



ОРДЕНА ЛЕНИНА
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
АКАДЕМИИ НАУК СССР

В.И. Мажукин, М.Д. Таран.

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ДВУМЕРНОЙ НЕСТАЦИОНАРНОЙ
ЗАДАЧИ ЛАЗЕРНОГО ПРОГРЕВА ВЕЩЕСТВА

Препринт № 9 за 1978 г.

Москва.

Ордена Ленина Институт
Прикладной математики Академии наук СССР

В.И.Мажукин, М.Д.Таран

Численное решение двумерной нестационарной
задачи лазерного прогрева вещества.

Москва, 1978г.

Численное решение двумерной нестационарной задачи лазерного прогрева вещества. В.И.Мажукин, М.Д. Таран, ИГиМ АН СССР, М. 1978г. стр. 13, библиогр. назван. 3, рис. 4, табл. 1.

Решена двумерная нестационарная задача нелинейной теплопроводности возникающая при нагреве полупроводниковой пластины лазерным излучением. Проведено сравнительное исследование двух итерационных методов решения получающейся системы разностных уравнений. Приводятся оценки затрат машинного времени в зависимости от величины шага по времени. Кратко обсуждаются результаты расчётов.

I. Использование концентрированных потоков энергии (ОКГ, электронные и ионные пучки) для воздействия на полупроводники приводит к необходимости учёта переноса тепла, описываемого нелинейной теплопроводностью. Знание образующихся при этом пространственных тепловых полей весьма важно, как для понимания процессов происходящих внутри облучаемого полупроводника и обуславливающих его электрофизические свойства, так и для создания новых технологических направлений в полупроводниковом приборостроении и микроэлектронике.

При численном моделировании подобных задач приходится решать неявные разностные схемы на каждом шаге по времени. Это вызывает определённые трудности при решении многомерных задач, связанные в первую очередь с большими затратами машинного времени. Подобные трудности значительно возрастают при переходе к неортогональным сеткам.

В данной работе, на примере расчёта прогрева лазерным излучением германия, проводится отработка и выбор оптимальной методики расчёта подобных задач.

2. Рассмотрим задачу о нагреве твёрдого тела конечных размеров поверхностным локальным источником. В качестве исследуемого материала использован германий, характеризующийся сильно выраженной зависимостью теплофизических характеристик $\lambda(\mu)$ и $C_v(\mu)$ от температуры. Считаем, что падающий поток осесимметричен, интенсивность в нём распределена по закону Гаусса, а поглощение поверхностное.

Введём обозначения: μ - температура, q - интенсивность потока, λ - коэффициент теплопроводности, C_v - коэффициент объёмной теплоёмкости, t - время, r - радиус пятна нагрева, τ - шаг по времени, β, z - пространственные координаты, h_1 - шаг по β , h_2 - шаг

по z , H, L - геометрические размеры образца,

Математическая постановка задачи такова

$$C_v(U) \frac{\partial U}{\partial t} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho \lambda(U) \frac{\partial U}{\partial \rho}) + \frac{\partial}{\partial z} (\lambda(U) \frac{\partial U}{\partial z}) \quad (1)$$

Ищется решение $U = U(\rho, z, t)$, $0 < \rho < L$, $0 < z < H$, $0 < t \leq T$,
удовлетворяющее краевым и начальным условиям:

$$\lambda(U(0, H, t)) \frac{\partial U(0, H, t)}{\partial \rho} = q$$

$$\lambda(U(0, 0, t)) \frac{\partial U(0, 0, t)}{\partial \rho} = 0$$

$$\lambda(U(L, H, t)) \frac{\partial U(L, H, t)}{\partial z} = 0$$

$$\lambda(U(L, 0, t)) \frac{\partial U(L, 0, t)}{\partial z} = 0$$

$$U(\rho, z, 0) = U_0$$

$$\text{где } q(\rho) = q_0 \exp(-k\rho^2), \quad k = r^{-2}, \quad q_0 = 10^5 \left[\frac{\text{Вт}}{\text{см}^2} \right]$$

$$r = 3 \cdot 10^{-2} [\text{см}], \quad L = 0.1 [\text{см}], \quad H = 0.01 [\text{см}], \quad U_0 = 300^\circ$$

