

doi: 10.3788/gzxb20124105.0571

连续激光辐照 GaAs 材料损伤的数值模拟计算

李娟¹, 孙文军¹, 孙京南¹, 赵立萍², 李孟洋¹, 支洪武¹

(1 哈尔滨师范大学 光电带隙材料教育部重点实验室; 黑龙江省先进功能材料与激发态重点实验室;
物理与电子工程学院, 哈尔滨 150025)

(2 牡丹江师范学院 物理系, 黑龙江 牡丹江 157012)

摘要: 基于热传导理论, 构建了高斯分布的连续激光辐照 GaAs 材料的二维轴对称非稳态物理模型, 且利用多物理场直接耦合分析软件 COMSOL Multiphysics 求解热传导方程得到了材料表面温度分布曲线以及光斑中心处温度沿厚度方向分布曲线, 并得出 GaAs 材料的分解损伤时间与入射光功率密度的关系曲线. 研究表明, 在连续激光辐照下, GaAs 材料可能会发生分解损伤, 激光功率越高, 材料被破坏所需的时间越短. 理论计算结果与相关的实验结论一致, 说明所建立的激光辐照效应模型具有科学性.

关键词: 激光辐照效应; 高斯光束; 温度场; 损伤阈值

中图分类号: O437

文献标识码: A

文章编号: 1004-4213(2012)05-0571-4

了该理论模型的合理性, 更接近于实际, 更有意义.

0 引言

砷化镓是一种重要的化合物半导体材料, 该材料目前被广泛用于制作半导体激光器、发光二极管、光电探测器等. 砷化镓受到激光辐照时, 由于材料的吸收和热传导, 材料温度升高及形成温度梯度, 进而在材料表面引起热变形, 从而影响器件的性能. 因此求解激光光束辐照砷化镓材料时材料的温升是很有必要的, 同时也为研究材料的热应力场分布奠定了基础. 在一定边界条件下激光辐照样品的热传导方程的求解方法, 可以分为解析求解^[1-3]和数值求解^[4]两种. 数值求解法如有限差分、有限元、快速傅里叶变换等. 但目前对受激光辐照的 GaAs 材料进行求解时往往是只考虑了材料表面的热传导而忽略了热对流^[5]和热辐射且很难考虑到材料的热物性参量随温度的变化.

本文建立的物理模型综合考虑了激光与物质作用过程中产生的三种主要的热传递方式(热传导、热对流、热辐射)与砷化镓材料热物性参量随温度变化. 利用基于有限元的多物理场直接耦合分析软件 COMSOL Multiphysics^[6]求解了高斯分布的连续激光辐照 GaAs 材料的热传导方程, 得到了较为精确的数值解, 并进行了损伤机理分析. 研究结果表明

1 理论模型

激光辐照砷化镓材料时, 由于砷化镓材料对激光能量的吸收, 造成激光能量在材料中的热沉积, 材料加热产生温升, 温度分布可以通过求解 Fourier 热传导偏微分方程得到. 对于各向同性的均匀介质, 经典的 Fourier 热传导偏微分方程可以表示为^[7-8]

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla \cdot (k \nabla T) = Q \quad (1)$$

式中: T 为温度; t 为时间; ρ 为材料的密度; C 为材料的比热; k 为材料的热导率; Q 为热源项. 令高斯分布的激光光束垂直入射于材料表面, 如图 1 所示

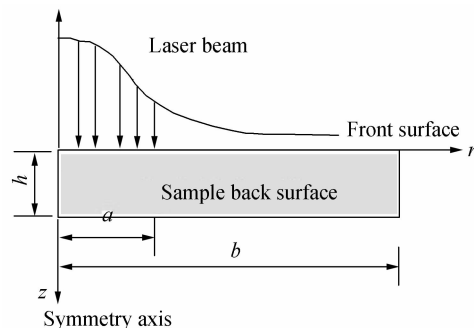


图 1 激光辐照 GaAs 材料的温升效应模型
Fig. 1 Temperature rise model of GaAs irradiated by laser

