

激光净化能量密度阈值的相轨道研究^①

卫红萍, 陈武

成都理工大学 工程技术学院计科系, 乐山 614007

摘要: 建立了激光清洗的物理模型, 探讨了激光辐照下基底表面和吸附粒子位置随时间的变化规律, 作出粒子运动的相轨道, 从相轨道角度对激光净化能量密度阈值进行研究. 激光清洗 Al 基底上的 Fe 粒子, 本文对激光清洗 Al 基底上的 Fe 粒子所计算的能量密度阈值比用其它方法得到的结果更与实验值接近.

关键词: 激光净化; 能量密度阈值; 相轨道

中图分类号: O432.1

文献标识码: A

随着半导体和微电子器件生产向着高度集成和小尺寸方向发展, 污染物的控制已成了一个关键技术和理论问题. 对吸附在表面的亚微米级的粒子, 理论和实验都证实其吸附力和自身重力之比为 10^9 ^[1]. 传统的清洗技术(如化学、超声波、机械等清洗技术)或者不能去除污染物, 或者虽然能够去除, 但也会损伤器件表面. 90 年代初, 由依阿华大学 Susan Allen 小组研制的激光清洗技术成了一种新的清洗技术. 由于它不需要清洗液, 清洁度高, 不会造成二次污染, 可以远距离净化等优点而受到广泛研究^[2-4]. 目前对其研究都强调利用基底对激光的吸收特性, 但激光去除表面微小颗粒的理论研究未见报导. 前不久, 作者在文献[5]中从力学角度论述了干燥激光净化的物理机制, 应用力学平衡条件求出干燥激光净化时粒子逸出表面的脱附力以及单脉冲情况下干燥激光净化的辐照能量密度阈值. 本文将进一步探讨干燥激光净化的物理机制, 从粒子运动的相轨道角度出发, 探讨单脉冲辐照下干燥激光净化的辐照能量密度阈值.

1 干燥激光净化的物理机制

固体表面与被污染微粒之间有吸引力, 激光辐照基底, 固体表面或微粒本身由于瞬时热膨胀, 使微粒产生垂直于固体表面向外的加速度, 从而使微粒脱离基底表面. 根据去除力的方向和作用于粒子的效果, 可将粒子被除去的方式分为 3 种: 抛离式、滑动式、滚动式(图 1), 这里只讨论抛离式.

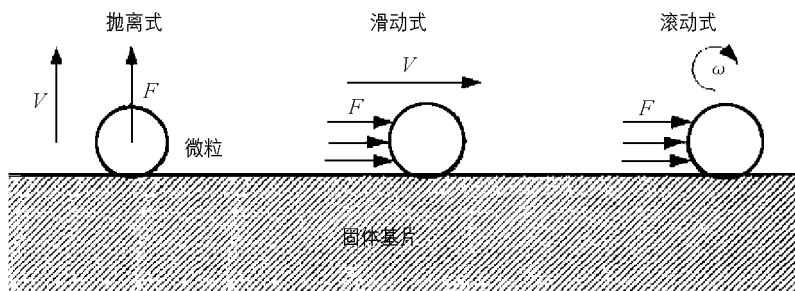


图 1 去除吸附粒子的方式

① 收稿日期: 2007-03-05

作者简介: 卫红萍(1968-), 女, 四川乐山人, 讲师, 主要从事光学和大学物理教材教法的研究.

激光清洗粒子从机制上讲, 粒子离开表面, 其原因一种是基底表面的瞬时热膨胀而使表面吸附的粒子离开(图 2(a)), 另一种是由于粒子本身的热膨胀而使粒子离开表面(图 2(b)).