Экспериментальные зависимости $\lambda(U)$ и $C_v(U)$ для большинства полупроводников имеют примерно один и тот же характер изменения [1]. Аппроксимируя их аналитическими выражениями можно записать

$$\lambda(U) = \lambda_0 \left(\left(\frac{b}{\rho U + d} \right)^{\epsilon} + k \right)$$

$$C_v(U) = C_{v0} (1 + hU)$$

где для германия [2] $\lambda_0 = 10^{-2} [\text{кал} \cdot \text{см}^{-1} \cdot \text{сек}^{-1} \cdot \text{град}^{-1}]$, $K=3$, $\nu=12$,
 $\varepsilon=2,95$, $\alpha=2$, $\rho = 10^{-2} [\text{г} \cdot \text{град}^{-1}]$, $h=1,83$, $C_{v0}=0,385 [\text{кал} \cdot \text{см}^{-1} \cdot \text{град}^{-1}]$

Запишем неявную консервативную разностную схему для (1)

$$A_{in} U_{i-1,n}^{j+1} - C_{in} U_{in}^{j+1} + B_{in} U_{i+1,n}^{j+1} + \bar{A}_{in} U_{i,n-1}^{j+1} + \bar{B}_{in} U_{i,n+1}^{j+1} + F_{in} = 0 \quad (3)$$

где A_{in} , C_{in} , B_{in} , \bar{A}_{in} , \bar{B}_{in} - коэффициенты разностной схемы.

Коэффициенты схемы определяются обычным образом [3], например для коэффициента A_{in}

$$A_{in} = \frac{(\rho_i + \rho_{i-1}) \cdot (\lambda_{i-1,n}^j + \lambda_{in}^j)}{2 \cdot \rho_i \cdot (h_{i+1} + h_i) \cdot h_i}$$

$$F_{in} = C_{vin} \cdot U_{in}^j \quad i=2,3,\dots,M-1, \quad n=2,3,\dots,N-1$$

Для решения системы уравнений (3) применялись 2 метода:

а) метод Зейделя

$$U_{in}^{(s+1)} = \frac{A_{in} U_{i-1,n}^{(s+1)} + B_{in} U_{i+1,n}^{(s)} + \bar{A}_{in} U_{i,n-1}^{(s+1)} + \bar{B}_{in} U_{i,n+1}^{(s)} + F_{in}}{C_{in}}$$

б) нелинейный итерационный метод описанный в [4]

$$U_{i,n-1}^{(s+1)} = \bar{L}_{in} U_{in}^{(s+1)} + \bar{\beta}_{in}^{(s+1)} \quad (4)$$

Коэффициенты \bar{L}_{in} и $\bar{\beta}_{in}$ вычисляются с помощью двух автономных итерационных процессов:

$$\bar{L}_{i+1,n}^{(s+1/2)} = \frac{B_{in}}{C_{in} - \bar{L}_{in}^{(s+1/2)} \cdot A_{in} - \bar{L}_{in}^{(s+1/2)} \bar{A}_{in} - \bar{\gamma}^{(s)} \bar{B}_{in}}$$

$$i=2,3,\dots,M-1, \quad n=2,3,\dots,N-1, \quad \bar{L}_{2n}^{(s+1/2)} = 1$$

$$\gamma_{i-1, n}^{(s+1/2)} = \frac{A_{in}}{C_{in} - \gamma_{in}^{(s+1/2)} B_{in} - \bar{L}_{in}^{(s+1/2)} \bar{A}_{in} - \bar{\gamma}_{in}^{(s)} \bar{B}_{in}}$$

$$i = M-1, \dots, 3, 2, \quad n = 2, 3, \dots, N-1, \quad \gamma_{M-1, n}^{(s+1/2)} = 0$$

$$\bar{\gamma}_{i, n+1}^{(s+1/2)} = \frac{\bar{B}_{in}}{C_{in} - \bar{L}_{in}^{(s+1/2)} \bar{A}_{in} - \bar{L}_{in}^{(s+1/2)} A_{in} - \bar{\gamma}_{in}^{(s+1/2)} B_{in}}$$

