

01;11

Учет вихревых движений термоэлектрического происхождения при анализе образования структур на поверхности расплавов

© М.Н. Либенсон, В.А. Ширяев

Всероссийский научный центр "ГОИ им. С.И. Вавилова",
199034 Санкт-Петербург, Россия

(Поступило в Редакцию 24 ноября 1998 г.)

Предложена модель термоэлектрического механизма формирования поверхностных периодических структур с учетом вихревых движений расплавов. Получено аналитическое решение для динамики рельефа с учетом двумерных явлений переноса. Показано, что структуры формируются только в случае малой вязкости расплава.

Лазерное облучение конденсированных сред нередко приводит к образованию упорядоченного рельефа поверхности, обычно сохраняющегося после прекращения воздействия. Согласно [1,2], образование поверхностных периодических структур (ППС) происходит в следующей последовательности.

Падающая плоская световая волна дифрагирует на неоднородностях реальной поверхности. В случае равенства волновых векторов в дифрагированной волне и поверхностной электромагнитной волне (ПЭВ) последняя усиливается резонансным образом. Интерференция падающего излучения и ПЭВ создают пространственно-периодический тепловой источник в приповерхностном слое. Пространственно неоднородный нагрев вещества приводит к росту рельефа за счет ряда механизмов (окисление, плавление, испарение и т. д.), замыкая обратную связь.

Несмотря на проводимые уже два десятилетия интенсивные исследования условий образования ППС, далеко не все способы формирования рельефа изучены достаточно полно. Авторы продолжают начатое ранее [3,4] последовательное изучение воздействия на расплав элек-

трического давления, связанного, в частности, с возбуждением термоэдс при неоднородном лазерном нагреве поверхности. Воздействие лазерного импульса на поверхность материала приводит обычно к изменению фазового состояния приповерхностного слоя. В данной работе исследуется образование структур на поверхности тонкой пленки расплава полупроводника, перешедшего в металлическое состояние. Здесь существенна малая толщина проводящей пленки. Для массивных металлов необходимо учитывать шунтирующее действие глубоких слоев, сильно уменьшающих вклад термоэдс в процессы образования ППС.

Термоэлектрический механизм формирования структур ранее рассматривался лишь в одномерном случае [4], однако вихревая природа термоэлектрического давления приводит к необходимости введения в модель для самосогласованности уравнения Навье–Стокса с соответствующими граничными условиями.

Пусть (рис. 1) лазерное излучение воздействует на полупроводник, занимающий полупространство

$$z > \xi(x, t).$$

Образующийся в результате нагрева слой металлизированного расплава ограничен поверхностями

$$z = \xi(x, t) \quad \text{и} \quad z = H_0.$$

Полагая высоту рельефа ξ много меньше пространственного периода падающего излучения, можно проследить за эволюцией только одной гармонической составляющей рельефа, резонансной поверхностной электромагнитной волне [1,2]. Тогда

$$\xi(x, t) = h_c(t) \cos gx + h_s(t) \sin gx,$$

$$\xi(x, 0) = h_0 \cos gx.$$

Математическая модель строится с учетом того, что средняя температура T_1 меняется медленнее, чем гармоническая составляющая T_2 , причем

$$T_1 \gg T_2. \quad (1)$$

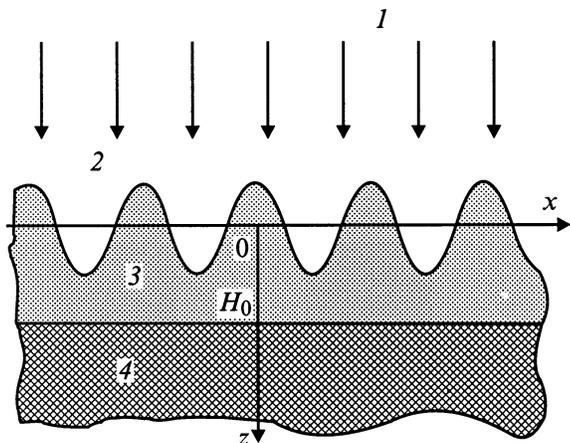


Рис. 1. К рассматриваемой задаче: 1 — лазерное излучение, 2 — воздух, 3 — металлизированный расплав полупроводника, 4 — полупроводник.

