第 29 卷第 10 期　　强　激　光　与　粒　子　束　　Vol. 29, No. 10
2017 年 10 月　　HIGH POWER LASER AND PARTICLE BEAMS　　Oct., 2017

SOI 纳米光波导激光熔凝光整加工温度场的数值模拟及分析*

闫树斌[1]，　陈慧斌[2]，　韵力宇[3]，　焦国太[2]

(1. 中北大学 仪器科学与动态测试教育部重点实验室，太原 030051；
2. 中北大学 机电工程学院，太原 030051；3. 中国人民武装警察部队指挥学院，天津 300250)

摘　要： 激光表面熔凝技术可有效降低纳米光波导侧壁粗糙度进而减小光传输的散射损耗。为明确波导侧壁在 KrF 准分子激光表面熔凝过程的温度场演化规律，考虑材料参数随温度变化和相变潜热的影响，建立了纳米光波导侧壁激光熔凝的二维有限元数值模型，研究了熔池边界的推进行为与不同工艺参数的映射关系。结果表明：熔池形成于波导上表面与迎光侧壁夹角处；激光入射角度一定时，熔池熔深与平均能量密度正相关；熔池形貌受控于激光入射角度，随着入射角度的减小，熔池形貌由单边 U 形过渡为单边 V 形最终呈带钝角单边 V 形。分析表明，较大激光入射角对应的熔池形貌更有利于波导侧壁的光整加工；据此提出先确定激光入射角度以优化熔池形貌，再选取合适平均能量密度以获得足够熔化深度的工艺方法。

关键词： 激光加热；　表面微加工；　有限元方法；　光波导；　表面粗糙度

中图分类号： O532　　**文献标志码：** A　　**doi**:10.11884/HPLPB201729.170115

基于绝缘体上硅(SOI)材料的纳米光波导是在微系统集成制造技术与大规模、高集成度光电器件系统的发展下应运而生的新型波导[1-2]，其基于 SOI 材料 Si 波导层与 SiO_2 限制层大折射率差下较强的局域光场作用和标准 CMOS 工艺完全兼容的优点，在光源[3]、光量子计算[4]、光生化传感[5]等领域有着重大潜在应用价值。因此，国内外诸多学术机构投入到纳米光波导制造技术研究中。其中，波导侧壁较大的表面粗糙度引起的散射损耗成为限制纳米光波导及其器件发展的重要瓶颈[6]。采用电感耦合等离子体刻蚀和反应离子刻蚀是目前制造 SOI 光波导的主流技术途径，高能离子束的轰击造成了波导侧壁不可避免的较大粗糙度。虽然优化工艺过程和参数可以在一定程度上改善侧壁粗糙缺陷，但仍不能满足科研及应用的需求[7-8]。因此，波导侧壁的光整加工成为制备高精度光电器件的关键技术之一。

目前，针对 SOI 纳米光波导表面的光整加工主要包括三种技术：热氧化[9]、氢退火[10]和激光表面熔凝(LSM)[11]。其中，LSM 技术是利用高功率准分子激光束的热效应瞬时加热波导侧壁表面至熔化到一定深度，然后自冷使熔层凝固获得较光滑表面的方法，其具有修复能力强、热影响区域小等优点，且避免了热氧化引起的波导尺寸减小和氢退火中高温退火对波导表面晶体质量的损坏。激光修复纳米光波导侧壁粗糙缺陷在国内外已取得了一定的研究成果。2008 年 Eih-Zhe Liang[12]等使用 KrF 准分子激光优化工艺参数后，在 75°入射角和 1.4 J/cm^2 能量密度的激光作用下，将波导侧壁均方根粗糙度由 14 nm 降至 0.24 nm，其传输损耗计算值达到 1 dB/cm；2009 年普林斯顿大学 Qiangfei Xia[13]等使用 XeCl 激光器制备出了侧壁平均粗糙度值 3 nm 的条形波导，传输损耗由 53 dB/cm 降至 3 dB/cm，并将该技术命名为“液化自修复(SPEL)技术”；2014 年日本京都大学的科研人员利用脉宽 20 ns 的 KrF 准分子激光降低波导侧壁粗糙度的同时提高了波导的抗拉机械性能[14]。由于激光对纳米光波导粗糙侧壁的光整加工涉及微纳加工与亚纳米表面粗糙度测量，其机理包括热-相变-流体等多物理过程，现有文献数量十分有限，实验所提供的数据较少，且仿真模型多停留在一维假定，不能反映工艺参数变化对熔池温度场的影响，而准确选择工艺参数进而精确控制熔池形貌和持续时长对侧壁质量控制、保持波导尺寸完整性等有着重要意义。

本文结合文献[12]的实验观测结果，通过分析辐照时波导吸收激光能量的分布情况，建立了脉冲宽度 25 ns 的 KrF 准分子激光(波长248 nm)辐照下SOI纳米光波导热响应的二维数值模型，详细研究了不同平均

