

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего
образования
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра компьютерной физики и метаматериалов
на базе СФ ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН

Моделирование лазерного нагрева и плавления с учетом температурной
зависимости физических свойств образца.

АВТОРЕФЕРАТ МАГИСТЕРСКОЙ РАБОТЫ


студента 2 курса 256 группы
направления 03.04.02 Физика
физического факультета

Бахтина Дмитрия Александровича

Научный руководитель

к.ф.-м.н., доцент

должность, уч. степень, уч. звание



подпись, дата

В.И. Цой

инициалы, фамилия

Зав. кафедрой, д.ф.-м.н., профессор

должность, уч. степень, уч. звание

В.М. Аникин

подпись, дата

В.М. Аникин

инициалы, фамилия

Саратов 2020

Введение.

Многие физические задачи сводятся к решению дифференциальных уравнений в частных производных, описывающих различные виды физических полей. Почти во всех практических задачах аналитического решения не существует, и задачи решаются численно. Одним из эффективных методов численного решения подобных задач, является метод конечных элементов [1]. Этот метод достаточно сложен и трудоемок, поэтому созданы специализированные пакеты, такие как ANSYS, FEMLAB, COMSOL. Но эти системы являются коммерческими и не слишком доступны для массового пользования, например, в учебном процессе. Однако разработана свободная для распространения система решения физических задач методом конечных элементов FreeFem++, более коротко ff++ [2]. Система FreeFem++ является высоко интегрированной средой разработки (IDE). Это хороший инструмент для обучения методу конечных элементов, а также для исследований. FreeFem++ имеет современные генераторы сеток, позволяющие проводить апостериорную адаптацию сетки, что значительно улучшает эффективность и точность решения. FreeFem++ имеет в своем арсенале быстрые встроенные алгоритмы, позволяющие решать дифференциальные уравнения математической физики с помощью программ, которые могут быть написаны пользователями на C++ подобном языке высокого уровня FreeFem++. В системе используются различные типы треугольных и тетраэдральных конечных элементов. В FreeFem++ для решения двумерных и трехмерных задачи имеются эффективные средства графического отображения на дисплее и сохранения файлов в различных форматах [3-5].

Целью данной работы является овладение основными возможностями FreeFem++ и моделирование динамики температурного поля в твердом теле при нагревании лазерным лучом, в том числе при плавлении. В данной работе решается задача численного расчета температурного поля в кремниевой пластине, нагреваемой лазерным лучом.

Основное содержание работы.

В первой главе приведена общая постановка задачи теплопроводности и теплообмена. Описывается важность дополнительных условий при интегрировании дифференциального уравнения. При интегрировании дифференциального уравнения получаем бесчисленное множество различных решений. Чтобы получить из этого множества одно частное решение, соответствующее определенной конкретной задаче, необходимо иметь дополнительные данные, не содержащиеся в исходном дифференциальном уравнении теплопроводности. Этими дополнительными условиями, которые в совокупности с дифференциальным уравнением (или его общим решением) однозначно определяют конкретную задачу теплопроводности, являются начальное распределение температуры внутри тела (начальные или временные условия), геометрическая форма тела и закон взаимодействия между окружающей средой и поверхностью тела (граничные условия). Так же описываются граничные условия, которые можно задать различными способами.

Во второй главе описывается конечно-элементная формулировка численного решения дифференциальных уравнений, которая используется в пакете FreeFem++.

В третьей главе содержатся:

1- Постановка задачи и алгоритм численного решения задачи.

Ставится задача моделирования нагревания образца в виде пластины лазером. Лазерный луч принимается падающим перпендикулярно освещаемой им грани (см. рис.1). Распределение интенсивности по поперечному сечению луча считается гауссовым. Луч проникает вглубь образца и при частоте излучения, соответствующей фотону с энергией, превышающей ширину запрещенной зоны в энергетическом спектре электронов, поглощается с преобразованием энергии луча в тепло.

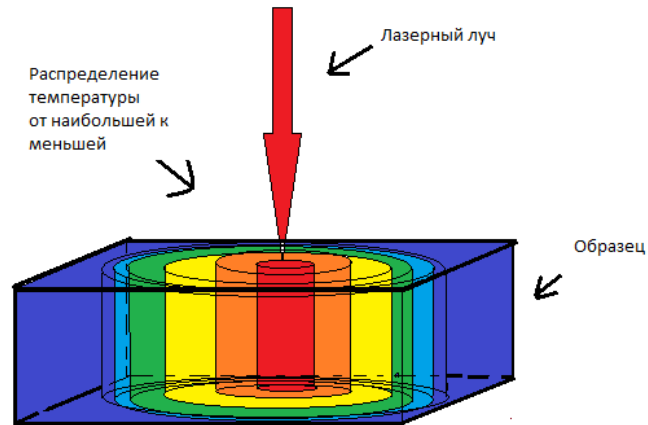


Рисунок 1.

