

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ЛАЗЕРНО-ИНДУЦИРОВАННЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В GaSb

С.П. Жвавый, Г.Л. Зыков

Институт электроники НАН Беларуси, 220090 Минск, Беларусь, тел. +375 (17) 281-32-30, E-mail: zhvavvi@inel.bas-net.by

Выполнено моделирование процессов плавления и кристаллизации, инициируемых в антимониде галлия излучением рубинового лазера ( $\lambda = 694$  нм,  $\tau = 80$  нс) с учетом процессов испарения с поверхности и диффузии компонентов в расплаве. Показано, что по окончании воздействия импульса рубинового лазера ( $E = 1,1$  Дж/см<sup>2</sup>) обогащение поверхностного слоя галлием составляет  $\sim 0,515$ . Расчетное значение пороговой плотности энергии излучения рубинового лазера, при которой происходит плавление GaSb,  $E = 0,2$  Дж/см<sup>2</sup>.

### Введение

Исследования закономерностей модификации поверхностных слоев антимонида галлия при воздействии на его поверхность наносекундного излучения рубинового ( $\tau = 80$  нс) и ArF эксимерного ( $\tau = 10$  нс) лазеров проводились в работе [1]. Было показано, что облучение GaSb эксимерным лазером может приводить к аморфизации поверхностного слоя. Однако численное моделирование процессов плавления и кристаллизации было проведено без учета массопереноса в расплаве.

В настоящей работе представлены результаты численного моделирования динамики фазовых переходов в антимониде галлия, инициируемые наносекундным излучением рубинового лазера, с учетом испарения с поверхности и диффузии компонентов в расплаве.

### Модель

Тепловые процессы в антимониде галлия, инициируемые лазерным излучением наносекундной длительности, и сопутствующие диффузионные процессы в приповерхностном слое моделировали путем численного решения одномерных уравнений теплопроводности и диффузии:

$$\rho(T) \left[ c(T) + L_m \delta(T - T_m) \right] \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ k(x, T) \frac{\partial T}{\partial x} \right] + S(x, t),$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_i \frac{\partial C_i}{\partial x} \right),$$

где  $\rho$  – плотность,  $c$  – удельная теплоемкость,  $L_m$  – скрытая теплота плавления,  $\delta(x)$  – дельта-функция,  $T_m$  – температура плавления,  $k$  – коэффициент теплопроводности,  $C_i$  – концентрация компоненты  $i$  (галлия или сурьмы),  $D = D_0 \exp(-U/k_B T)$  – коэффициент диффузии,  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $U$  – энергия активации.

Источник тепла  $S(x, t)$  в уравнении теплопроводности (1) описывает выделение тепла при поглощении лазерного излучения

$$S(x, T) = (1 - R) \frac{E(t)}{\tau} \alpha(x, T) \exp \left( - \int_0^x \alpha(x', T) dx' \right),$$

где  $R$  и  $\alpha(x, T)$  – коэффициенты отражения и поглощения, соответственно;  $E(t)$  и  $\tau$  – плотность энергии и длительность импульса лазерного излучения.

Граничные и начальные условия задавали в виде:

$$-k \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=Z(t)} = -Q, \quad T(x=d, t) = T_0, \quad T(x, 0) = T_0,$$

$$D_i \frac{\partial C_i}{\partial x} \Big|_{x=Z(t)} = \frac{J_i}{\rho_i}, \quad C_i(x=d, t) = C_{i0}, \quad C_i(x, 0) = C_{i0},$$

где  $d$  – толщина материала,  $T_0$  – начальная температура,  $Q = L_{Ga} J_{Ga} + L_{Sb} J_{Sb}$  – поток тепла с поверхности, который определяется потоком испаряющихся атомов  $j$ ,  $L_{Ga}$  и  $L_{Sb}$  – скрытые теплоты испарения галлия и сурьмы,  $Z(t)$  – координата поверхности GaSb.

Для плотности потока массы испаряющихся в вакуум атомов  $j$  использовали зависимость [2]:

$$j_i(T) = 0,435 P_s(T) X_i \sqrt{\frac{M_i}{2\pi k_B T}},$$

где  $M$  – масса атома,  $X_i = C_i / (C_{Ga} + C_{Sb})$  атомная доля  $i$ -го компонента.