* **收稿日期：**2017-04-11；　**修订日期：**2017-06-22
基金项目：国家自然科学基金项目(61675185，61275166)；山西省自然科学基金项目(2016D01011008)；山西省高等院校中青年拔尖创新人才；山西省高校“131”领军人才；山西省留学归国择优基金项目；中北大学杰出青年基金项目；山西省研究生教育创新基金项目(2016SY048)
作者简介：闫树斌(1975－)，男，教授，博导，从事量子传感 MEMS 传感器件相关研究；shubin_yan@nuc.edu.cn。

能量密度和入射角度下熔池温度场和熔池边界的演化规律，结合现有的有关波导侧壁在激光熔凝过程中的知识，提出先确定激光入射角度再根据侧壁粗糙形貌特征选取合适平均能量密度的工艺方法。

1　理论模型

用于制造纳米光波导的 SOI 材料由 Si 导波层、SiO_2 限制层和体硅衬底构成。为提高导光性能，Si 导波层最优化宽度 500 nm、高度 220 nm 以实现信号光的单模传输，SiO_2 限制层高度达 3 μm 以减少光波泄露到体硅衬底。激光对波导侧壁的光滑化即是对 Si 导波层粗糙侧壁的熔凝光整加工，在这里定义导波层侧壁为波导侧壁以便描述。激光辐照下波导吸收激光能量升温直至熔化形成熔池，这一过程伴随着侧壁粗糙表面凸起结构的熔化，熔池内液体硅在表面张力、粘滞力、重力等作用下流动并在降温后凝固形成新的较光滑表面。由于考虑流体流动和波导变形等过程较为复杂，简化后的温度场模拟基于如下假设：(1) 材料均匀且各向同性；(2) 忽略熔化对流和传质，液相区域作热传导处理；(3) 模型处于真空环境，纳秒单脉冲激光作用下忽略热辐射的影响；(4) 忽略波导表面不平整对入射激光的影响。通常情况下 KrF 准分子激光器输出激光束为高斯平顶分布，经过整形均束装置可得到任意形状的能量近似均匀光斑[15]。一束能量均匀分布的激光辐照波导侧壁可简化为如图 1 的二维模型。

图 1 中标记导波层四个尖角分别为 A,B,C,D。为与激光入射方向相对应，A 点设为坐标原点，x 轴正向沿 AD 方向，y 轴正向沿 AB 方向。Si 导波层高度 $a=220$ nm，宽度 $b=500$ nm，SiO_2 限制层尺寸经过多次试验采用 $c=1000$ nm，$d=1300$ nm 以确保热传导过程中导波层温度场计算的准确性，且忽略体硅衬底层。由于激光束光斑尺寸较大，波导的上表面 AD、侧壁 AB 均受到激光辐照，记上表面 AD 入射角 θ_{1i} 为激光辐照整个波导的入射角度 θ，即 $\theta=\theta_{1i}$，同时部分激光折射入波导内部，其穿透深度十几 nm，而感兴趣的熔化深度为几十 nm，因此应将脉冲激光束视为体热源，假设波导吸收的激光能量全部转化为热，AD，AB 表面单位面积的热产生率可由强吸收条件下的 Fresnel 公式表示[16]

$$G(t)=E_s\cos\theta_t g(t)\left\{r_\perp\frac{n_2}{n_1}\left|\frac{2n_1\cos\theta_i}{n_1\cos\theta_i+(n_2+\mathrm{i}k_2)\cos\theta_t}\right|+r_\parallel\frac{n_2}{n_1}\left|\frac{2n_1\cos\theta_i}{n_1\cos\theta_t+(n_2+\mathrm{i}k_2)\cos\theta_i}\right|\right\} \tag{1}$$

式中：E_s 为激光平均能量密度；θ_i 与 θ_t 分别为激光的入射角与折射角；$g(t)$ 为激光能量的时间分布函数，根据文献[12]中测量脉冲宽度 25 ns 的 KrF 准分子激光器输出能量先迅速增大后逐渐减小的特点，为近似表达该波形，采用截取高斯函数部分区间的方法获得如图 2 所示的仿真用函数曲线；真空折射率 $n_1=1$；硅折射率实部 $n_2=1.57$；消光系数 $k_2=-3.565$；$r_\perp$，$r_\parallel$ 分别为激光的 s 分量与 p 分量所占比例，对于能量均匀光束取 $r_\perp=r_\parallel=0.5$。

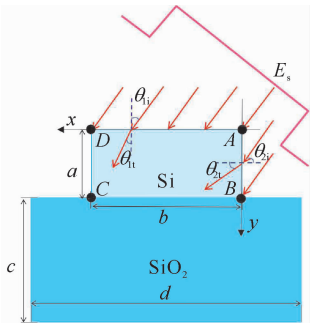


Fig. 1　Schematic diagram of laser irradiation on SOI nano optical waveguide sidewall

