

Разработка модели для расчета напряженно-деформированных состояний в полупроводниковых структурах при лазерном воздействии

И.В. Куликова

Текстурирование, рекристаллизация и отжиг при помощи лазеров широко применяются при создании сенсibilизированных красителем солнечных элементов (СКСЭ), жестких дисков, панелей и прочих полупроводниковых структур, позволяя управлять микрогеометрией поверхности и структурой пленок благодаря локальности термического воздействия [1 – 4]. Во многих случаях лазерный луч фокусируют в полосу, которая сканирует поверхность, а распределение плотности мощности лазера по координате x приводят к прямоугольному виду (рис. 1) [2, 3].

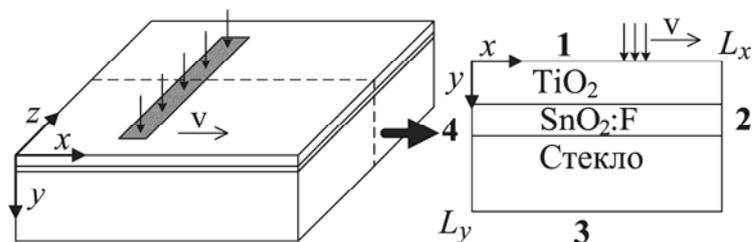


Рис. 1. – Структура СКСЭ, направление осей и нумерация границ

Однако локализация теплового воздействия приводит к большим градиентам температур в зоне воздействия лазерного луча, большим термомеханическим напряжениям и появлению дефектов. Это особенно актуально в случае с многослойными структурами, в которых пленки имеют различные термические и механические параметры, основным из которых в данном случае является коэффициент линейного расширения. Проведение экспериментальных исследований напряженно-деформированных состояний в зоне воздействия лазерного луча вызывает определенные трудности.

В настоящее время широко применяется математическое моделирование, в частности, численные методы, которые позволяют

проводить численные эксперименты и определять оптимальные параметры и режимы [3-9].

Задачу нахождения термомеханических напряжений при воздействии лазерного излучения можно разделить на две независимые:

- нахождение распределения температуры при воздействии лазерного излучения;
- нахождение механических напряжений и смещений под воздействием температурного поля.

Моделированию распределения температуры при лазерном воздействии посвящено множество работ. Однако в большинстве случаев вводят допущение о том, что лазерное излучение полностью поглощается верхним слоем [4, 6, 7]. В случае со структурой СКСЭ на основе пористого оксида титана, в которой толщины пленок составляют менее 10 мкм [1], а подложкой является стекло прозрачное для длины волны 1064 нм, это допущение не может быть использовано. Именно поэтому, необходимо использовать модель серого тела и учитывать оптические свойства всех слоев, входящих в структуру, для расчета плотности мощности поглощенного лазерного излучения [2, 3, 8].

Термоупругие напряжения, возникающие при лазерной обработке, сильно зависят от формы лазерного луча и режима воздействия, а так же от физико-топологических параметров обрабатываемой структуры. При нахождении напряжений в большинстве случаев используют двумерную модель плоского напряженного состояния [7, 9, 10]. В работе [9] напряжения рассматривались для плоскости xz (см. рис. 1), что определялось задачей, а в работах [7, 10, 11], рассматривались напряжения в плоскости xu (см. рис. 1), но задача решалась в цилиндрической системе координат, поскольку форма сечения сфокусированного луча была круглой, и луч не перемещался по поверхности структуры.

Поэтому необходима модель, позволяющая учитывать процесс сканирования подложки лазерным лучом с учетом формы сфокусированного пятна и многослойности обрабатываемой структуры.

Задачу нахождения термомеханических напряжений при воздействии лазерного излучения для данного случая можно упростить до двумерной, поскольку длина сечения лазерного луча по координате z много больше размера по x (рис. 1).

Для расчета температурного поля было использовано нестационарное двумерное уравнение теплопроводности, которое в декартовой системе координат будет иметь следующий вид:

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} - \left(\frac{\partial}{\partial x} k \frac{\partial}{\partial x} T + \frac{\partial}{\partial y} k \frac{\partial}{\partial y} T \right) = q, \quad (1)$$

где c – удельная теплопроводность; ρ – плотность; T – температура в структуре; t – время; k – коэффициент теплопроводности; q – плотность мощности источника тепла.