$$n = 2, 3, \dots, N-1, \quad i = 2, 3, \dots, M-1, \quad \bar{L}_{i2}^{(s+1/2)} = 1$$

$$L_{i+1, n}^{(s+1)} = \frac{B_{in}}{C_{in} - L_{in}^{(s+1)} A_{in} - \bar{L}_{in}^{(s+1/2)} \bar{A}_{in} - \bar{\gamma}_{in}^{(s+1)} \bar{B}_{in}} \quad (5)$$

$$L_{2n}^{(s+1)} = 1, \quad n = N-1, \dots, 2, \quad i = 2, 3, \dots, M-1$$

$$\gamma_{i-1, n}^{(s+1)} = \frac{A_{in}}{C_{in} - \gamma_{in}^{(s+1)} B_{in} - \bar{L}_{in}^{(s+1/2)} \bar{A}_{in} - \bar{\gamma}_{in}^{(s+1)} \bar{B}_{in}}$$

$$\gamma_{M-1, n}^{(s+1)} = 0, \quad n = N-1, \dots, 2, \quad i = M-1, \dots, 2$$

$$\bar{\gamma}_{i, n-1}^{(s+1)} = \frac{\bar{A}_{in}}{C_{in} - \bar{\gamma}_{in}^{(s+1)} \bar{B}_{in} - L_{in}^{(s+1)} A_{in} - \gamma_{in}^{(s+1)} B_{in}}$$

$$\bar{\gamma}_{i, N-1}^{(s+1)} = 1, \quad n = N-1, \dots, 2, \quad i = 2, \dots, M-1$$

После этого определяются коэффициенты $\bar{\beta}, \bar{d}; \beta, d$

$$\beta_{i+1,n}^{(s+1/2)} = (A_{in} \beta_{in}^{(s+1/2)} + D_{in}^{(s+1/2)}) / \Psi_{i,n,\delta}$$

$$i = 2, \dots, M-1, \quad n = 2, \dots, N-1, \quad \beta_{2,n}^{(s+1/2)} = 0$$

$$\alpha_{i-1,n}^{(s+1/2)} = (B_{in} \alpha_{in}^{(s+1/2)} + D_{in}^{(s+1/2)}) / \Psi_{i,n,\gamma}$$

$$n = 2, \dots, N-1, \quad i = M-1, \dots, 2, \quad \alpha_{M-1,n}^{(s+1/2)} = \mathcal{U}_0$$

$$\bar{\beta}_{i,n+1}^{(s+1/2)} = (F_{in} + \bar{A}_{in} \bar{\beta}_{in}^{(s+1/2)} + A_{in} \beta_{in}^{(s+1/2)} + B_{in} \alpha_{in}^{(s+1/2)}) / \Psi_{i,n,\bar{\delta}}$$

$$n = 2, \dots, N-1, \quad i = 2, \dots, M-1, \quad \bar{\beta}_{i,n}^{(s+1/2)} = 0$$

$$\beta_{i+1,n}^{(s+1)} = (A_{in} \beta_{in}^{(s+1)} + \bar{Z}_{in}^{(s+1)}) / \Psi_{i,n,\delta} \quad (6)$$

$$\beta_{2,n}^{(s+1)} = 0, \quad n = N-1, \dots, 2$$

$$\alpha_{i-1,n}^{(s+1)} = (B_{in} \alpha_{in}^{(s+1)} + \bar{Z}_{in}^{(s+1)}) / \Psi_{i,n,\gamma}$$

$$\alpha_{M-1,n}^{(s+1)} = \mathcal{U}_0, \quad n = N-1, \dots, 2$$

$$\bar{\alpha}_{i,n-1}^{(s+1)} = (F_{in} + \bar{B}_{in} \bar{\alpha}_{in}^{(s+1)} + A_{in} \beta_{in}^{(s+1)} + B_{in} \alpha_{in}^{(s+1)}) / \Psi_{i,n,\bar{\gamma}}$$