图 1　激光辐照 SOI 纳米光波导侧壁示意图

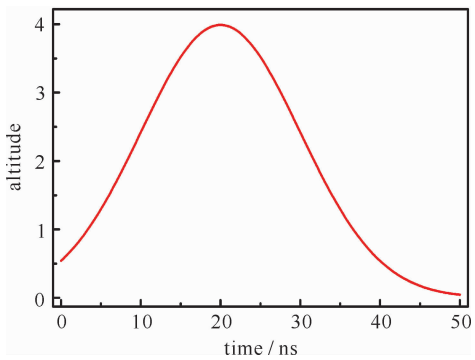


Fig. 2　Curve for laser energy changing with time

图 2　激光能量随时间变化曲线

进而，体热源项包括 AD 表面热源 Q_1 和 AB 侧壁热源 Q_2，分别表示为

$$Q_1=G(t)\,|_{\theta_i=\theta_{1i},\theta_t=\theta_{1t}}\,\alpha(T)f_1(x,y)\exp[-\alpha(T)\cos\theta_{1t}y] \tag{2}$$

$$Q_2=G(t)\,|_{\theta_i=\theta_{2i},\theta_t=\theta_{2t}}\,\alpha(T)f_2(x,y)\exp[-\alpha(T)\cos\theta_{2t}x] \tag{3}$$

式中：θ_{1i}，θ_{1t} 分别为激光辐照 AD 表面的入射角与折射角；θ_{2i}，θ_{2t} 分别为激光辐照 AB 表面的入射角与折射角；$\alpha(T)$ 为硅的吸收系数；$f_1(x,y)$ 与 $f_2(x,y)$ 分别是折射入波导内激光的空间分布函数，应满足

$$f_1(x,y)=\begin{cases}0<x-\dfrac{y}{\tan(\pi/2-\theta_{1t})}<b\\ y\leqslant a\end{cases} \tag{4}$$

$$f_2(x,y)=\begin{cases}0<y-\dfrac{x}{\tan(\pi/2-\theta_{2t})}<a\\ y\leqslant a\end{cases} \tag{5}$$

液相区域作热传导处理后，波导温度场 $T(x,y,t)$ 满足热传导方程[17]，即

$$\rho(T)c(T)\frac{\partial T}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}\left[k(T)\frac{\partial T}{\partial x}\right]+\frac{\partial}{\partial y}\left[k(T)\frac{\partial T}{\partial y}\right]+Q \tag{6}$$

式中：$\rho(T)$，$c(T)$，$k(T)$ 分别表示材料的密度、比热容、导热系数；热源项 $Q=Q_1+Q_2$。

波导暴露于真空中的表面视为热绝缘，边界条件和初始条件分别为

$$-k(T)\left(\frac{\partial T}{\partial n}\right)_{\{w\}}=0 \tag{7}$$

$$T(x,y,0)=T_0 \tag{8}$$

式中：$\{w\}$ 表示暴露于真空中表面的集合；n 为其表面外法向；T_0 为初始温度 300 K。

固液相变采用等效比热容法处理，假设相变发生在 $T_m-\Delta T\sim T_m+\Delta T$ 温度范围，其中相变半径 ΔT 设为 2 K 以提高模型收敛性。等效比热容 c_e 可表示为[18]

$$c_e=c(T)+\delta H_m \tag{9}$$

式中：硅熔化潜热 $H_m=1800$ J/g；平滑阶跃函数 δ 表示为

$$\delta=\frac{\exp[-(T-T_m)^2/(\Delta T)^2]}{\sqrt{\pi}\Delta T} \tag{10}$$

式中：T_m 为硅熔点 1685 K。由于相变半径较小，近似认为熔化前沿与固化前沿重合并通过 T_m 等温线表征熔池边界。

热作用过程中材料的热物性参数随温度表现出高度的非线性，采用有限元算法可精确求解该非线性过程。Si 导波层的温度变化大且涉及固液相变，其比热容和吸收系数如图 3 所示，密度和导热系数如表 1 所示，SiO_2 限制层热物性参数采用常数如表 2 所示。

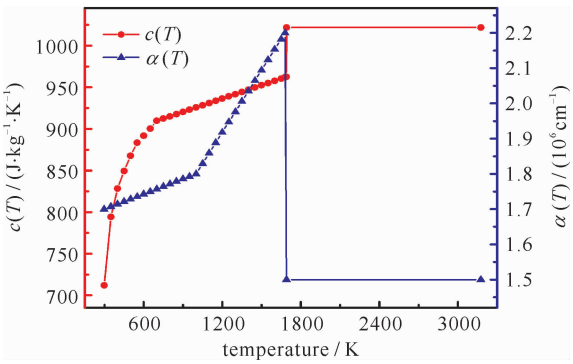


Fig. 3 Curves for specific heat capacity and optical absorption coefficient of silicon changing with temperature

图 3 硅比热容和吸收系数随温度变化曲线

表 1 硅热物性参数

Table 1 Thermal physical parameters of silicon

phase	$\rho(T)/(\mathrm{kg\cdot m^{-3}})$	$k(T)/(\mathrm{W\cdot cm^{-1}\cdot K^{-1}})$
solid state	$2330-2.19\times10^{-2}T$	$299/(T-99)$
liquid state	$2540-2.19\times10^{-2}T-1.21\times10^{-5}T^2$	0.62