Источником тепла является лазерное излучение. Количество энергии лазерного излучения поглощенное серым телом может быть описано выражением Бугера-Ламберта-Бера:

$$q = a(1 - R)I_0 e^{-ay}, \quad (2)$$

где R – коэффициент отражения; a – коэффициент поглощения; I_0 – плотность мощности лазерного излучения.

Для задачи термоупругости, в случае, представленном на рис. 1, вводятся следующие допущения: в направлении оси z не может быть смещения и все компоненты деформации будут функциями только от x и y , поскольку по данной координате задача является протяженной. Данная задача сводится к двумерной задаче плоской деформации [12], для которой уравнения равновесия примут вид:

$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} = 0; \\ \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} = 0, \end{cases} \quad (3)$$

где σ_{xx} , σ_{xy} , σ_{yy} – компоненты тензора напряжения.

Поскольку задача будет решаться в напряжениях, необходимо использовать уравнения совместности [12], которые в данном случае будут сведены к следующему выражению:

$$\frac{\partial^2 \varepsilon_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varepsilon_y}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 \gamma_{xy}}{\partial xy}, \quad (4)$$

где ε_x , ε_y – продольная деформация; γ_{xy} – деформация сдвига.

Обобщенный закон Гука с учетом теплового расширения тела и вышеперечисленных допущений будет следующим:

$$\begin{cases} \varepsilon_x = \frac{1}{E} (\sigma_{xx} - \nu(\sigma_{yy} + \sigma_{zz})) + \alpha_T (T - T_0); \\ \varepsilon_y = \frac{1}{E} (\sigma_{yy} - \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{zz})) + \alpha_T (T - T_0); \\ 0 = \frac{1}{E} (\sigma_{zz} - \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})) + \alpha_T (T - T_0); \\ \gamma_{xy} = \frac{2(1+\nu)}{E} \sigma_{xy}, \end{cases} \quad (5)$$

где E – модуль Юнга; α_T – коэффициент линейного теплового расширения; T_0 – начальная температура тела.

Подставив выражение (5) в (4) и выразив напряжения σ_{zz} через σ_{xx} и σ_{yy} , с учетом уравнений равновесия (3) получим следующую систему дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \sigma_{xx}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \sigma_{xx}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \sigma_{yy}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \sigma_{yy}}{\partial y^2} + \alpha_T \frac{E}{1-\nu} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) = 0; \\ \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} = 0; \\ \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} = 0. \end{cases} \quad (6)$$

Использование уравнений 1-го порядка при дискретизации недопустимо, т.к. это приводит к неадекватным результатам [9].

Продифференцируем по x второе уравнения системы (6) и третье уравнение по y , а затем вычтем из второго уравнения третье, а так же

продифференцируем по y второе уравнения системы (6) и третье уравнение по x , а затем сложим оба уравнения, получим следующую систему:

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \sigma_{xx}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \sigma_{xx}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \sigma_{yy}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \sigma_{yy}}{\partial y^2} + \alpha_T \frac{E}{1-\nu} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) = 0; \\ \frac{\partial^2 \sigma_{xx}}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \sigma_{yy}}{\partial y^2} = 0; \\ \frac{\partial^2 \sigma_{xy}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \sigma_{xy}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \sigma_{xx}}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 \sigma_{yy}}{\partial x \partial y} = 0. \end{cases} \quad (7)$$

Начальное условие для уравнения теплопроводности (1) имеет вид:

$$T(x, y, t = 0) = T_0 \quad (8)$$

На всех гранях была задана свободная конвекция, которая описывается граничными условиями второго рода:

$$k \frac{\partial T}{\partial n} = \alpha(T - T_0), \quad (9)$$

где n – нормаль к грани; α – коэффициент конвективного теплообмена.

Граничные условия для системы (7) могут быть описаны при помощи уравнений равновесия, которые с учетом отсутствия механических воздействий для данной задачи будут иметь следующий вид [12]:

$$\begin{cases} n_x \sigma_{xx} + n_y \sigma_{xy} = 0; \\ n_x \sigma_{xy} + n_y \sigma_{yy} = 0, \end{cases}$$

где n_x, n_y – компоненты нормали к поверхности.

Подставляя соответствующие компоненты нормалей каждой грани, получим следующие граничные условия:

- для первого уравнения системы (7) на 1 и 3 гранях (см. рис. 1) $\sigma_{yy} = 0$;
- для второго уравнения системы (7) на 2 и 4 гранях (см. рис. 1) $\sigma_{xx} = 0$;
- для третьего уравнения системы (7) на всех гранях (см. рис. 1) $\sigma_{xy} = 0$.