Решается нестационарное уравнение теплопроводности[6]

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\kappa}{\rho c_v} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right) \right] + \frac{f(x,y,z)}{\rho c_v}, \quad (1)$$

где, t - время, u - температура, ρ - плотность, c_v - удельная теплоемкость, κ - коэффициент теплопроводности, $f(x, y, z)$ - функция источника.

Уравнение решается на промежутке времени, соизмеримом с характерным временем $\tau = \frac{\rho c_v l^2}{\kappa}$, где l - характерный размер образца.

После дискретизации объема образца сеткой конечных элементов и выбора шага по времени получаем следующее дискретное уравнение в слабой форме для решения по методу Галеркина:

$$\int_{\Omega} \frac{u^n}{dt} v - \int_{\Omega} \frac{u^{n-1}}{dt} v + \int_{\Omega} \kappa \nabla u^n \nabla v - \int_{\Omega} \frac{f}{\rho c_v} v = 0 \quad (2)$$

При решении задачи необходимо наложить граничные условия. Примем следующие граничные условия. При включенном источнике тепла, в нашем случае лазерном луче, падающем на пластину, температуру всех граней, кроме освещаемой грани, принимаем равной температуре окружающей среды. Такие граничные условия означают, что конвективная теплоотдача отсутствует, так как не предполагается обдувание образца, а лучистые потери пренебрежимо

малы, так как интенсивность лазерного луча на порядки превышает величину испускательной способности излучения черного тела по закону Стефана-Больцмана при температурах порядка нескольких тысяч градусов.

2.- Описание теплофизических свойств кремния

В работе построена аппроксимация теплопроводности кремния от температуры $\lambda(T) := 180 * e\left(-\left(T-\frac{19}{422}\right)^{1.5}\right)+23$ литературных данных на рис.2. для использования в вычислительной программе.

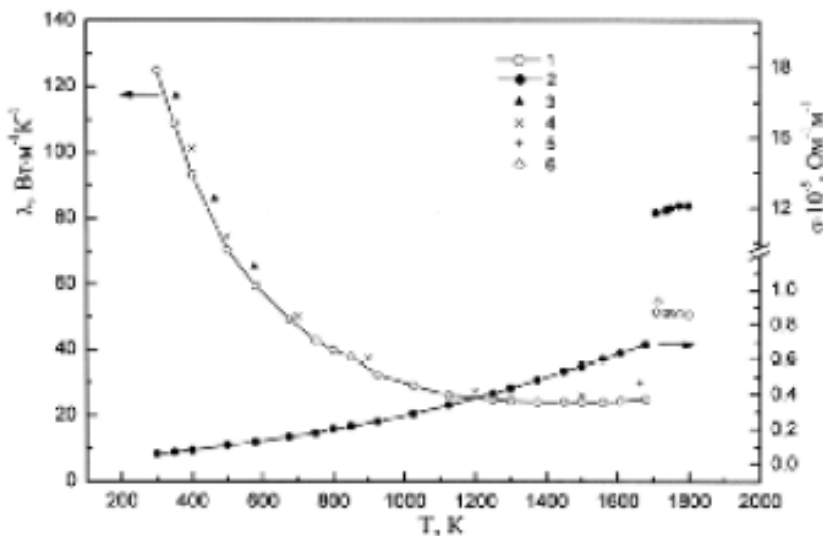


Рис. 2. Теплопроводность и электропроводность кремния

В интервале от комнатной температуры до температуры плавления можно принять следующим выражение, хорошо аппроксимирующее теплоемкость кремния в интервале от 300 K до 1500 K.[10,11]

$$C_p = 23.4 + 3.67 \cdot 10^{-3}T - 3.79 \cdot 10^5 T^{-2} \text{ Дж}/(\text{г} \cdot \text{атом} \cdot \text{град}) \quad (3)$$

Зависимость (3) теплоемкости кремния от температуры представлена на рис. 3.