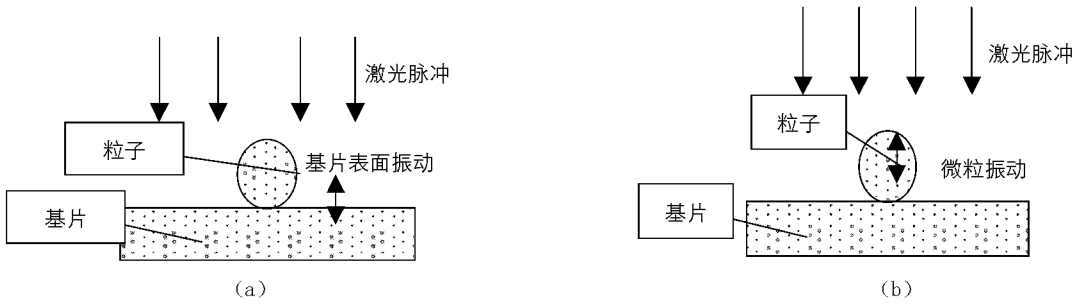


图 2 干式激光净化的两种机制

2 基底表面位置随时间的变化

设激光辐照前, 质量为 m 的粒子处于干燥平面基底上, 激光辐照时, 基底和污染粒子被加热(这种加热既可能是由直接吸收辐照引起, 也可以由热传导引起). 粒子和基底被加热后, 或是粒子膨胀, 或是基底热膨胀, 或是粒子和基底都发生热膨胀, 其变化情况见文献[5]. 在随时间变化的激光照射下, 粒子中心位置和基底表面均随时间而变, 其变化规律可这样求得. 设球型粒子中心与基底表面的距离 $l=R+h$, 在负荷作用下, 形变的结果, 相应距离 l' , 量 $\delta=l-l'$ 叫形变参量. 如对粒子未施加附着力, 那么, 初始形变参量为^[6]

$$\delta_0 = \frac{1}{8} \left[\frac{9R \langle \hbar \omega \rangle^2}{2\pi^2 h^4 E^{*2}} \right]^{1/3} \quad (1)$$

其中: R 为粒子半径, E^* 是附着粒子的扬氏模量, $\langle \omega \rangle$ 是粒子中原子振动频率统计平均值. 基底膨胀时, 表面位置 Z_s 随时而变, 即 $Z_s = Z_s(t)$. 取 $Z_s(0) = 0$, 粒子位移记为 $f(t)$. 现在的形变参量 $\delta(t)$ 为

$$\delta(t) = Z_s(t) - f(t) + \delta_0 \quad (2)$$

为了求 $Z_s(t)$, 利用一维热传导方程的解 $T = T(Z, t)$ 及线膨胀系数 α_T 与它的关系式^[6]

$$Z_s(t) = \alpha_T \int_0^\infty T(Z, t) dZ \quad (3)$$

和能量守恒定律, 有

$$(1 - R_s) \int_0^t T(t_1) dt_1 = c\rho \int_0^\infty T(Z, t) dZ \quad (4)$$

其中: c 和 ρ 分别是基底的热容量和质量密度, R_s 是基底表面对辐射的反射系数.

激光辐照通常有锯齿形和直角形脉冲两种形式. 对脉冲时间为 τ 的锯齿形脉冲

$$I(t) = I_0 \frac{t}{\tau} e^{-t/\tau} \quad (5)$$

激光脉冲能量密度由公式 $\phi = I_0 \tau$ 给出, 由(3)–(5)得到

$$Z_s(t) = \frac{\alpha_T \phi (1 - R_s)}{c\rho} \left[1 - \left(1 + \frac{t}{\tau} \right) e^{-t/\tau} \right] \quad (6)$$

对于持续时间为 τ_1 的直角脉冲, 变化和求出的 $Z_s(t)$ 分别由如下公式给出

$$I(t) = \begin{cases} I_0 & t < \tau_1 \\ 0 & t > \tau_1 \end{cases} \quad (7)$$

$$Z_s(t) = \frac{\alpha_T \phi (1 - R)}{c\rho} \left[\frac{t}{\tau_1} \theta_H \left(1 - \frac{t}{\tau_1} \right) + \theta_H \left(\frac{t}{\tau_1} - 1 \right) \right] \quad (8)$$

其中 θ_H 为热塔函数, 其表示式见文献[7].