Давление  $P_s(T)$  определяется уравнением фазового равновесия [3]

$$\lg P_s(T) = a - b/T.$$

В результате интенсивного испарения атомов сурьмы происходит обогащение приповерхностной области галлием [4]. Поэтому движение границы раздела фаз пар – расплав  $Z(t)$  определялось потоком испаряющихся молекул галлия:

$$\frac{dZ}{dt} = \frac{j_{Ga}}{\rho_{Ga}},$$

где  $\rho_{Ga}$  – плотность галлия.

Концентрация компонентов в приповерхностном слое определяется потоками испарения и диффузией их в расплаве. Как следует из фазовой диаграммы антимонида галлия, избыток галлия в расплаве приводит к понижению температуры кристаллизации и уменьшению скрытой теплоты фазового перехода. Чтобы учесть эти изменения, была выполнена аппроксимация кривой ликвидуса  $\text{Ga}_x\text{Sb}_{1-x}$  [4] ( $X > 0,5$ ) для определения температуры кристаллизации  $T_m = T_m(X)$  и скрытой теплоты фазового перехода  $L_m = L_m(X)$ :

$$T_m(X) = T_{m0} (18,7 - 129,6X + 374,4X^2 - 534,5X^3 + 377,2X^4 - 105,7X^5),$$

$$L_m(X) = L_{m0} (15,9 - 109,3X + 316,7X^2 - 453,06X^3 + 320,4X^4 - 90,1X^5),$$

где  $T_{m0}$  и  $L_{m0}$  – равновесные значения температуры кристаллизации и скрытой теплоты плавления антимонида галлия, соответственно.

Температурные зависимости диффузии компонентов галлия и сурьмы в расплаве антимонида галлия равны [5]:

$$D_{Ga} = 5,8 \cdot 10^{-5} + 3,75 \cdot 10^{-6} \cdot \exp(T / 456,2),$$

$$D_{Sb} = 7,8 \cdot 10^{-5} + 8,5 \cdot 10^{-8} \cdot \exp(T / 254,1).$$

Форма лазерного импульса задавалась функцией  $\sin^2(\pi t/2\tau)$ , где  $\tau = 80$  нс. Толщина пластины антимонида галлия полагалась значительно большей длины тепловой диффузии за время лазерного импульса и принималась равной 38 мкм.

## Результаты

Временные зависимости температуры поверхности антимонида галлия при воздействии излучения рубинового лазера с длительностью импульса  $\tau = 80$  нс приведены на рис. 1. На стадии остывания температура поверхности GaSb равна равновесной температуре плавления и лишь на заключительном этапе кристаллизации, при  $E > 0,9$  Дж/см<sup>2</sup>, происходит снижение температуры поверхности  $< T_{мо}$ , что объясняется небольшим изменением стехиометрии в приповерхностном слое расплава.

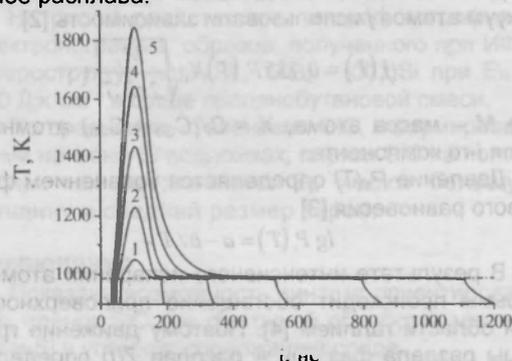


Рис.1. Временная зависимость температуры поверхности GaSb при плотности энергии  $E = 0,3$  (1),  $0,5$  (2),  $0,7$  (3),  $0,9$  (4) и  $1,1$  (5) Дж/см<sup>2</sup>

Вследствие низкого давления насыщенных паров компонентов заметное испарение атомов сурьмы (рис.2) начинается в момент образования расплава на поверхности при плотностях энергии  $> 0,9$  Дж/см<sup>2</sup>. Поскольку поток испаряющихся атомов с поверхности не компенсируется диффузионным потоком в расплаве, происходит обеднение приповерхностного слоя атомами сурьмы (рис.3). Поток атомов галлия при плотностях энергии  $< 1,1$  Дж/см<sup>2</sup> отсутствует, что связано с низким давлением насыщенных паров галлия в исследуемом температурном диапазоне.