基金项目: 黑龙江省青年基金(No. QC06C043)、哈尔滨青年基金(No. 2006RFQXG055, No. 08XYS-01)、黑龙江省教育厅骨干教师项目(No. 1251G031)、哈师大预研项目(No. 08XYS-01)和黑龙江省研究生创新科研基金项目(No. YJSCX2011-414HLJ)资助

第一作者: 李娟(1985—), 女, 硕士研究生, 主要研究方向为光和物质作用. Email: yueru618@163.com

导师(通讯作者): 孙文军(1975—), 男, 教授, 主要研究方向为显示技术与半导体光电子学. Email: swjgood0139@sina.com

收稿日期: 2011-12-13; **修回日期:** 2012-02-13

的柱坐标系,坐标原点在样品的激光入射表面中心, z 为材料的纵向, r 为材料的径向,激光照射方向延 z 轴方向, a 为入射激光的光斑半径.

则式(1)在柱坐标系下可表示为

$$\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{Q}{k} = \frac{\rho C}{k} \frac{\partial T(r, z, t)}{\partial t} \quad (2)$$

考虑激光束在材料内传播产生的热效应,令模型中的热源为

$$Q = \alpha(1-R)I_0 \exp\left(-2\frac{r^2}{a^2}\right) \exp(-\alpha z) \quad (3)$$

式(3)中 α 是材料对波长为 $1.06 \mu\text{m}$ He-Ne 连续激光的吸收系数, I_0 为激光中心功率密度, R 为材料表面反射率, r 为材料表面距入射光中心距离.

初始条件为 $T|_{t=0} = T_0 = 293\text{K}$,样品侧表面绝

热满足 $\left.\frac{\partial T}{\partial r}\right|_{r=b} = 0$,下表面绝热满足 $\left.\frac{\partial T}{\partial z}\right|_{z=l} = 0$,上表面和空气之间自由对流及材料表面向周围环境热辐射满足

$$K \left.\frac{\partial T}{\partial z}\right|_{z=0} = h(T' - T(r, 0, t)) + \varepsilon\sigma(T_0^4 - T^4(r, 0, t)) \quad (4)$$

式(4)中: T 为 GaAs 材料的温度; h 为表面换热系数, ε 为材料表面辐射率, σ 为斯特藩常量, T' 为 GaAs 材料周围的空气温度,一般与材料的初始温度 T_0 相同.

数值模拟所用到的相关激光参量和材料参量为:He-Ne 激光器输出连续激光波长为 $1.06 \mu\text{m}$,激光强度成高斯分布且光斑半径为 $a = 0.027 \text{ cm}$,激光中心功率密度 $I = 1100 \text{ W/cm}^2$. GaAs 材料的几何尺寸为:半径 $r = 0.12 \text{ cm}$,厚度 $h = 0.035 \text{ cm}$. 由此对模型进行网格剖分,如图 2,三角形网格中节点共 625 个,三角形网格共有 1168 个, GaAs 材料热物性参量如表 1.

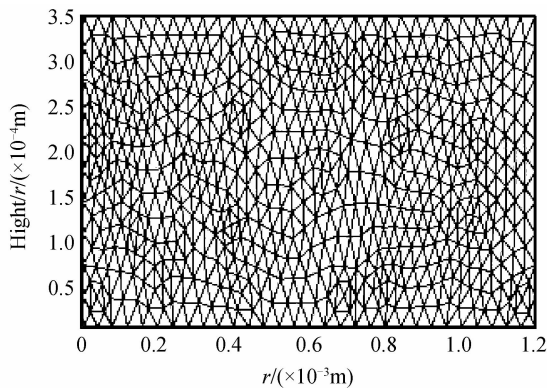


图 2 物理模型的网格剖分
Fig. 2 Grid of physical model

表 1 GaAs 材料的热物性参量

Table 1 Thermal physical parameters of GaAs

| Parameter | Value or expression |
|---|---|
| Density $\rho/(\text{g} \cdot \text{cm}^{-3})$ | 5.31 |
| Thermal conductivity $k/(\text{W} \cdot \text{cm} \cdot \text{K}^{-1})$ | $0.425(300/T)^{1.1}$ |
| Heat capacity $C/(\text{J} \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$ | $0.307 + 7.25 \times 10^{-5} T$ |
| Coefficient of heat transfer $h/(\text{W} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{K})$ | 0.01 |
| Thermal radiation rate/ ε | 0.1 |
| Decomposition temperature/K | 800 |
| Energy gap E_g/eV | $1.575 - 0.15T/300$ |
| Absorption coefficient α/cm^{-1} | $10 \exp(1.49(1.17 + 1.43 - E_g - 1.38))$ |
| Reflectivity R | 0.3 |
| Initial temperature T_0/K | 293 |