表 2 二氧化硅热物性参数

Table 2 Thermal physical parameters of silica

specific heat/$(\mathrm{J\cdot kg^{-1}\cdot K^{-1}})$	density/$(\mathrm{kg\cdot m^{-3}})$	thermal conductivity/$(\mathrm{W\cdot cm^{-1}\cdot K^{-1}})$
730	2200	0.014

2 激光熔凝波导侧壁热响应规律

图 4 所示为平均能量密度 0.75 J/cm^2 的激光垂直辐照波导侧壁($\theta=90°$)瞬时温度分布，图中黑色曲线为熔池边界。为定量描述熔池的演化行为，定义熔池在 y 轴正向的推进尺寸为熔化宽度，垂直波导侧壁在 x 轴正向的推进尺寸为熔化深度。由图 4 可以看出，波导在激光辐照下温度迅速升高，热影响区域逐渐扩大，温度空间分布遵循以下规律：径向分布接近迎光面 AB 升温较快，轴向分布接近上表面 AD 升温较快。图 4(a) $t=21$ ns 的温度场分布表明起初形成的熔池熔化宽度较大、熔化深度较小；从图 4(b)可以看出 25 ns 时波导侧壁

接近完全熔化，熔深逐渐扩大；图 4(c)中 32 ns 时波导侧壁完全熔化，熔池尺寸达到最大；图 4(d)和(e)分别为 t =42，49 ns 温度场分布，可见激光辐照后期熔池尺寸逐渐减小。

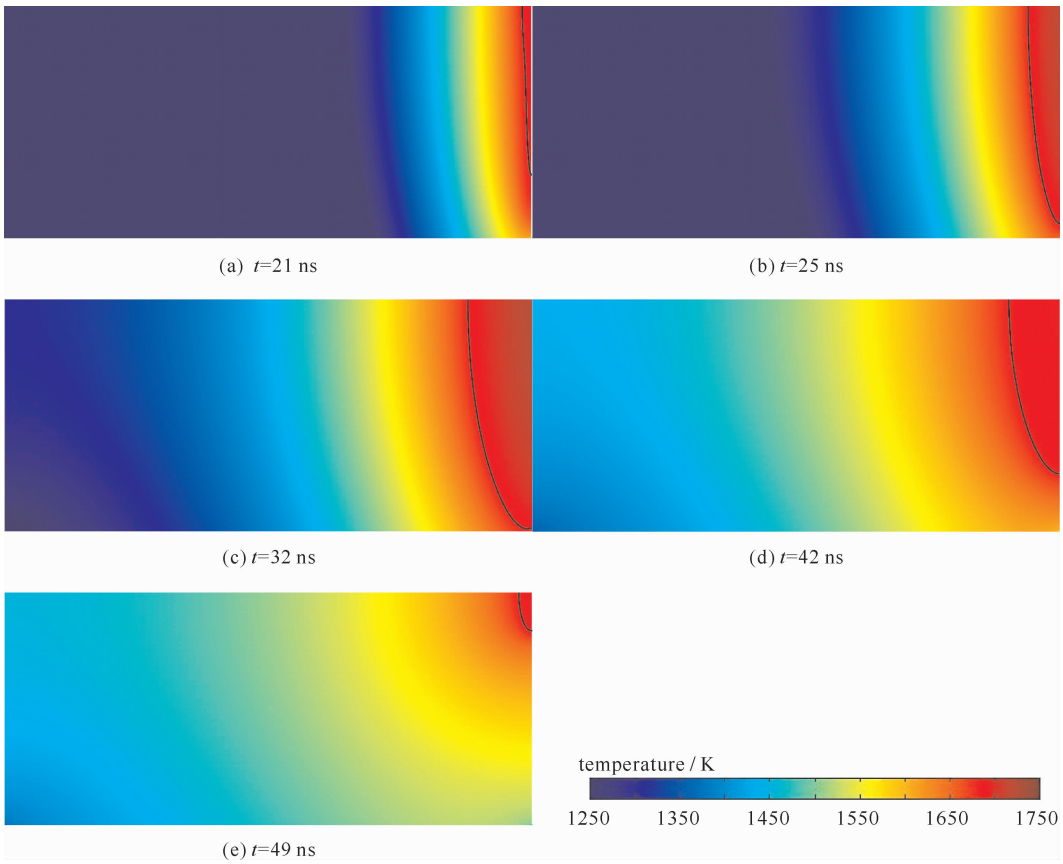


Fig. 4　Transient temperature distributions and melting pool shapes of waveguide with incident angle $\theta=90°$, average laser energy density $E_s=0.75$ J/cm^2