Как следует из эксперимента [2] порог плавления антимонида галлия при воздействии на его поверхность излучения рубинового лазера составляет  $\sim 0,2$  Дж/см<sup>2</sup>. Согласно проведенным расчетам пороговое значение плотности энергии также равно  $0,2$  Дж/см<sup>2</sup>. Увеличение плотности энергии до  $0,9$  Дж/см<sup>2</sup> приводит к увеличению толщины расплавленного слоя до  $\sim 1$  мкм (рис.4). При плотности энергии  $E = 0,9$  Дж/см<sup>2</sup> скорости движения фронта плавления и кристаллизации составили  $\sim 6$  м/с и  $3$  м/с соответственно. По

окончании действия лазерного импульса поверхностная концентрация сурьмы увеличивается в результате диффузии атомов в расплаве (рис.3).

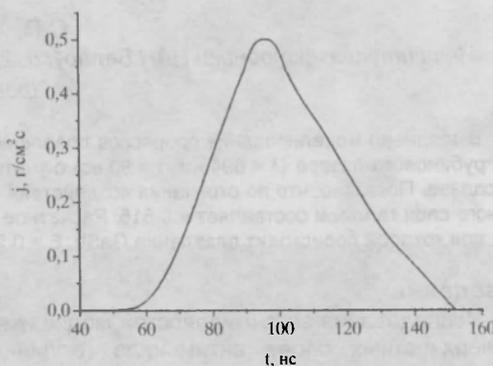


Рис.2. Зависимость потока испаряющихся атомов сурьмы от плотности энергии  $E = 1,1$  Дж/см<sup>2</sup>

На рис. 5 показаны экспериментальная [2] и рассчитанная зависимости времени существования расплава от плотности энергии лазерного импульса. Видно, что расчетные значения находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными.

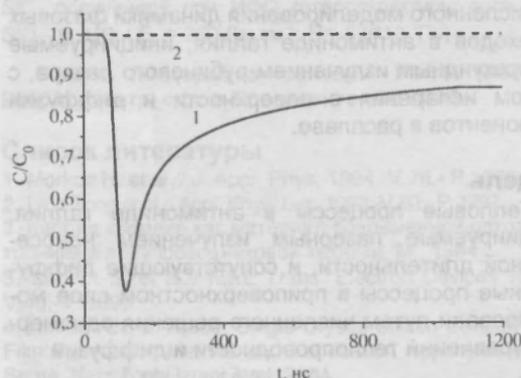


Рис.3. Зависимость поверхностной концентрации Sb (1) и Ga (2) от времени при плотности энергии  $E = 1,1$  Дж/см<sup>2</sup>

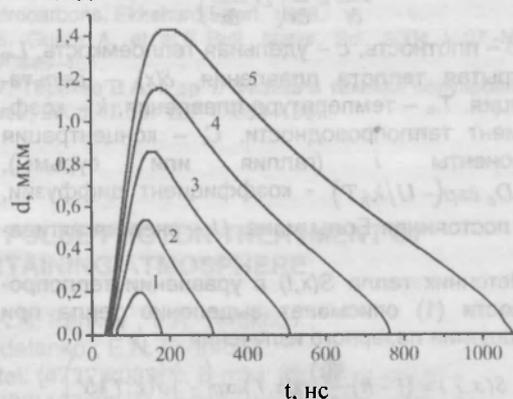


Рис.4. Зависимость толщины расплавленного слоя GaSb от времени при плотности энергии  $E = 0,3$  (1),  $0,5$  (2),  $0,7$  (3),  $0,9$  (4) и  $1,1$  (5) Дж/см<sup>2</sup>

Распределения атомных долей галлия и сурьмы в различные моменты времени при плотности энергии  $1,1$  Дж/см<sup>2</sup> представлены на рис.6. Как следует из расчетов, обогащение поверхно-

стного слоя галлием на начальной стадии кристаллизации составляет  $\sim 0,57$ . К моменту завершения процесса кристаллизации образца в результате диффузии атомов сурьмы в расплаве происходит уменьшение обогащения поверхности галлием до  $\sim 0,515$  (рис.6, кривая 4).