2 数值模拟结果与讨论

2.1 GaAs 材料温升分布规律

分析可知,用多物理场直接耦合分析软件 COMSOL Multiphysics 对砷化镓材料受激光辐照引起的温度变化进行了计算. 高斯分布的激光光束作用于材料时间为 15 s 时材料上表面温度随半径的分布如图 3. 从图 3 的曲线可以得到:材料表面中心的温度最高且温升速度最快,最先达到材料的分解温度即材料的破坏是从材料中心开始的,随着径向距离的增加而温升速度逐渐降低. 还可以看到温度分布和激光功率分布相仿,近似为高斯型.

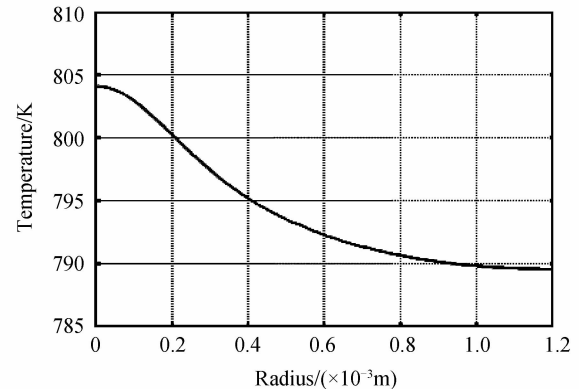


图 3 GaAs 材料上表面温度沿径向分布
Fig. 3 Temperature distribution vs radius

计算结果显示材料中心温度约为 804 K ,比砷化镓材料的分解温度^[10]略高,说明此时材料已经发生分解及砷化镓材料的分解损伤时间约为 15 s ,与之相对应的激光中心功率密度为 1100 W/cm^2 ,而相关实验^[9]中在该功率密度下材料的分解损伤时间为 14.8 s ,可见在误差允许的范围,理论计算结果

与实验结果得到了很好的对应。

当入射的激光中心功率密度为 935 W/cm^2 , 无论作用时间为多少都不能使材料的中心温度达到分解温度, 所以说理论模拟得到的激光损伤阈值为 935 W/cm^2 , 而由实验^[9]测得的激光损伤阈值约为 1000 W/cm^2 . 这一分析结果与实验^[9]是基本吻合的, 从而说明该理论模型的合理性。

激光辐照材料 15 s, 材料中心温度沿激光轴向方向变化曲线如图 4. 由图 4 可看出, 温度场沿 z 轴方向变化不明显, 即激光的入射面与出射面的温差较小. 这是因为砷化镓材料的吸收系数比较大, 相当于体热源, 穿透深度为 mm~cm 量级。

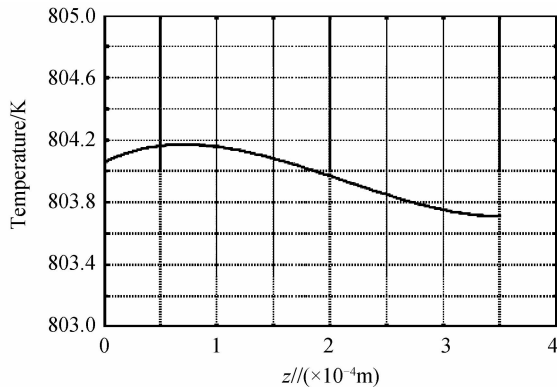


图 4 光斑中心处砷化镓温度沿 z 轴分布
Fig. 4 z -directional temperature distribution of the laser spot center