$$n = N-1, \dots, 2, \quad i = 2, \dots, M-1, \quad \bar{\alpha}_{i,n-1} = 0$$

$\Psi_{in,\delta}, \Psi_{in,\gamma}, \Psi_{in,\bar{\delta}}, \Psi_{in,\bar{\gamma}}$ - определяются по следующим формулам:

$$\Psi_{i,n,\alpha} = C_{in} - \alpha_{in} A_{in} - \bar{\alpha}_{in} \bar{A}_{in} - \bar{\gamma}_{in} \bar{B}_{in}$$

$$\alpha_{2,n} = 1, \quad \beta_{2,n} = 0$$

$$\Psi_{i,n,\gamma} = C_{in} - \gamma_{in} B_{in} - \bar{\alpha}_{in} \bar{A}_{in} - \bar{\gamma}_{in} \bar{B}_{in}$$

$$\gamma_{M-1,n} = 0, \quad \alpha_{M-1,n} = U_0$$

$$\Psi_{i,n,\bar{\alpha}} = C_{in} - \bar{\alpha}_{in} \bar{A}_{in} - \alpha_{in} A_{in} - \gamma_{in} B_{in}$$

$$\bar{\alpha}_{i,2} = 1, \quad \beta_{i,2} = 0$$

$$\Psi_{i,n,\bar{\gamma}} = C_{in} - \bar{\gamma}_{in} \bar{B}_{in} - \alpha_{in} A_{in} - \gamma_{in} B_{in}$$

$$\gamma_{i,N-1} = 1, \quad \alpha_{i,N-1} = 0$$

$$i = 2, \dots, M-1, \quad n = 2, \dots, N-1$$

D_{in} и Z_{in} - определяются выражениями:

$$D_{in}^{(s+1/2)} = F_{in} + (\bar{A}_{in} + \theta f^{(s)} \bar{B}_{in}) \bar{\beta}_{in}^{(s+1/2)} + (1-\theta) \bar{B}_{in} \bar{\alpha}_{in}^{(s)}$$

$$Z_{in}^{(s+1)} = F_{in} + (\bar{B}_{in} + \theta f^{(s+1/2)} \bar{A}_{in}) \bar{\alpha}_{in}^{(s+1)} + (1-\theta) \bar{A}_{in} \beta_{in}^{(s+1/2)}$$

$$f^{(s)} = \frac{U_{i,n+1}^{(s)} - \bar{\gamma}_{in} U_{in}^{(s)}}{U_{i,n-1}^{(s)} - \bar{\alpha}_{in} U_{in}^{(s)}}, \quad f^{(s+1/2)} = \frac{1}{f^{(s)}}$$

3. При решении (3) использовалась неравномерная сетка. Число узлов по координате ρ равнялось 30, а по Z - 20, и соответственно $h_{1min} = 7,3 \cdot 10^{-5}$ см, $h_{1max} = 8,2 \cdot 10^{-3}$ см, $h_{2min} = 10^{-4}$ см, $h_{2max} = 8,3 \cdot 10^{-4}$ см.

Режим теплового воздействия источника выбирался таким образом, чтобы при самом длительном воздействии на поверхности достигалась температура плавления, после чего источник отключался и происходило охлаждение образца.

В нелинейном итерационном методе параметр θ полагался равным нулю. Это несколько ухудшает работу метода, но снимает вопрос об оптимальном выборе θ . Так как методы различаются по числу действий на число итераций, то их сравнение происходило по затраченному машинному времени для достижения заданной точности.

Было просчитано несколько вариантов с различной величиной τ . Величина шага по времени выбиралась из расчёта $\tau \approx 10^2 \div 10^3 \tau_{kmin}$, где τ_{kmin} - минимальная величина критерия Куранта, определяемая из соотношения $\frac{\tau_{kmin}}{h_{1min}} \leq \frac{1}{2} \frac{\min C_V(U)}{\max \lambda(U)}$. В нашей задаче $\tau_{kmin} \sim 10^{-8}$ сек.

В таблице I и на графике 4 показано во сколько раз меньше машинного времени, в зависимости от задаваемого τ , требует нелинейный итерационный метод по сравнению с методом Зейделя.

Таблица I.

