

Численное моделирование лазерно-индуцированных фазовых превращений в полупроводниках

Гацкевич Е.И.

Белорусский национальный технический университет

В настоящей работе проанализированы три различных подхода в моделировании лазерно-индуцированных процессов в полупроводниковых структурах. При проведении моделирования мы ограничились фазовыми превращениями *твердое тело – расплав*. В первом подходе на границе фазового перехода задавалось условие Стефана, при котором температура на границе фазового перехода определяется равновесной термодинамической температурой плавления, а скорость движения границы фазового перехода определяется из уравнения теплового баланса. Однако, при коротких лазерных импульсах (от десятков наносекунд и меньше) фазовые превращения происходят в существенно неравновесных условиях. В этом случае температура и скорость на границе фазового перехода связаны функцией отклика (задача типа Стефана). Также известны подходы, когда процессы образования новой фазы определяются на основе уравнений теории зародышеобразования (кинетический подход).

Рассмотрено одномерное нелинейное уравнение теплопереноса с различными граничными условиями на межфазной границе. В анализе особое внимание уделялось исследованию влияния нелинейных условий на границе фазового перехода, поскольку именно этим условием определяется скорость движения межфазной границы, распределение температуры, а также время существования расплава. Проведено сравнение результатов вычислений по следующим алгоритмам: 1) классическая задача Стефана; 2) неравновесная модель, функция отклика определяется формулой Вильсона-Френкеля; 3) кинетическая модель, кинетика зародышеобразования описывается на основе решения уравнения Колмогорова. При разработке алгоритмов использовались методы конечных элементов или конечных разностей.

Проведено сравнение расчетных данных по времени существования расплава и пиковой температуре поверхности в трех постановках задачи с имеющимися экспериментальными данными. Исследовано влияние выбора модели на результаты по переохлаждению жидкой фазы. Показано, что в рамках неравновесной и кинетической моделей можно объяснить наблюдаемое экспериментально различие в кинетике лазерно-индуцированных переходов для различных ориентаций поверхности полупроводника.