2.2 激光损伤阈值

连续激光辐照半导体材料 GaAs 时, 损伤形态表现为中心点温度超过材料的分解温度而造成材料的分解. 由前面的分析可以看出, 温度的最大值出现在材料表面的光斑中心处. 图 5 给出了分解损伤功率密度 I_{th} 与辐照时间 t 的关系曲线. 由图 5 可以看出, 辐照时间越长, 相应的分解损伤功率密度越小. 这是由于累积到同样的能量, 激光的功率密度越大, 所需时间越短。

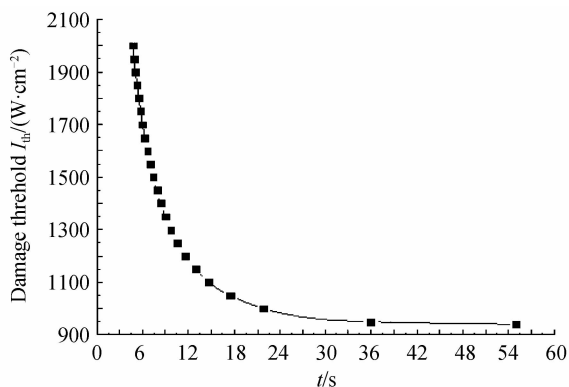


图 5 I_{th} 与辐照时间 t 的关系
Fig. 5 Damage threshold with different irradiation time

2.3 热对流和热辐射对温度场的影响

当入射的激光中心功率密度为 1100 W/cm^2 辐照材料 3 s, 材料表面中心温度变化曲线如图 6 所示, 曲线 1 为未考虑热对流和热辐射即绝热条件下材料表面中心温度变化, 曲线 2 为考虑热对流和热辐射时材料表面中心温度变化, 二者均表明随着时间的增加, 表面中心温度呈上升趋势, 但在绝热条件下温升速度要比热对流和热辐射条件下快, 这是因为材料表面存在热对流和热辐射使得能量累积速度比绝热条件下进行的慢. 由此可见, 热对流和热辐射这两种效应应该加以考虑。

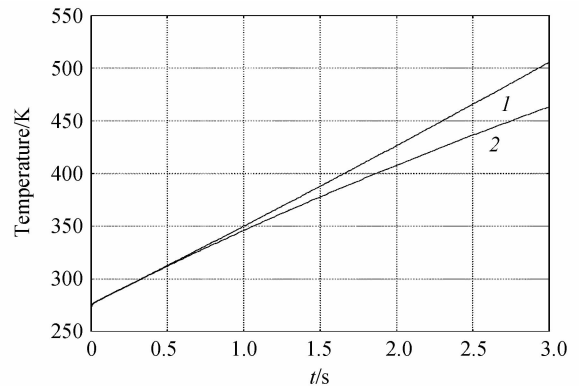


图 6 表面中心温度与时间的关系
Fig. 6 Temperature vs time

3 结论

通过建立高斯分布的连续激光辐照 GaAs 材料的二维轴对称非稳态物理模型, 并进行了数值模拟, 确定了半导体材料 GaAs 的温升分布, 并计算出相应的材料损伤阈值. 研究表明, 在连续激光辐照下, GaAs 材料可能会发生分解损伤. 激光的功率密度越高, 材料被破坏所需的时间越短. 分析结论与相关实验^[7]结果一致, 证实了所建模型的有效性. 建立的模型同样适用于同类激光损伤效应研究, 为激光对抗和激光加固的研究提供理论基础, 该模型相对于其它模型更接近于实际, 计算效率更高。

参考文献

[1] LIU Ming-qiang, LI Bin-cheng. Analysis of temperature and deformation fields in an optical coating sample [J]. *Acta Physica Sinica*, 2008, **57**(6): 3402-3409.
刘明强, 李斌成. 光学薄膜样品的温度场和形变场分析[J]. *物理学报*, 2008, **57**(6): 3402-3409.

[2] CHEN Xiao-xiao, LI Bin-cheng, YANG Ya-pei. Theory of surface thermal lens signal in optical coating with CW modulated top-hat beam excitation[J]. *Acta Physica Sinica*, 2006, **55**(9): 4673-4677.
陈潇潇, 李斌成, 杨亚培. 光学薄膜测量时平顶光束激励的表面热透镜理论模型[J]. *物理学报*, 2006, **55**(9): 4673-4677.