图 4　$\theta=90°$，$E_s=0.75$ J/cm^2 波导瞬时温度场和熔池形貌

结合熔池温度场演化和热传导规律分析可知，由于波导 AB，CD，AD 均为热绝缘表面，激光辐照下侧壁 AB 最先升温并向基体传热，因此接近 AB 表面远离 BC 表面温升较快，即 A 点温升最快且最先达到熔点并熔化形成熔池。在激光辐照 32 ns 时，熔池吸收的激光能量与传递到基体的能量达到热平衡，熔池尺寸达到最大。辐照后期，激光能量减小使熔池吸收的能量小于传递到基体的能量，熔池尺寸逐渐缩小，接近 AB 表面远离 BC 表面降温较慢，因此熔池最终在 A 点消失。

为明确熔池的温度演化规律，提取 A 点在不同 E_s 作用下的温升数据得到图 5 所示温度演化曲线。由图 5 可见，随着 E_s 的增加升温曲线斜率逐渐增大，即 A 点温升速度逐渐加快。这是因为硅材料在升温过程中，吸收系数逐渐增大而热传导系数逐渐减小，使得A点沉积的激光能量增多且更不易通过热传导扩散；从温升曲线＃2 到＃6 可以看到曲线在硅的熔点处发生偏折，且 E_s 越小偏折越严重，这是因为 E_s 的递增致使波导温升直至熔化，固液相变需要吸收潜热，同时相变后液体硅的吸收系数减小，两者的综合作用导致升温困难。特别地，$E_s=0.6$ J/cm^2 时可以明显看到固液相变的动态平衡平台期，这与文献[19]的研究相一致；随着 E_s 的进一步增加，平台期逐渐缩短并演变为一个拐点，且突破相变平台后液体硅温升与 E_s 成正比。在脉冲激光辐照后期，热传导的散热作用占主导地位，A 点温度逐渐下降，并进入液固相变回凝平台期。比较曲线＃4 到＃6 可知液固相变平台期持续时长与 E_s 成正比：E_s 越大，波导中沉积的热量越多，因此热扩散所需时间越长。

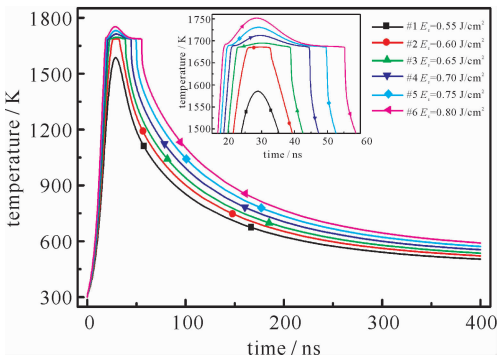


Fig. 5　Temperature evolutions of point A for different E_s with $\theta=90°$

图 5　$\theta=90°$，不同 E_s 作用下 A 点温度演化

3 工艺参数对熔池温度场的影响

根据文献[12]的研究，波导侧壁粗糙表面在激光辐照熔化后，液体硅在熔池的持续时间内通过质量迁移在液固相变回凝后形成较光滑表面。实现熔池的最大熔宽、足够熔深和较长熔化时间有利于回凝后形成更光滑的波导侧壁，同时在满足熔深尺寸要求的前提下，需尽量减小 BC，CD，AD 表面的熔化以减小回凝后波导的变形，即需尽量保持波导尺寸完整性。因此，应对影响熔池温度场的工艺参数进行研究。

3.1 不同平均能量密度下的熔池温度场

图 6 给出了 $\theta=90°$，E_s 由 0.60 J/cm^2 增大到 0.80 J/cm^2（间隔 0.05 J/cm^2）波导熔池尺寸达到最大时刻（$t=32$ ns）的温度场分布。图 6 可见随着 E_s 增加，熔池最大尺寸逐渐扩大。图 6(a)中 $E_s=0.60$ J/cm^2，可以发现熔池尺寸较小，将不能降低波导侧壁粗糙度；图 6(b)中 $E_s=0.65$ J/cm^2，熔池熔宽逐渐增大而熔深较小，其对侧壁粗糙表面的光整加工能力较弱；图 6(c)中 $E_s=0.70$ J/cm^2，熔池熔宽接近最大，熔深也有一定加深，表明 E_s 的增加可进一步增大熔池尺寸；当 E_s 增加到 0.75 J/cm^2 时，图 6(d)中熔化宽度达到最大即波导侧壁完全熔化，熔化深度已满足侧壁光整加工的要求；图 6(e) $E_s=0.80$ J/cm^2 的熔池边界表明进一步增加的 E_s 将导致 BC 表面的熔化，这将引起回凝后波导的过大变形。同时，比较图 6(b)～(e)可见熔池边界呈单边 U 形且增加 E_s 熔池形貌基本不变。因此可推知：增加激光平均能量密度可增大熔池尺寸，而对熔池形貌基本不产生影响。