3 粒子的位移随时间的变化

下面只讨论锯齿形脉冲情况. 由弹性形变参量决定的粒子加速度由如下方程决定^[6]

$$\frac{4}{3}\pi R^3 \rho \frac{d^2 f}{dt^2} = \frac{4}{3} \sqrt{RE^*} [\delta(t)^{3/2} - \delta_0^{3/2}] \quad (9)$$

其中: ρ 是粒子的质量密度, E^* 为粒子的有效弹性模量, 它由下式决定

$$\frac{1}{E^*} = \frac{1 - \sigma_1^2}{E_1} + \frac{1 - \sigma_2^2}{E_2} \quad (10)$$

其中: E_1, E_2 , 和 σ_1, σ_2 是粒子(用 1 表示)和基底(用 2 表示)的杨氏模量和泊松系数. 将(3)代入(10), 注意到激光辐照下, $Z_s(t) - f(t)$ 很小, 可将(9)式写为

$$\frac{d^2 f}{dt^2} + \omega^2 f = \omega^2 Z_s(t) \quad (11)$$

其中的 $Z_s(t)$ 由(7)式给出, 而 $\omega^2 = E^* \delta_0^{1/2} / 2\pi R^{5/2} \rho$, 初始条件为

$$f|_{t=0} = 0 \quad \left. \frac{df}{dt} \right|_{t=0} = 0 \quad (12)$$

对(5)所示的锯齿形脉冲, 将(6)代入(11), 由微分方程理论可求得解为

$$f(t) = A \sin(\omega t + \varphi_0) + B \omega^2 \tau + \left[\frac{B \omega^2 \tau}{(1 + \omega^2 \tau^2)} t - \frac{B \omega^2 \tau^2 (3 + \omega^2 \tau^2)}{(1 + \omega^2 \tau^2)^2} \right] e^{-t/\tau} \quad (13)$$

$$\varphi_0 = \arctan \left\{ - \frac{(3 + \omega^2 \tau^2) - (1 + \omega^2 \tau^2)^2}{2(2 + \omega^2 \tau^2)} \right\}$$

$$A = - \frac{2B \omega^2 \tau (2 + \omega^2 \tau^2)}{(1 + \omega^2 \tau^2) \cos \varphi_0} \quad B = \frac{\alpha^T \phi (1 - R_S)}{c \rho} \quad (14)$$

将(6)式和(13)式代入(2)式, 求得粒子形变量 $\delta(t) = Z_s(t) - f(t) + \delta_0$ 为

$$\delta = B \left[1 - \left(1 + \frac{t}{\tau} \right) e^{-t/\tau} \right] + A \sin(\omega t + \phi_0) + B \omega^2 \tau^2 + \left[\frac{B \omega^2 \tau}{(1 + \omega^2 \tau^2)} t - \frac{B \omega^2 \tau^2 (3 + \omega^2 \tau^2)}{(1 + \omega^2 \tau^2)^2} \right] e^{-t/\tau} \quad (15)$$

将它对时间求导, 得到粒子的速度 $v = d\delta(t)/dt$ 和粒子的动量 $p = mv$. 结果是

$$p = m \left\{ - \frac{Bt}{\tau^2} e^{-t/\tau} + A \omega \cos(\omega t - \varphi_0) \lambda + \varphi_0 + \left[\frac{B \omega^2 \tau}{1 + \omega^2 \tau^2} - \frac{B \omega^2}{(1 + \omega^2 \tau^2)} t + \frac{B \omega^2 \tau (3 + \omega^2 \tau^2)}{(1 + \omega^2 \tau^2)^2} \right] \right\} e^{-t/\tau} \quad (16)$$

由(15)式、(16)式消去时间 t , 得到 $p - \delta$ 的变化关系(即相轨道方程).

4 激光净化能量密度阈值的相轨道研究

以 Al 基底吸附 Fe 粒子为例说明. (15)式、(16)式是超越方程, 只能用作图法求相轨道.