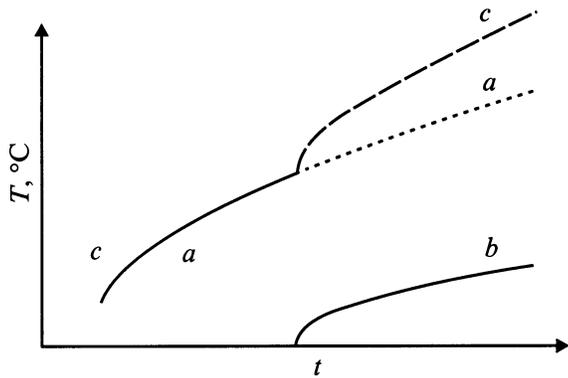


Рис. 2. Типичная зависимость температуры поверхности и ее составляющих от времени нагрева t : a — средняя температура T_1 , b — амплитуда косинусоидальной составляющей θ_c , c — суммарная температура поверхности $T_1 + \theta_c$.

Полный разогрев T записывается в форме (рис. 2)

$$T(x, z, t) = T_0 + T_1(z, t) + T_2(x, z, t), \quad (2)$$

$$T_2(x, z, t) = \theta_c(z, t) \cos gx + \theta_s(z, t) \sin gx, \quad (3)$$

где T_0 — температура окружающей среды.

Уравнения теплопроводности для T_1 и T_2 имеют вид

$$\frac{\partial T_1}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T_1}{\partial z^2} + \frac{g\alpha}{c\rho} e^{-\alpha z}, \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_2}{\partial t} = & a \frac{\partial^2 T_2}{\partial z^2} - ag^2 T_2 \\ & + 2\mu \frac{g\alpha}{c\rho} e^{-\alpha z} \left\{ h_c \cos(gx + \varphi) + h_s \sin(gx + \varphi) \right\} \\ & - v_z \frac{\partial T_1}{\partial z} \left[\mathcal{H}(z) - \mathcal{H}(z - H_0) \right]. \end{aligned} \quad (5)$$

К ним следует добавить начальные и граничные условия

$$\left. \frac{\partial T_1}{\partial z} \right|_{z=0} = \left. \frac{\partial T_2}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \quad (6)$$

$$T_1(x, z, t = 0) = T_2(x, z, t = 0) = 0, \quad (7)$$

$$T_1(x, z = \infty, t) = T_2(x, z = \infty, t) = 0. \quad (8)$$

Термоэлектрическое поле \mathbf{E} связано с температурой следующим образом:

$$\mathbf{E} = \gamma(T) \text{grad } T, \quad (9)$$

$$\gamma(T) = \Omega T. \quad (10)$$

Здесь Ω — постоянная. Гидродинамические течения описываются уравнением Навье–Стокса и уравнением непрерывности (для несжимаемой жидкости)

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \nu \nabla^2 \mathbf{v} - \frac{\nabla p}{\rho} + \frac{\mathbf{E} \text{div } \mathbf{E}}{4\pi\rho}, \quad \text{div } \mathbf{v} = 0. \quad (11), (12)$$

Использование линеаризованного уравнения Навье–Стокса (11) связано с малой амплитудой гидродинамических волн. Скорость \mathbf{v} выражается через скалярный и векторный потенциалы

$$\mathbf{v} = \text{grad } \Psi + \text{rot } \mathbf{A}, \quad (13)$$

$$v_x = \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial A}{\partial z}, \quad v_z = \frac{\partial \Psi}{\partial z} - \frac{\partial A}{\partial x}. \quad (14)$$

