 可以看出,在这一段时间内材料的熔融界面向里推进约 84 nm 左右。从图 3 可以看出,在熔融界面逐渐向里推进的过程中,由于随着熔融深度的增加,越来越多的激光能量被液态区域吸收,使其温度迅速升高,致使到达熔融界面的能量相应减少,因而熔融速度随时间减小。

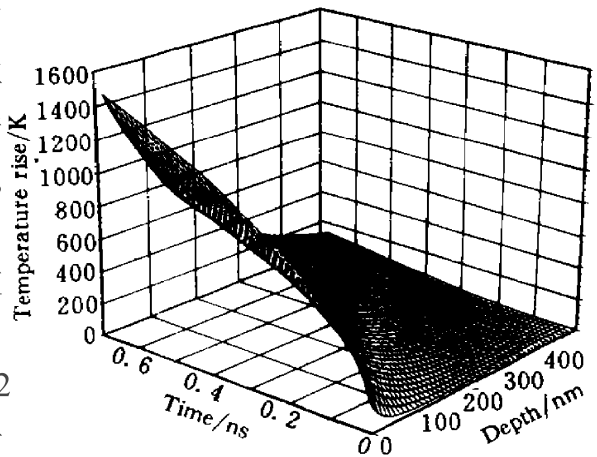


图 1 表面到达熔点之前材料内的温度分布  
Fig. 1 Temperature distribution in a material before melting occurs

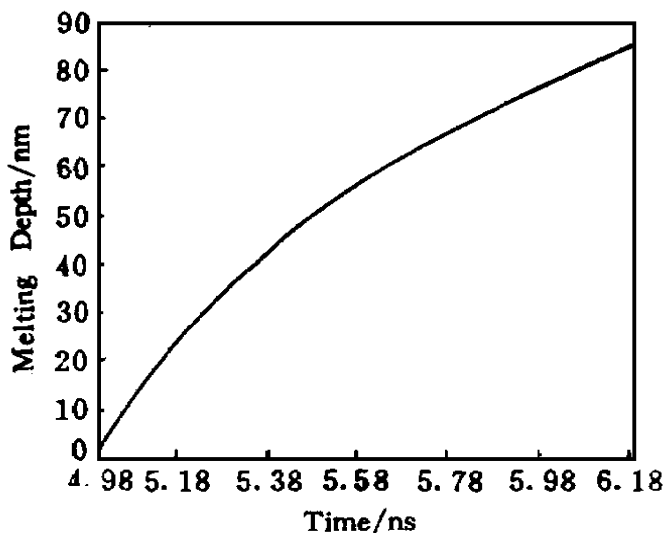


图 2 熔融界面的移动

Fig. 2 Melt-front movement vs time

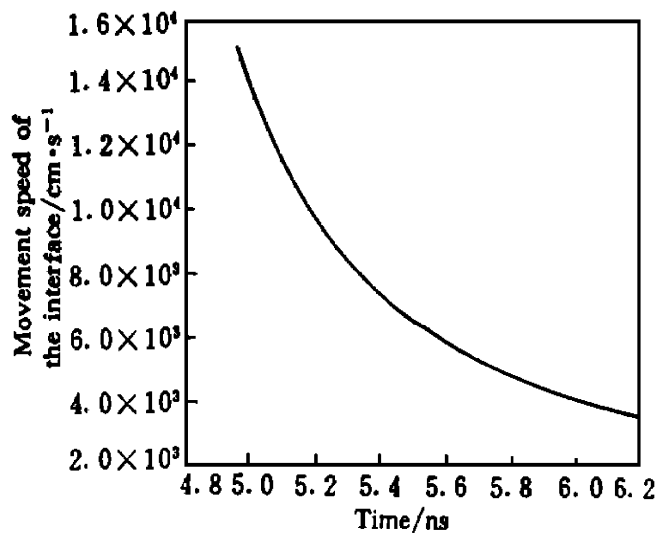


图 3 熔融界面的移动速度

Fig. 3 Movement speed of the melt-front

表 1 硅材料的物性参数

Table 1 The physical parameters of silicon

$d_s / \text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$	$d_l / \text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$	$C_s / \text{J/g} \cdot \text{K}$	$C_l / \text{J/g} \cdot \text{K}$	$k_s / \text{W/cm} \cdot \text{K}$	$k_l / \text{W/cm} \cdot \text{K}$	$R$
2.33	2.53	0.95	0.97	1.4	0.6	0.52