4.1 粒子位移随时间的变化

Fe 的 $E_1 = 2.1 \times 10^4 \text{ kg} \cdot \text{mm}^{-2}$, $\sigma_1 = 0.30$, Al 的 $E_2 = 7.2 \times 10^3 \text{ kg} \cdot \text{mm}^{-2}$, $\sigma_2 = 0.32$, 由(10)求得 $E^* = 5.83 \times 10^3 \text{ kg} \cdot \text{mm}^{-2}$. 设粒子半径 $R = 0.5 \mu\text{m}$, 粒子与基底的距离 $h = 3.664 \times 10^{-5} \text{ m}$. Fe 粒子中原子振动频率平均值 ω 可由德拜模型按如下公式求得.

$$\langle \omega \rangle^2 = \frac{3}{5} \left(\frac{k_B \vartheta_D}{\hbar} \right)^2 \quad (17)$$

其中: ϑ_D 为德拜温度(对 Fe, $\vartheta_D = 467 \text{ K}$), k_B 和 \hbar 分别为玻尔兹曼常数和普朗克常数. 由(17)得 $\langle \omega \rangle = 4.337 \times 10^{13} \text{ S}^{-1}$. 代入(1)得 $\delta_0 = 0.73 \times 10^{-10} \text{ m}$, 将所求的 E^* , δ_0 及 R 和 Fe 的 $\rho = 7.86 \times 10^3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ 代入(11), 求出 $\omega = 0.7557 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$. 为作出粒子的 $\delta(t)$ 曲线, 取 $\phi = 200 \times 10^{-3} \text{ J} \cdot \text{cm}^{-2}$, $\tau = 23 \text{ ns}$, 文献^[8]给出 Fe 常温(300 K)时的热膨胀系数 $\alpha_T = 0.117 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$, $c = 448 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$, Al 的反射系数 $R_S = 0.02$. 代入(14), 求出 $B = 6.512 \times 10^{-8} \text{ m}$, $\varphi_0 = -26.564^\circ$, $A = -3.269 \times 10^{-4} \text{ m}$, 再代入(15)式, 得到曲线(图 3).

由图看出:粒子存在振动(颤动),振动的特征周期约为 83 ns.

4.2 粒子的相轨道和激光净化的能量密度阈值

将上述计算的 A, B 等数据以及粒子质量 m 等代入(16),得到粒子动量随时间的变化.以粒子动量 p 为纵坐标, δ 为横坐标,在相平面 $[p, \delta]$ 作出粒子相轨道见图 4 的实线.

粒子飞离条件是粒子的形变能和动能应大于吸附能,可由能量判据得出:

$$\frac{8}{15}E^* \sqrt{r\delta(t)^5} + \frac{4}{3}\pi R^3 \frac{\rho_0 v^2}{2} \geq \frac{1}{2}p_1 \delta(t) + \frac{\langle \hbar\omega \rangle R}{8\pi h} \quad (18)$$

左边第一、二项分别是弹性形变能和粒子动能;右边第一项描述反抗吸附所作的功,第二项描述接触的吸附能.条件(18)给出粒子速度(动量)和形变量在 (p, δ) 相平面的变化范围.(18)取等号时,就给出了边界线(图中的虚线).由于粒子形变量与激光能量密度有关(见(6)式),因此,不同的激光能量密度就给出了相平面中不同边界线.粒子相轨道与这边界线的关系会出现 3 种情况:(1)激光能量密度较小时,粒子相轨道与边界线无交点,此时,粒子不能被去除;(2)如激光能量密度较大,相轨道与边界线有多个交点,此时,粒子能被去除;(3)当激光能量密度刚好使粒子相轨道与边界线有一个交点时,则粒子刚好被去除,此时的激光能量密度就是激光净化能量密度阈值.图 4 给出能量密度为 300 mJ/cm^2 (曲线 3), 365 mJ/cm^2 (曲线 2), 500 mJ/cm^2 (曲线 1), 由(18)式取等号作出的边界线(为图中虚线 3,2,1).由图 4 看出,脉冲能量密度等于 365 mJ/cm^2 时,粒子相轨道与曲线刚好相交.由此可知,对 Al 基底吸附 Fe 粒子情况,激光净化能量密度阈值为 365 mJ/cm^2 ,而在文献[5]中,应用力学平衡条件求出的干燥激光净化能量密度阈值为 337.5 mJ/cm^2 ,文献[9]给的实验值为 400 mJ/cm^2 .显然,本文采用的方法,其结果更接近实验值.