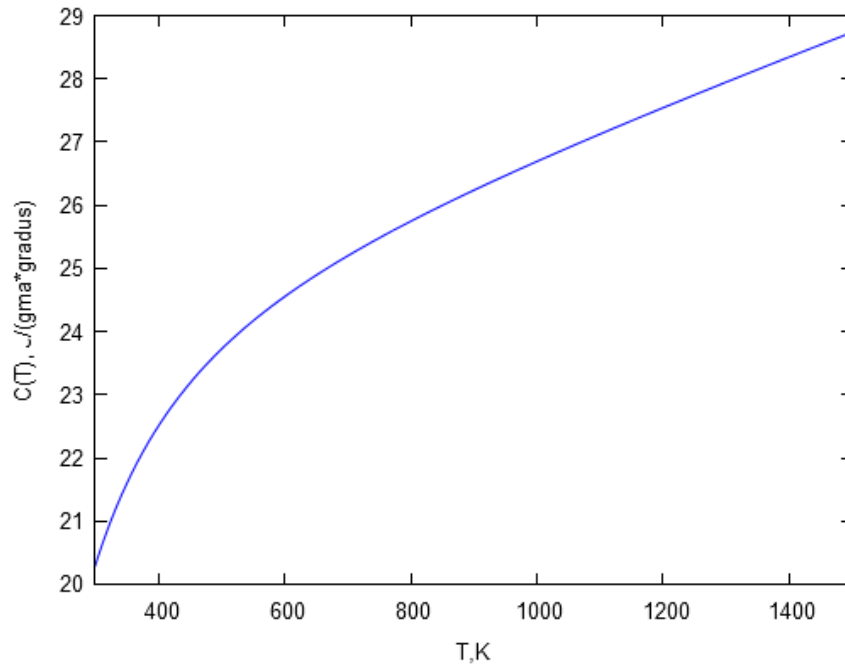


Рис. 3. Зависимость теплоемкости кремния от температуры

Сведения из разных источников о температуре плавления и теплоте плавления кремния достаточно хорошо согласуются друг с другом.

В настоящей работе температура плавления принималась равной 1680, теплота плавления равной $1.808 \cdot 10^6$, плотность кремния принималась равной 2.33 г/см^3 при 300 К для твердого состояния [15], и равной 2.47 г/см^3 для расплава. Оптические параметры жидкого кремния рассчитываются по статической проводимости. Из литературных данных следует, что отражательная способность кремния даже при высоких температурах изменяется весьма мало.

T, K	Кремний			
	$\tau, 10^{-16} \text{ с}$	n	κ	R, %
1210				СП
1685	2.0	3.2	5.4	73
2000	1.7	3.1	4.9	70
2500	1.4	3.0	4.3	66
3000	1.2	2.9	3.9	62

При температурах от комнатной до температуры плавления коэффициент отражения кремния можно принимать постоянным и равным 0.3 [9], а для расплава 0.73, при длине волны $\lambda = 630 \text{ нм}$.

Лазерно-индуцированное плавление кремния примерно двукратным возрастанием его отражательной способности R , динамика которой исследуется путем оптического зондирования облучаемой поверхности чаще всего на длине волны $\lambda = 0.63$ мкм. Такое увеличение R обусловлено фазовым переходом типа полупроводниковый кристалл-жидкий металл.

3.- Описание особенностей программы для моделирования температурного поля при плавлении лазерным лучом

Моделирование процессов нагревания существенно усложняется, если в некоторой части объема образца температура достигает точки плавления. В этом случае образуются две области, заполненные твердой и жидкой фазами и разделенные подвижной границей между ними. Задачу с подвижными границами между областями с различными физическими свойствами называют задачей Стефана.

В данной работе используются ступенчатые функции зависимости теплофизических и оптических свойств кремния от температуры, что позволяет искать решение, как единое во всей внутренней области образца. Однако вследствие того, что плотность расплава кремния приблизительно на одну десятую часть превышает плотность в кристаллическом состоянии, расплавленная часть занимает меньший объем. В итоге в окрестности нагревающего лазерного луча происходит деформация и образуется провал – «ямка». Образование провала на верхней поверхности меняет геометрию задачи и приходится перестраивать расчетную сетку, для чего предварительно необходимо принять некоторое физически правдоподобное модельное предположение о форме провала и его глубине. В данной работе считается, что изменение объема при переходе твердого кремния в расплав равно площади поверхности расплава, умноженной на изменение глубины провала. Другой существенной особенностью расчетов температурной динамики при плавлении является необходимость учета того, что в разных точках части, нагретой до точки плавления, теплота, расходуемая на плавление, доставляется от источника в разные моменты времени. Еще одна особенность состоит в том,

что вследствие зависимости теплофизических свойств от температуры скорость ее изменения существенно меняется в процессе нагревания. Таким образом, желательно предусмотреть автоматический выбор шага по времени в вычислительной схеме.