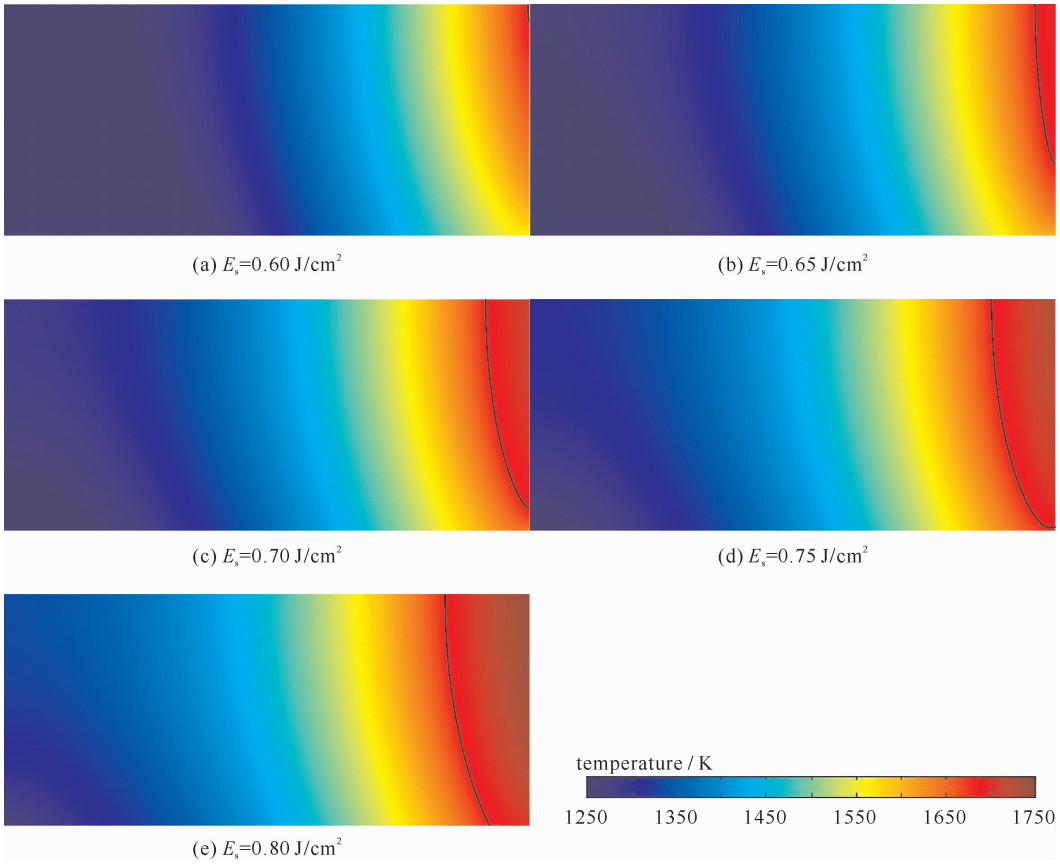


Fig. 6 Temperature distributions and melting pool shapes of waveguides at $t=32$ ns for different E_s with $\theta=90°$

图 6 $\theta=90°$，不同 E_s 作用下 $t=32$ ns 时刻波导温度场和熔池形貌

由图 4 的研究结果可知，波导侧壁不同高度对应的熔池熔深和持续时长不同。选取图 6 中获得较理想熔池的激光参数 $\theta=90°$，$E_s=0.75$ J/cm^2，通过提取波导侧壁不同高度处熔池熔深随时间的变化数据，可实现波导侧壁熔深演化行为的定量研究，如图 7 所示。可以看出 $Y=50,100,150,200$ nm 对应的最大熔深分别为 61，55，44，24 nm，熔池持续时长分别为 30，27，24，16 ns。

图 8 给出了 $\theta=90°$，E_s 由 0.60 J/cm^2 增大到 0.80 J/cm^2 波导侧壁不同高度对应的最大熔深变化曲线。可以看出，侧壁同一高度对应熔深与 E_s 成正比；三条谱线基本平行表明：增大 E_s，波导侧壁不同高度处熔池边界的推进尺寸基本相同，即 E_s 增大过程中熔池形貌基本保持不变。

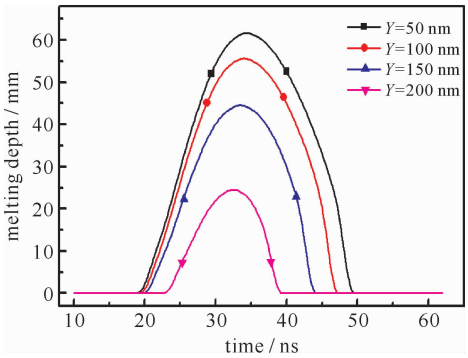


Fig. 7　Evolutions of melting depth at different height of waveguide sidewall with $\theta=90°$, $E_s=0.75$ J/cm^2

图 7　$\theta=90°$，$E_s=0.75$ J/cm^2 波导侧壁不同高度熔深演化

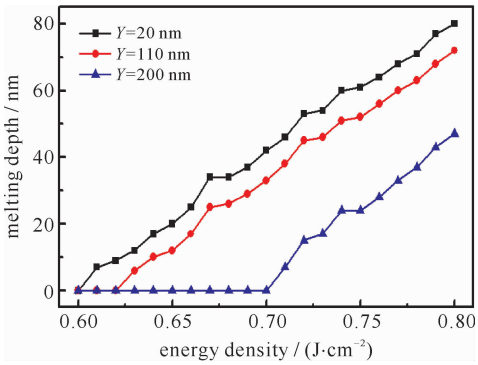


Fig. 8　Variation in max melting depth at different height of waveguide sidewall with change in E_s