5 结 论

①粒子被除去的方式有抛离式、滑动式、滚动式 3 种.粒子离开表面的原因是基底表面瞬时热膨胀使粒子离开表面,或粒子本身的热膨胀而使粒子离开表面.②当基底膨胀时,表面位置 Z_s 随时间的变化规律 $Z_s = Z_s(t)$ 由(6)、(8)所示;③粒子形变量和动量随时间的变化规律由(15)和(16)描述,其相轨道由这二式决定.④粒子飞离条件(18)描述的轨道与粒子运动的相轨道刚好相交的交点对应的能量密度,即为激光净化的能量密度阈值.本文用这种方法求出的结果与作者在文献[5]中应用力学平衡条件求出干激光净化的辐照能量密度阈值基本一致,也与文献[9]给出的值接近.

参考文献:

- [1] 金 杰,焦 强.激光在清洗方面的应用[J].光电子技术与信息,1997,10(5):29-32.
- [2] 苏 毅.高能激光系统中的物理问题[J].强激光与粒子束,2005,34(8):583-587.
- [3] 张 森,余 玮,林尊棋.激光脉冲宽度对有质动力加速电子的影响[J].光学学报,2005,25(11):1506-1509.
- [4] Yilbas B S, Shuja S Z. Laser Short-Pulse Heating of Surfaces[J]. J Phys D: Appl Phys, 1999, 32: 1947-1954.

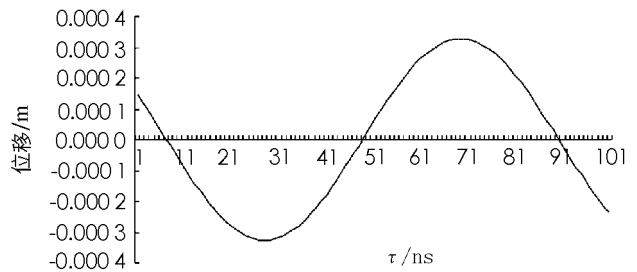


图3 粒子的形变量随时间的变化

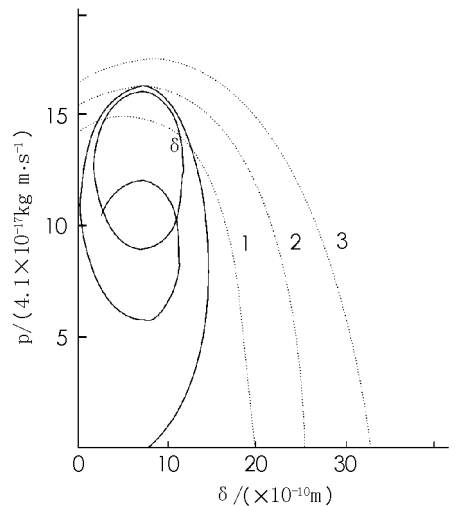


图4 粒子的相轨道

- [5] 卫红萍, 陈 武. 干燥激光净化能量密度阈值研究 [J]. 西南大学学报(自然科学版), 2007, 32(2): 21 — 25.
- [6] Ю С Лукьянчук. ЮВЖенг, ИФЛУ, к вопросу О Механизме сухой лазерной очистки [J]. ИАН, 2001, 65(4): 591 — 600.
- [7] 王竹溪, 郭敦仁. 特殊函数论 [M]. 北京: 科学出版社, 1979: 553 — 554.
- [8] 李振寰. 元素性质数据手册 [M]. 石家庄: 河北人民出版社, 1985: 13 — 26.
- [9] БЛ Веикоэ, Ё А Шахно. Физический механизм лазерной очистки поверхности [J]. И А Н, 2001, 65(4): 586 — 590.

Research on Phase Trace of Energy Density Valve for Laser Purification

WEI Hong-ping, CHEN Wu

*Department of The Computer Science, School of Engineering and Technology,
Chengdu Science and Engineering University, Chengdu 614007, China*

Abstract: A physical model of laser purification is established. The variation regularity of the position of the substrate surface illuminated with laser and the absorbing particles by time was discussed, and the phase trace of particles movement was made. Moreover, the energy density valve for laser purification according to the phase trace was studied. Let Laser purification of Fe on the Al substrate as example, the calculated result of energy density valve is better in according with the experimental result than the others results using other methods.

Key words: laser purification; energy density valve; phase trace

责任编辑 潘春燕