Недостающие граничные условия для первого и второго уравнений системы (7) будут следующими: на 2 и 4 гранях $\frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial x} = 0$, а на 1 и 3 - $\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial y} = 0$.

Заключение

В работе представлена модель, позволяющая рассчитать распределение напряжения в полупроводниковой структуре под действием сканирующего лазерного излучения. Для решения системы, состоящей из уравнений (1), (2), (7) с соответствующими граничными условиями был использован метод конечных разностей. Для решения уравнения теплопроводности использовалась неявная схема. Для решения первых двух уравнений системы (7) использовался итерационный алгоритм. Что позволяет моделировать многослойные структуры с различными физическими и топологическими параметрами слоев, варьировать скорость сканирования и мощность лазерного луча. В модели, так же, внесены допущение о неизменности физических параметров слоев под действием температуры.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки России (уникальный системный номер заявки – 2014-14-576-0055-1063 в рамках ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014-2020 годы»).

Литература:

1. Малюков С.П., Саенко А.В., Рукавишникова А.С., Куликова И.В., Теоретическое исследование влияния толщины и структуры электрода TiO_2 на фотоэлектрические характеристики солнечного элемента [Текст] // Известия ЮФУ. Технические науки. 2012. - № 1. С. 63-71.
2. Малюков С.П., Куликова И.В., Калашников Г.В., Приступчик Н.К. Исследование влияния режимов работы Nd:YAG лазера на напряженно-деформированные состояния в обрабатываемой полупроводниковой структуре [Электронный ресурс] // «Инженерный вестник дона», 2013, № 4 Режим доступа: <http://www.ivdon.ru/magazine/archive/n4y2013/2000> (доступ свободный) – Загл. с экрана. – Яз. Рус.

3. С.П. Малюков, И.В. Куликова, Калашников Г.В. Моделирование процесса лазерного отжига структуры «кремний-стекловидный диэлектрик» [Текст] // Известия ЮФУ. Технические науки. 2011. - № 7. - С. 182-188.

4. Shakeel Safdar, Lin Li, M.A. Sheikh, Zhu Liu. Finite element simulation of laser tube bending: Effect of scanning schemes on bending angle, distortions and stress distribution [Text] // Optics & Laser Technology 39 (2007) pp. 1101 – 1110.

5. Малюков С.П., Куликова И.В., Петерс С.И.. Разработка модели взаимодействия лазерного излучения с биологическими тканями [Электронный ресурс] // «Инженерный вестник дона», 2013, № 4 Режим доступа: <http://www.ivdon.ru/magazine/archive/n4y2013/1999> (доступ свободный) – Загл. с экрана. – Яз. Рус.

6. M. Mamat, N. Tofany, A. Kartono. Numerical Analysis of Heat Conduction and Phase Transformation in Laser Transformation Hardening: Influences of Heating Duration and Laser Beam Intensity [Text] // Applied Mathematical Sciences, Vol. 4, 2010, no. 61, pp. 3019 – 3033.

7. В.И. Мажукин, В.В. Носое, U.Semmler. Исследование тепловых и термоупругих полей в полупроводниках при импульсной обработке [Текст] // Матем. моделирование, 12:2 (2000). - С. 75–83.

8. Малюков С.П., Куликова И.В. Бростилов С.А. Моделирование теплового воздействия лазерного излучения на биологические ткани [Текст] // Фундаментальные исследования. Часть 2, 2012. - № 11. - С. 425-429.

9. Рындин Е.А., Рыжук Р.В., Исаева А.С. Математическая модель механических напряжений, инициированных лазерным импульсом [Текст] // Фундаментальные исследования, 2012. - №.11. - С.609 - 614

10. W.-S. Kim, L. G. Hector, R. B. Hetnarski. Thermoelastic stresses in a bonded layer due to repetitively pulsed laser radiation [Text] // Acta Mechanica 125, (1997). Springer-Verlag, pp. 107-128

11. B. S. Yilbas & N. Ageeli (2006) Thermal Stress Development Due to Laser Step Input Pulse Heating [Text] // Journal of Thermal Stresses, 29:8, pp. 721-751 To link to this article: <http://dx.doi.org/10.1080/01495730600705349>

12. Ван Цза-Де. Прикладная теория упругости [Текст] // – М: Изд-во Физ.-мат. лит., 1959. – 406 с.