На свободной поверхности $z = 0$ граничные условия имеют вид

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = v_z, \quad (15)$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\sigma}{\rho} \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} - 2\nu \frac{\partial v_z}{\partial z}, \quad (16)$$

$$\frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x} = 0. \quad (17)$$

На границе с твердой фазой

$$v_x = 0, \quad v_z = 0. \quad (18), (19)$$

Учитывая, что искомые величины гармонические, можно записать

$$\Psi = \Psi_c(z, t) \cos gx + \Psi_s(z, t) \sin gx, \quad (20)$$

$$A = A_c(z, t) \cos gx + A_s(z, t) \sin gx. \quad (21)$$

В формулах (1)–(21) введены обозначения: g — пространственная частота; a — коэффициент теплопроводности расплава; q — плотность поглощенного светового потока; α — коэффициент поглощения; c — теплоемкость; ρ — плотность; μ — коэффициент преобразования света в ПЭВ; φ — фазовый сдвиг теплового источника относительно рельефа; \mathcal{H} — функция Хевисайда; \sim — знак гармонической составляющей; γ — коэффициент термоэдс; \mathbf{E} — напряженность термоэлектрического поля; Ψ , \mathbf{A} — скалярный и векторный потенциалы скоростей; ν — вязкость; p — давление; σ — коэффициент поверхностного натяжения. Система (1)–(21) решается следующим образом. Сначала находится средняя температура поверхности $T_1(z, t)$. Полученное решение в пределе $T_1 \rightarrow \infty$ подставляется в уравнение теплопроводности для $T_2(x, z, t)$ и в уравнение Навье–Стокса (11). Например, используется выражение

$$\left. \frac{\partial T_1}{\partial z} \right|_{z=\infty} = \frac{q}{\lambda} (e^{-\alpha z} - 1), \quad (22)$$

где λ — коэффициент теплопроводности.

Определяется гармоническая составляющая для произведения $\mathbf{E} \text{div } \mathbf{E}$ в уравнении Навье–Стокса. Далее, отбрасываем конвективное слагаемое в уравнении теплопроводности, полагая его малым по сравнению с членом, описывающим преобразование излучения в ПЭВ. Оценка справедливости этого допущения будет произведена позже.

Следующий шаг — преобразование Лапласа ($t \rightarrow w$) по временной переменной для всей системы. Затем находим $\theta_c(z, w)$ и $\theta_s(z, w)$ как функции $h_c(w)$ и $h_s(w)$, а результат подставляем в уравнение Навье–Стокса. Рассмотрим два случая: малой и большой вязкости.

Нас интересует решение с экспоненциальным ростом рельефа, а следовательно, и скорости. Поэтому положим, что воздействием силы трения на движение можно пренебречь, и рассмотрим нестационарный случай

$$\left| \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \right| \gg \nu |\Delta \mathbf{v}|. \quad (23)$$

Применим операцию rot к обеим частям уравнения Навье–Стокса. Тогда слагаемое

$$\left(\nabla \times \frac{\nabla p}{\rho} \right)$$

исчезнет. Полученное уравнение можно решить. Поскольку нас интересует только $h_c(w)$ и $h_s(w)$, то нам достаточно иметь только граничные условия (15) и (17). Искомый результат

$$h_c(t) = \Re h(t), \quad h_s(t) = \Im h(t), \quad (24)$$

$$\beta = \frac{\gamma}{4\pi\rho} \frac{q^2}{\lambda} \frac{\alpha^2}{c\rho} \frac{2\mu}{g}, \quad (25)$$

$$h(t) = h_0 \exp(-ag^2t) \sum_{k=1}^7 f_1(w_k) / f_2(w_k), \quad (26)$$

$$f_1(w_k) = w_k^2 (w_k^2 - \alpha^2) \exp(w_k^2 t) \operatorname{erfc}(-w_k \sqrt{t}), \quad (27)$$

$$f_2(w_k) = \frac{\partial}{\partial w} \left(2w(w^2 - a\alpha^2)(w - ag^2)^2 - \beta \left[\sqrt{a}\gamma \left(\frac{w}{\sqrt{a}} + \gamma \right)^2 - 4 \frac{\partial \gamma}{\partial T} \frac{q}{\lambda} w + \gamma \sqrt{a}\alpha \right] \exp(-i\varphi) \right) \Big|_{w=w_k}, \quad (28)$$

$$w_{1-5} = \left(\frac{\beta\gamma}{2\sqrt{a}} \right)^{1/5} e^{-i\frac{\varphi+2\pi n}{5}}, \quad n = 0, 1, 2, 3, 4, \quad (29)$$