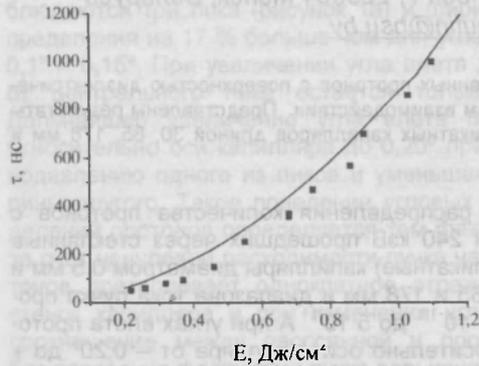


Рис.5. Рассчитанная зависимость времени существования расплава GaSb от плотности энергии; ■ – эксперимент [2]

### Заключение

Таким образом, в результате моделирования фазовых переходов, инициируемых в антимониде галлия излучением рубинового лазера ( $\lambda = 694$  нм,  $\tau = 80$  нс) с учетом процессов испарения с поверхности и диффузии компонентов в расплаве, показали, что процесс испарения компонентов не оказывает существенного влияния на динамику фазовых переходов в приповерхностной области. По окончании воздействия импульса рубинового лазера ( $E = 1,1$  Дж/см<sup>2</sup>) обогащение

галлием поверхностного слоя составляет  $\sim 0,515$ . Полученные значения времени существования расплава GaSb от плотности энергии согласуется с экспериментальными данными.

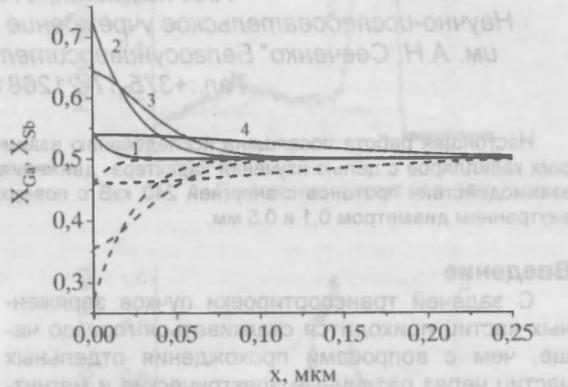


Рис.6. Распределение атомной доли компонентов GaSb (сплошная линия – Ga, штриховая – Sb) при  $E = 1,1$  Дж/см<sup>2</sup> в моменты времени  $t = 80$  (1), 120 (2), 160 (3), и 950 (4) нс.

### Список литературы

1. Černý R., Píkrýl P., Ivlev G. e.a. // Comput. Mater. Sci. – 2000. – Vol. 17. – P.384.
2. Golovan L.A., Markov B.A., Kashkarov P.K. e.a. // Sol. St. Commun. – 1998. – Vol. 108, № 10. – P.707.
3. Дашман С. Научные основы вакуумной техники. М.: Мир, 1964. 715 с.
4. Глазов В.М., Павлова Л.М. // Журнал физической химии. – 2001. – Т. 75, № 4. – С.644.
5. Gu T., Qin J., Bian X. e.a. // Phys. Rev. B. – 2004. – Vol. 70, № 24. – P.245214-1.

## NUMERICAL SIMULATION OF DYNAMICS OF LASER-INDUCED PHASE TRANSITIONS INDUCED IN GaSb

Sergei Zhvavyi, Grigori Zykov  
Institute of Electronics of the National Academy of Sciences of Belarus,  
22 Logoiskii trakt, 220090 Minsk, Belarus

Simulation of melting and solidification induced in gallium antimonide by ruby laser radiation ( $\lambda = 694$  nm,  $\tau = 80$  ns) was performed taking into account evaporation and diffusion of the melt. It is shown that the enrichment of the surface layer by gallium is equals  $\sim 0.515$  after termination of the ruby laser pulse ( $E = 1,1$  J/cm<sup>2</sup>). Calculated value of the melting threshold under irradiation of the GaSb surface with the ruby laser is  $E = 0,2$  J/cm<sup>2</sup>.