[3] PENG Yu-feng, SHENG Zhao-xia, ZHANG Hu, et al. Theoretical analyses of temperature distributions of solid

- materials irradiated by high power laser[J]. *High Power Laser and Particle Beams*, 2004, **16**(10): 1225-1228.
- 彭玉峰, 盛朝霞, 张虎, 等. 激光辐照下固体材料的温度分布理论研究[J]. *强激光与粒子束*, 2004, **16**(10): 1225-1228.
- [4] GUO Shao-feng, LU Qi-sheng, CHENG Xiang-ai, *et al.* Rotational effects of intensive laser window[J]. *Chin J Lasers*, 2004, **31**(2): 145-148.
- 郭少锋, 陆启生, 程湘爱, 等. 激光器窗口的旋转效应[J]. *中国激光*, 2004, **31**(2): 145-148.
- [5] 张朝晖. 热分析教程与实例解析[M]. 北京: 中国铁道出版社, 2007.
- [6] BAO Mei-fang, QIAN Zhi-yu, LI Wei-tao, *et al.* Biological tissue's temperature field during the laser-induced interstitial thermotherapy[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2011, **40**(5): 718-721.
- 包美芳, 钱志余, 李魁韬, 等. 激光诱导间质热疗中生物组织的温度场研究[J]. *光子学报*, 2011, **40**(5): 718-721.
- [7] LIU Shun-fa, CHEN Hong-bin. Calculating the temperature field of 3D object of 3D object heated by laser[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2000, **29**(3): 267-270.
- 刘顺发, 陈洪斌. 激光加热物体的三维模型计算[J]. *光子学报*, 2000, **29**(3): 267-270.
- [8] ZHAO Yuan-an, WANG Tao, ZHANG Dong-ping, *et al.* Pulsed laser induced damage model of optical coatings with absorbing inclusion[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2005, **34**(9): 1372-1375.
- 赵元安, 王涛, 张东平, 等. 脉冲激光辐照光学薄膜的缺陷损伤模型[J]. *光子学报*, 2005, **34**(9): 1372-1375.
- [9] QI Hai-feng, WANG Qing-pu, ZHANG Xing-yu, *et al.* Investigation on damage process of GaAs induced by 1064 nm continuous laser[J]. *Journal of Applied Physics*, 2008, **103**(3): 033106(4).
- [10] LI Yong-fu, QI Hai-feng, WANG Qing-pu, *et al.* 532 nm CW laser induced damage of GaAs material[J]. *Chinese Journal of Quantum Electronics*, 2007, **24**(5): 625-629.
- 李永富, 祁海峰, 王青圃, 等. 532 nm 连续激光对砷化镓材料损伤的研究[J]. *量子电子学报*, 2007, **24**(5): 625-629.

Numerical Analysis of CW Laser Damage in GaAs

LI Juan¹, SUN Wen-jun¹, SUN Jing-nan¹, ZHAO Li-ping², LI Meng-yang¹, ZHI Hong-wu¹
 (1 Key Laboratory for Photonic and Electronic Bandgap Materials(Ministry of Education); Heilongjiang Key Laboratory for Advanced Functional Materials and Excited State Processes; School of Physics and Electronic Engineering, Harbin Normal University, Harbin 150025, China)
 (2 Mudanjiang Teachers College, Mudanjiang, Heilongjiang 157012, China)

Abstract: Based on the heat conduction theory, a two-dimensional axis symmetric transient physical model was established, of which GaAs was irradiated by Gauss laser. By solving the heat conduction equations using COMSOL Multiphysics analysis software, the curve of material surface temperature and the relationship between the temperature at the center of the light spot and material thickness were obtained, and then the relationship between threshold damage time of GaAs and the incident light power density was gained. The calculation results show that the laser induced damage is mostly decomposition damage in the areas where temperature exceeds decomposition temperature of material. The theoretical analyzing result is in accordance with the relative experimental result, so the laser irradiation effect model proves correct.

Key words: Laser irradiation effect; Gauss beam; Temperature field; Damage threshold