$$w_{6,7} = \sqrt{a} \left(\frac{2}{\gamma} \frac{\partial \gamma}{\partial T} \frac{q}{\lambda} - \alpha \right) \pm \sqrt{4 \frac{a}{\gamma^2} \left(\frac{\partial \gamma}{\partial T} \right)^2 \frac{q^2}{\lambda^2} - a\alpha^2 - 2 \frac{a\alpha}{\gamma} \frac{\partial \gamma}{\partial T} \frac{q}{\lambda}}. \quad (30)$$

Полученное количество инкрементов (декрементов) связано с выбранной формой теплового источника и с тем, что в принятом приближении малой вязкости решение для динамики рельефа определяется вынужденным воздействием вихревого термоэлектрического источника давления. Разумеется, решение для поля скоростей, которое в данном случае нас не интересует, зависит от полного набора граничных условий.

Анализ полученных выражений показывает, что хотя бы один из корней w_{1-7} обеспечивает экспоненциальный рост рельефа независимо от значения электродинамического запаздывания φ , так как полученное решение относится к воздействию сильного вынуждающего поля.

Проверим справедливость сделанных приближений. Полагаем $\alpha = 10^5 \text{ cm}^{-1}$, $g = 10^4 \text{ cm}^{-1}$, $q = 10^{12} \text{ erg} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, $\lambda = 10^7 \text{ erg}(\text{s} \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{K})^{-1}$, $\rho = 5 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$, $\mu = 10^7 \text{ cm}^{-1}$, $H_0 = 10^{-5} \text{ cm}$, $a = 10^{-2} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, $\gamma = 10^{-4} \text{ V} \cdot \text{K}^{-1}$, $\partial \gamma / \partial t = 10^{-8} \text{ V} \cdot \text{K}^{-2}$, $\nu = 5 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$. Кроме того, можно считать

$$|\Delta \mathbf{v}| \sim g^2 |\mathbf{v}|, \quad |\mathbf{v}| \sim \left| \frac{\partial \xi}{\partial t} \right|, \quad (31)–(33)$$

$$\left| \frac{\partial \xi}{\partial t} \right| \sim |w_k^2 \cdot \xi|. \quad (31)–(33)$$

Используя реальные численные значения параметров системы и оценки (31)–(33), можно показать, что приближение малой вязкости и пренебрежение конвективными слагаемыми справедливы. В квазистационарном случае большой вязкости

$$\nu |\Delta \mathbf{v}| \gg \left| \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \right|. \quad (34)$$

Экспоненциально растущих решений для рельефа и скоростей ожидать здесь не следует. Непосредственные вычисления это подтверждают.

Из анализа полученного решения следует любопытный вывод о том, что динамику рельефа определяет лишь вихревое электрическое поле в объеме расплава, так как если ввести в модель дополнительно электрическое поле на поверхности расплава (возникшее, например, за счет термоэмиссии), то оно учитывается лишь в граничном условии (16), не используемом для нахождения h_c и h_s . Поле скоростей зависит, конечно, и от поверхностных зарядов.

Авторы выражают благодарность Е.Д. Эйдельману за полезные обсуждения гидродинамических аспектов проблемы.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 96-02-18783).

Список литературы

- [1] Bonch-Bruевич А.М., Либенсон М.Н. // Nonlinear Electromagnetic Surface Phenomena / Ed. H.-E. Ponath, G.I. Stegeman. North Holland: Elsevier Sci. Publ. B.V., 1991. Ch. 10. P. 561–609.
- [2] Ахманов С.А., Емельянов В.И., Коротеев Н.И., Семиногов В.Н. // УФН. 1985. Т. 147. № 4. С. 675–745.
- [3] Дорофеев И.А., Либенсон М.Н. / ЖТФ. 1995. Т. 65. Вып. 10. С. 111–118.
- [4] Дорофеев И.А., Либенсон М.Н., Ширяев В.А. // Изв. РАН. Сер. физ. 1997. Т. 61. № 7. С. 1269–1272.