τ [сек]	$1,2 \cdot 10^{-6}$	$2,4 \cdot 10^{-6}$	$4,8 \cdot 10^{-6}$	$6,0 \cdot 10^{-6}$	$1,2 \cdot 10^{-5}$
V [число раз]	1,4	2,05	2,8	3,4	5,01

Область задания τ выбиралась из следующих соображений: при $\tau \leq 10^2 \tau_{kmin}$ оба метода требуют примерно одинаковых затрат машинного времени, но нелинейный итерационный метод требует почти

в 2 раза больше ячеек памяти;

расчёты с $\gamma \approx 10^4 \tau_{\text{к.т.п.}}$ показали, что быстродействие нелинейного итерационного метода достигает своего предела $V \sim 10-12$ раз и не меняется при дальнейшем увеличении γ . Однако, учитывая, что аппроксимация по временной координате осуществляется с порядком $O(\tau)$, погрешность при таком большом шаге может стать слишком большой. Исходя из этих соображений γ при расчётах ограничивалось сверху величиной $\sim 10^3 \tau_{\text{к.т.п.}}$.

На рис. 1,2,3 в качестве примера показано пространственное распределение температуры в полупроводнике в различные моменты времени.

Как показали расчёты наибольшему тепловому воздействию подвергается область пятна фокусировки лазерного излучения. Кривые на рис.1 показывают распределение температуры на поверхности полупроводника. Температура плавления достигается непосредственно в зоне облучения и быстро спадает в окрестности. Это приводит к наличию больших градиентов температуры, что повидимому вызывает большие термонапряжения. На рис.2 показано распределение температуры внутри полупроводника при $Z = 3 \cdot 10^{-3}$ см. Кривые рис.3 характеризуют распределение температуры по глубине при $\rho = 0$. Из графиков видно, что по глубине германий прогревается медленно, в основном нагревается приповерхностный слой.

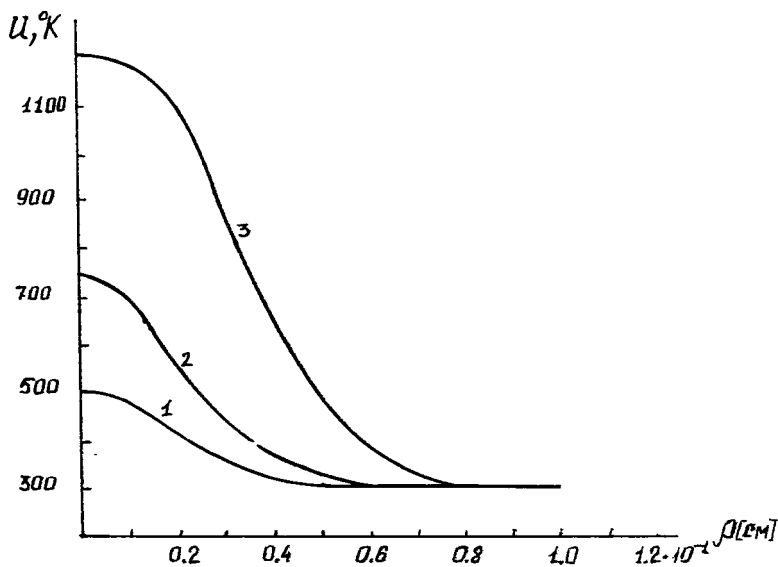


Рис.1. Распределение температуры на поверхности, $Z=H$
 1. $T = 1.2 \cdot 10^{-5}$, 2. $T = 2.4 \cdot 10^{-5}$, 3. $T = 6.0 \cdot 10^{-5}$ / сек /