4- Программа для моделирования динамики температурного поля в кремниевой пластине при нагревании лазерным лучом.

В этом разделе представлена вычислительная программа для моделирования температурного поля в кремниевой пластине при нагревании лазерным лучом с помощью компьютерной системы решения уравнений в частных производных методом конечных элементов FreeFem++. Исходный код, представленный в дипломной работе разделен на части, каждая из которых пронумерована и прокомментирована.

В 1 части программы задаются входные данные, такие как, размеры пластины, теплопроводность и теплоемкости кремния, плотность кремния при комнатной температуре (300 К) , температуры плавления и кипения, радиус лазерного луча, энергия лазера, коэффициент отражения воздух/кремний, коэффициент поглощения при комнатной температуре, а также настраиваемые параметры для выбора шагов интегрирования по времени и размеров пространственной сетки.

Во 2 части выполняется построение горизонтальной сетки, создание цветовой шкалы и записываются температурные функции теплоемкости, плотности, коэффициента поглощения, коэффициента отражения, теплового источника и теплопроводности, включая скачкообразные изменения при температуре плавления, а также изменение профиля верхней поверхности. Кроме основной, температурно-зависимой функции теплового источника, используется функция источника с постоянными константами для создания адаптивной сетки. Эти функции понадобятся нам в дальнейшем, при создании пространства конечно-элементных функций на адаптивной 3d сетке и программирования динамики нагревания.

В 3 части программируется построение вертикальной сетки для

отображения вертикального сечения рассчитываемого температурного поля (только в интервале температур без деформации образца), программируется адаптация сетки горизонтального слоя пластины и строится адаптированная слоистая 3d-сетка из np слоев.

В 4 части выполняется дискретизация используемых для расчета и рассчитываемых на 3d сетке функций, а также строится сетка для визуализации температурного поля в вертикальном разрезе.

В 5 части определяется начальный шаг по времени в схеме решения нестационарного уравнения теплопроводности. Далее задается процедура решения уравнения. Задача кодируется в виде суммы вариационных форм, с разделением билинейной и линейной форм. Далее задаются счетчики временных шагов, общее количество шагов нагревания (чем мельче шаг, тем точнее результат), объявляются массивы моментов времени и температуры для построения примерного графика изменения температуры со временем, организуется цикл расчета температуры в объеме образца. Внутри цикла определяются точки с температурой, достигшей точки плавления, точки, в которых твердое состояние сменилось жидким и оцениваются приращения объема расплава, после чего определяется глубина осадки расплавленного участка поверхности. Далее строится 3d сетка с учетом деформации поверхности и переопределяется пространство конечно-элементных функций. В 6 части выводится график изменения температуры с течением времени вблизи точки падения нагревающего луча.

В четвертой главе содержатся результаты моделирования по разработанной программе.

Рассматривалось нагревание кремниевых пластинок с размерами $200 \times 150 \times 60$ мкм² и $100 \times 80 \times 30$ мкм² лазерным гауссовым пучком с радиусом пятна 2 мкм на длине волны 0.63 мкм.

Примеры результатов моделирования динамики нагревания лазерным лучом в отсутствие плавления и динамики остывания показаны на рис. 4-5. Интенсивность лазерного пучка 0.1 Вт/мкм² приводит к нагреванию до

температуры 340 К в течение 0.6 мс. Остывание после выключения лазера до комнатной температуры 300 К происходит за 0.06 мс.

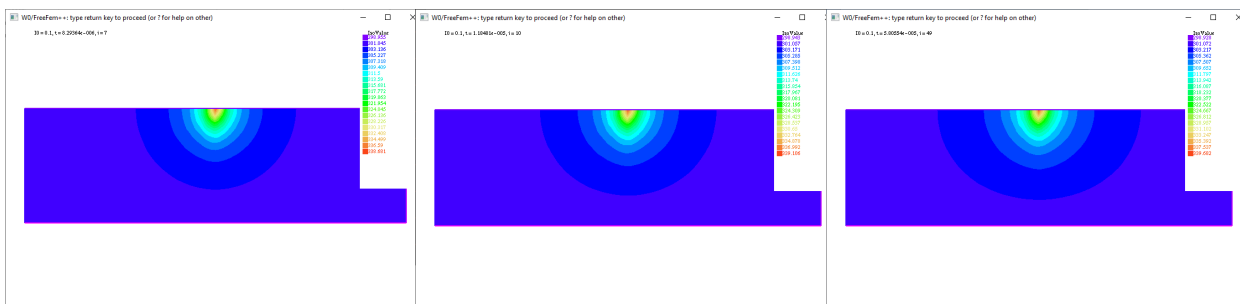


Рис. 4. Динамика распределения температуры в вертикальном сечении пластины при нагреве лазерным лучом