图 8　不同侧壁高度对应最大熔深随 E_s 的变化

3.2　不同激光入射角度下的熔池温度场

减小激光入射角度 θ，AD 表面将受到激光辐照引起波导沉积能量迅速增大。采用等间距减小 θ 并相应减小 E_s 的方法可在形成最大熔池时刻($t=32$ ns)获得较一致侧壁熔宽，如图 9 所示。比较图 9(a)～(d)，在侧壁熔宽基本相同情况下，随着 θ 的减小熔池尺寸逐渐扩大，熔池形貌由单边 U 形过渡为单边 V 形最终呈带钝角单边 V 形；同时，θ 的减小引起熔池沿 AD 表面的推进尺寸增加，这将不利于保持波导尺寸完整性。θ 由 60°[图 9(d)]减小到 50°[图 9(e)]，侧壁熔宽明显减小、CD 表面熔化尺寸迅速增大，意味着波导粗糙侧壁未熔区域增加、回凝后几何变形增大，即 LSM 对波导侧壁的光整加工能力逐渐退化。由此可得 LSM 技术用于 SOI 纳米光波导侧壁光整加工的工艺参数 θ 应大于 60°，且优选较大值。

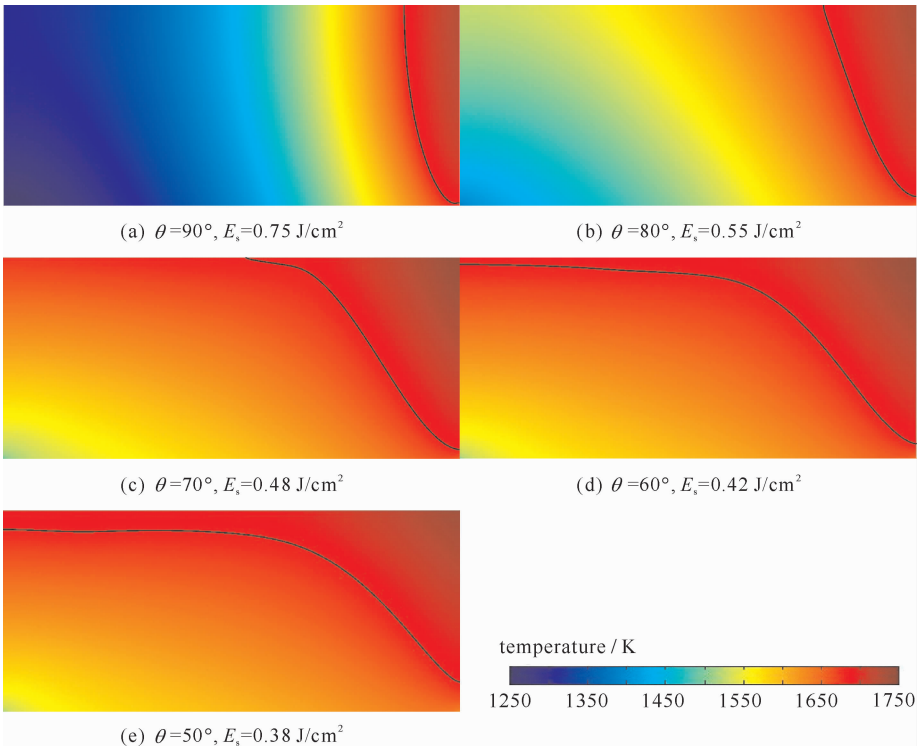


Fig. 9　Temperature distributions and melting pool shapes of waveguide with different parameters at $t=32$ ns

图 9　不同工艺参数，$t=32$ ns 时刻波导熔池温度场和熔池形貌

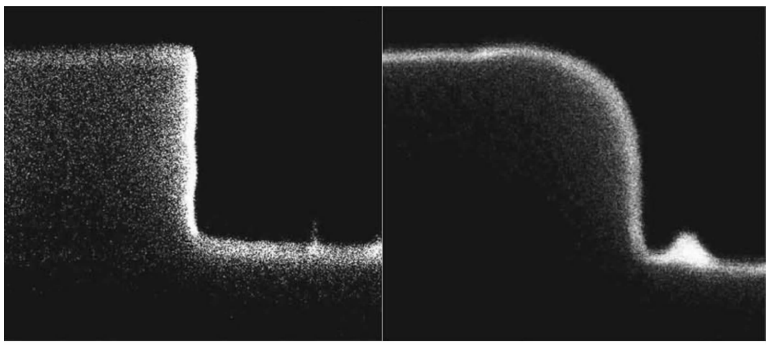
4　分析与讨论

集成光路中，波导间隔高度比定义为相邻波导的间隔宽度 l 与波导高度 a 的比值，记 $\tan\beta=l/a$。对于入射角度 θ 大于 β 的激光将受到相邻波导的遮挡在被加工波导侧壁表面形成未辐照的阴影区域。为防止相邻波导的遮挡，在 $a=220$ nm，$60°<\theta<\beta$ 条件下，集成光路的波导间隔宽度 l 应满足 $l>382$ nm，该间隔完全满足光