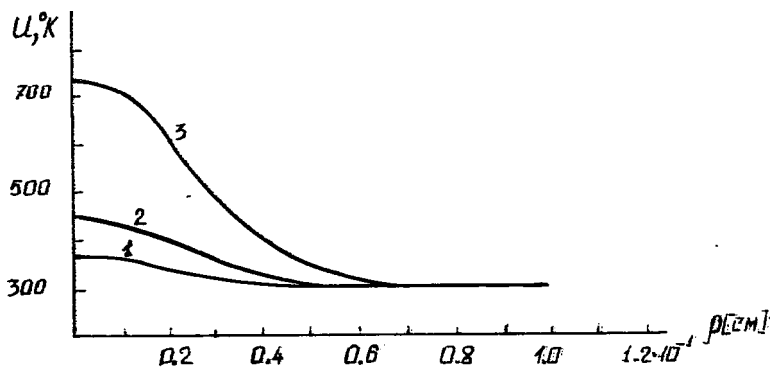


Рис.2. Распределение температуры при $Z = 3 \cdot 10^{-4}$ см /
 1. $T = 1.2 \cdot 10^{-5}$, 2. $T = 2.4 \cdot 10^{-5}$, 3. $T = 6.0 \cdot 10^{-5}$ / сек /

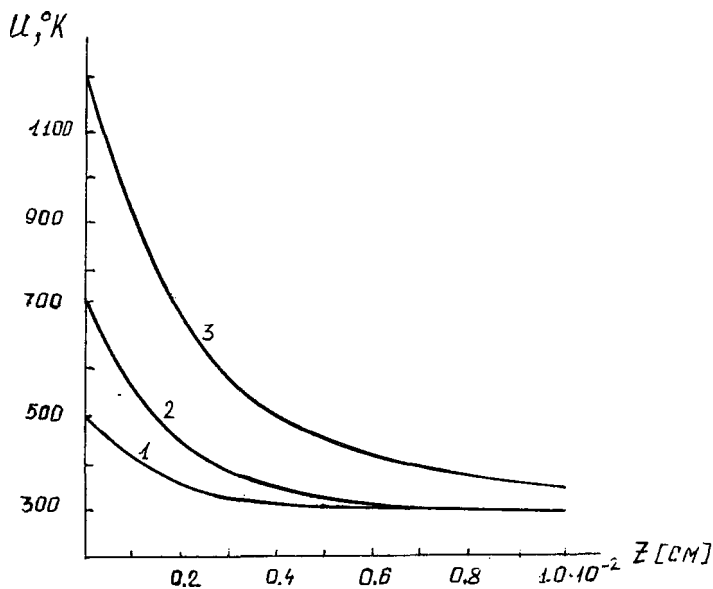


Рис.3. Распределение температуры по глубине, $\rho = 0$

1. $T = 1.2 \cdot 10^{-5}$, 2. $T = 2.4 \cdot 10^{-5}$, 3. $T = 6.0 \cdot 10^{-5}$ / сек /

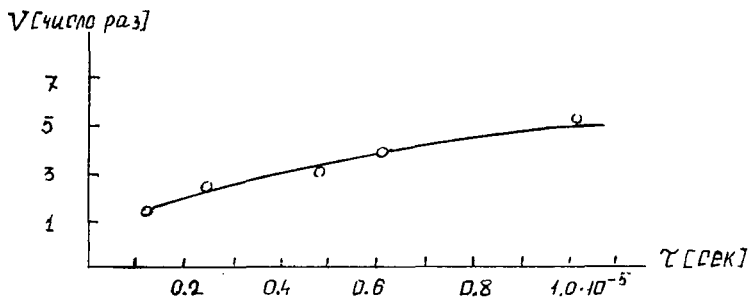


Рис. 4.

Л И Т Е Р А Т У Р А .

1. Н.А.Авдонин, М.Ф.Глобин, В.А.Смирнов, В.Э.Шнигер "Анализ тепловых условий роста слитков арсенида галлия методом направленной кристаллизации". Ж.физ.и хим.обработ.материалов. 1971, 5, 50-55.
2. В.И.Мажукин, Д.И.Чередниченко "Влияние нелинейности теплофизических характеристик на температурный режим полупроводника при воздействии импульсным источником тепла. Ж.физ.и хим. обработ. материалов. 1976, 6, 12-19
3. А.А.Самарский "Теория разностных схем". М. Наука, 1977.
4. М.И.Волчинская, Б.Н.Четверушкин "Об одном итерационном методе решения двумерных уравнений диффузии излучения. Ж.вычисл. матем.и матем. физ. 1977, №2, 17.