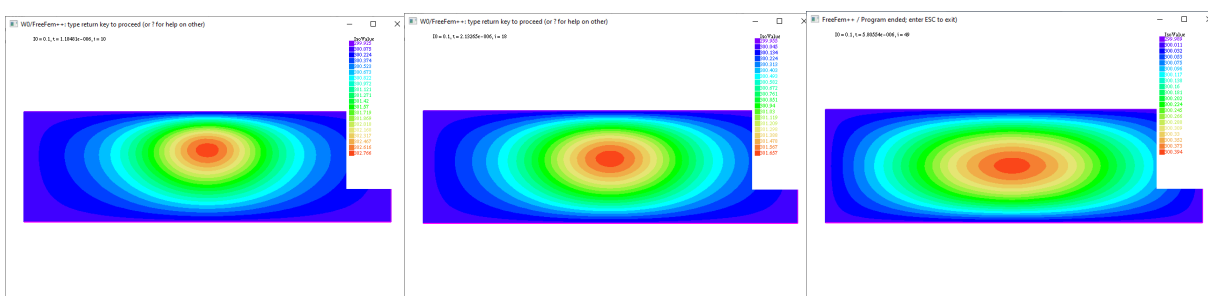


Рис.5. Динамика распределения температуры в вертикальном сечении пластины при охлаждении после нагрева лазерным лучом

Примеры результатов моделирования динамики плавления лазерным лучом представлены на рис. 6. Интенсивность принималась равной 0.5 Вт/мкм^2 , показано нагревание с плавлением в течение времени порядка 1 мс.

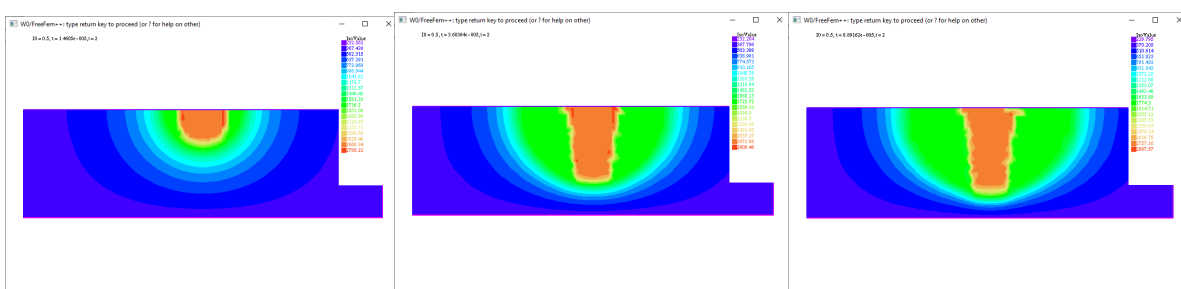


Рисунок 6.

Заключение.

В данной работе было показано, как с помощью системы FF++ можно моделировать нагревание и плавление вещества лазерным лучом с учетом температурной зависимости физических свойств образца, в нашем случае пластины из кремния.

В теоретической части работы описана общая постановка задач

теплопроводности и теплообмена. Сформулирована задача для численного решения дифференциального нестационарного уравнения теплопроводности и ее представление в конечно-элементной форме для решения методом Галеркина. По собранным из статей и справочников данным найдены и получены аппроксимации для температурных зависимостей теплофизических свойств кремния. Рассмотрена задача Стефана с подвижными границами между твердой и жидкой фазами при плавлении с использованием ступенчатых функций в общей зависимости теплофизических и оптических свойств кремния от температуры, что позволяет решать задачу, как единую всей внутренней области образца. Найден способ учета уплотнения кремния при образовании расплава в виде углубления на поверхности в окрестности падающего лазерного луча. Разработан алгоритм и составлена программа для компьютерного моделирования динамики нагревания и плавления лазерным лучом. Выполнены расчеты, показывающие возможности разработанной программы. В работе использовались источники [1-22].