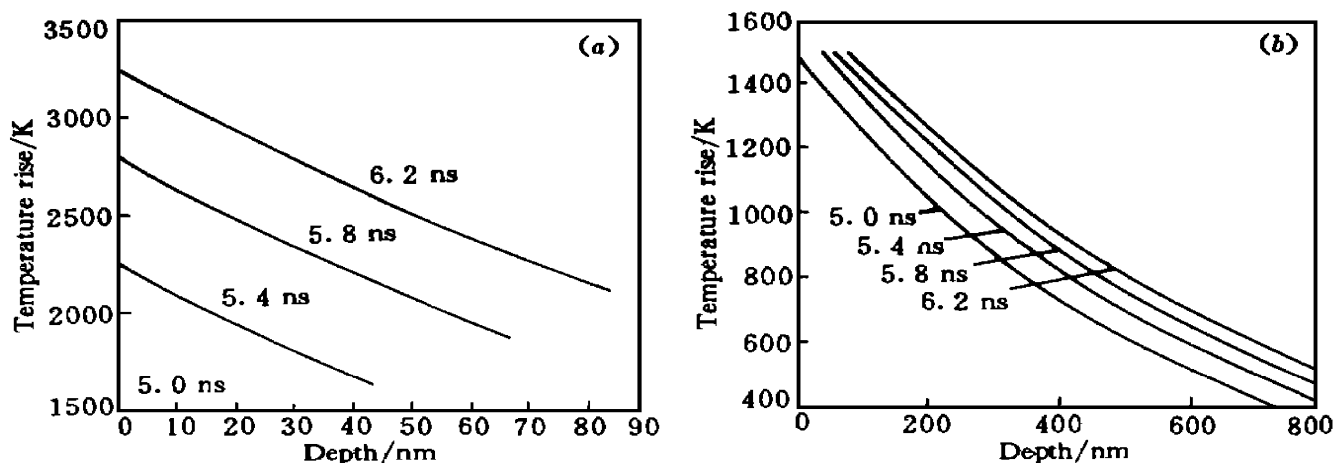


图 4 表面开始熔融以后材料内的温升分布。(a) 液态区域;(b) 固态区域

Fig. 4 Temperature rise in a material after melting occurs. (a) liquid state zone; (b) solid state zone

### 参 考 文 献

- 1 Wei Zaifu, Cha Hongkui, Wang Runwen. Physical analysis of the laser-induced temperature field. *Acta Optica Sinica* (光学学报), 1994, **14**(4): 355~ 359 (in Chinese)
- 2 Tao Yingxue, Shen Rongjun, Guan Jeli *et al.*. Numerical simulation of laser ablation and a calculating method for tracking phase boundary. *Chinese J. Computational Phys.* (计算物理), 1996, **13**(1): 14~ 20 (in Chinese)
- 3 Li Haoping, Wang Li, Cai Qingkui. A laser heating analytical model. *Laser Technology*(激光技术), 1991, **15**(2): 122~ 125 (in Chinese)
- 4 El-Adawi M. K., Elshehawey E. F.. Heating a slab induced by a time-dependent laser irradiance— An exact solution. *J. Appl. Phys.*, 1986, **60**(7): 2250~ 2255
- 5 A. F. Hassan, M. M. El-Nicklawy, M. K. El-Adawi *et al.*. A general problem of pulse laser heating of a slab. *Optics & Laser Technology*, 1993, **25**(3): 155~ 161
- 6 P. M. Beckett. High-intensity laser induced vaporization without internal superheating. *J. Appl. Phys.*, 1985, **58**(8): 2943~ 2948
- 7 R. F. Wood, C. W. White. *Semiconductors and Semimetals*. Orlando Florida: Academic Press INC, 1984. Chap 4

## An Analytical Solution to the Problem of Laser-induced Heating and Melting of Semiconductors

Shen Zhonghua Lu Jian Ni Xiaowu

(Department of Applied Physics, Nanjing University of Science & Technology, Nanjing 210094)

**Abstract** An analytical method for treating the problem of the laser heating and melting is developed by suggesting a simple and reasonable temperature profile form. Temperature distribution in a material before melting as well as after melting is given and the movement of the phase interface is also obtained. As an illustrative example, computations are carried out on a silicon material and the results are in good agreement with those obtained by other authors.

**Key words** laser-induced heating and melting, analytical solution, silicon material