Список литературы

1. Д. Норри, Ж. де Фриз. Введение в метод конечных элементов. – М: Мир, 1981. 256 с.
2. F. Hecht. Freefem++. – Paris: Universite' Pierre et Marie Curie, Third Edition, Version 3.56-2. p.418 - <http://www.freefem.org/ff++>.
3. Y. Deleuze. FreeFem++, a PDEs solver: Basic Tutorial. – Paris: Sorbonne Universite', 2013. p.70.
4. O. Pantz. An Introduction to FreeFem++. – Paris: Universite' Pierre et Marie Curie, 2011. p.62.
5. М. Ю. Жуков. Пакет конечных элементов FreeFem++ / Е.В. Ширяева. – Ростов-на-Дону: ЮФУ, 2010. 78 с.
6. Д. В. Сивухин. Общий курс физики. Термодинамика и молекулярная физика. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2014. 544 с.
7. А.Б. Мазо. Основы теории и методы расчета теплопередачи. Казань: - Казанский университет, 2013. 145 с.
8. А.Г. Коротких. Теплопроводность материалов. Томск: изд. Томского политехнического университета, 2011. 97 с.
9. Е. И. Бутиков. Оптика. СПб.: Невский диалект, 2003. 481 с

10. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание в четырех томах, под ред. В. П. Глушко. - М:Наука, 1979. 440 с.
11. Ремонт Строительство Интерьер [Электронный ресурс]: [сайт].URL: <http://industrial-wood.ru/silicidy/12628-termodinamicheskie-harakteristiki-kremniya.html>(дата обращения: 04.03.2020). Загл. с экрана. Яз. рус.
12. Я. Б. Магомедов, Г. Г. Гаджиев, С. Н. Каллаев Теплофизические свойства кремния и его расплава при высоких температурах // Вестник дагестанского научного центра журнал. 2013. № 49. С. 15–18.
13. Ивлев Г.Д., Гацкевич Е.И. Температурное изменение оптических свойств жидкой фазы при наносекундном лазерном плавлении кремния и германия // Физика и техника полупроводников. 1996. Т. 30. № 11. С. 2097–2107.
14. Все о металлургии [Электронный ресурс] : [сайт]. URL: <http://metal-archive.ru/metallurgiya-chistyh-metallov/2269-nekotorye-fiziko-himicheskie-svoystva-kremniya-i-ego-soedineniy-oblasti-primeneniya-chistogo-kremniya.html> (дата обращения: 04.03.2020). Загл. с экрана. Яз. рус.
15. New Semiconductor Materials. Biology systems. Characteristics and Properties [Электронныйресурс] : [сайт]. URL: http://www.matprop.ru/Si_optic (дата обращения: 04.03.2020). Загл. с экрана. Яз. Англ.
16. Optical Properties of Silicon [Электронныйресурс]: [сайт]. URL: <https://www.pveducation.org/pvcdrom/materials/optical-properties-of-silicon> (дата обращения: 12.03.2020). Загл. с экрана. Яз. Англ.
17. Митчелл Э., Уэйт Р. Метод конечных элементов для уравнений с частными производными. – М: Мир, 1981. 216 с.
18. Портал Thermophysics.ru информационное пространство для научной, информационной и образовательной поддержки отечественных теплофизиков [Электронный ресурс]: [сайт]. URL: https://thermophysics.ru/pdf_doc/AutoPlay/Docs/CollectionOfManuscripts/ECTP2005paper139.pdf Загл. с экрана. Яз. рус., англ.
19. Ивлев Г.Д., Гацкевич Е.И. Отражательная способность жидкой фазы в условиях лазерно-индуцированного плавления кремния // Физика и техника полупроводников. 2000. Т. 34. № 7. С. 1-4.
20. Акулов Н. А. Об одном численном методе решения одномерных задач типа Стефана // Вычислительные методы и программирование. 2011. Т. 12. С. 238-246.
21. Галанин М. П., Прошунин Н. Н., Родин А. С., Сорокин. Д. Л. Решение трехмерного нестационарного уравнения теплопроводности методом конечных элементов с учетом фазовых переходов // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. 2016. № 66. 27 с.

22. Зверев Г.М., Землянов М.М., Короннов А.А. Действие мощного импульса лазерного излучения на германиевый лавинный фотодиод // Прикладная физика. 2015. № 7. С. 79-83.