路集成的要求。

图 9 表明采用 $\theta=90°$，$E_s=0.75$ J/cm^2[图 9(a)]；$\theta=80°$，$E_s=0.55$ J/cm^2[图 9(b)]；$\theta=70°$，$E_s=0.48$ J/cm^2[图 9(c)]；$\theta=60°$，$E_s=0.42$ J/cm^2[图 9(d)]的激光辐照截面尺寸 220 nm×500 nm 波导均可获得较理想熔池。由于集成光路的集成度受器件设计和工艺水平限制，参数 β 在波导制造完成后便已确定，因此在 $60°<\theta<\beta$ 条件下工艺流程应先确定激光入射角度 θ（优选 $\theta=\beta$），再选取合适的平均能量密度以获得足够熔池熔深。

SOI 纳米光波导粗糙侧壁光整加工使用的激光参数与波导几何尺寸有关，本文的建模方法适用于不同尺寸的 SOI 纳米光波导。图 10 为文献[12]采用 $\theta=75°$，$E_s=1.4$ J/cm^2 的激光辐照截面尺寸 500 nm×500 nm 波导光整加工前后截面 SEM 图，可以看出激光辐照下波导矩形截面的尖角变为圆弧，一维数值仿真表明该工艺参数下熔池熔深为 212 nm；图 11 所示为采用二维仿真模型在 $\theta=75°$，$E_s=1.2$ J/cm^2 激光作用下获得的熔池尺寸达到最大时刻温度场分布，在波导半高位置（$Y=110$ nm）处熔池熔深为 154 nm；考虑到实验与仿真材料参数以及激光能量分布的差异，仿真结果与文献[12]结果基本一致，且仿真分析结论与实验结论一致，证明了模型的准确性与适用性。



(a) before laser surface metting(LSM)　　(b) after LSM

Fig. 10　SEM cross-sectional views of waveguide

图 10　波导截面 SEM 图

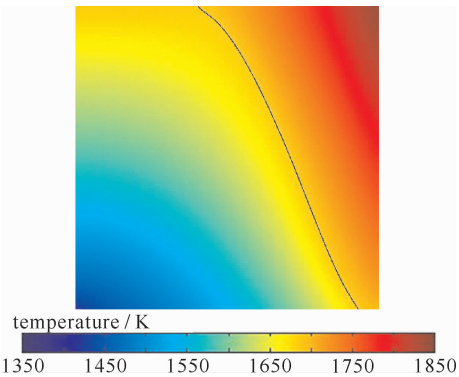


Fig. 11　Temperature distribution and melting pool shape of 500 nm×500 nm waveguide

图 11　500 nm×500 nm 波导熔池温度场和熔池形貌

5　结　论

基于传热学理论建立了 KrF 准分子激光辐照 SOI 纳米光波导侧壁的熔凝光整加工二维数值模型，研究了不同工艺参数下熔池温度场的时空分布规律。结果表明，熔池形成于波导上表面与迎光侧壁夹角处；激光入射角度一定时，熔池熔深与平均能量密度成正比，熔池形貌随激光入射角度的减小由单边 U 形过渡为单边 V 形最终呈带钝角单边 V 形。根据波导光整加工对侧壁熔宽和尺寸完整性的要求，指出 LSM 用于波导侧壁加工的适用条件为激光入射角度大于 60°且优选较大值，并结合光波导在集成光路中的应用提出先确定激光入射角度，再选取合适平均能量密度的工艺方法。所建模型适用于不同几何尺寸 SOI 纳米光波导粗糙侧壁激光熔凝光整加工的研究，对 LSM 在微纳加工的应用具有重要意义。此外，关于波导变形和熔凝后侧壁表面粗糙度的控制等问题仍需对表面张力作用下流场的质量迁移和熔池自由界面捕捉等过程进行深入的实验研究和理论分析。

参考文献：

[1] Chen Xia, Li Chao, Tsang H K. Device engineering for silicon photonics[J]. *NPG Asia Materials*, 2011, **3**(1): 34-40.

[2] 任馨宇，菅傲群，段倩倩，等. SOI 基纳米光栅耦合器的结构改进与仿真验证[J]. 强激光与粒子束，2015，**27**：**024123**. (Ren Xinyu, Jian Aoqun, Duan Qianqian, et al. Improvement and simulation model validation of nano-grating coupler based on SOI structure. *High Power Laser and Particle Beams*, 2015, **27**: **024123**)

[3] Jayatilleka H, Nasrollahy-Shiraz A, Kenyon A J. Electrically pumped silicon waveguide light sources[J]. *Optics Express*, 2011, **19**(24): 24569-24576.

[4] Liu Liu, Kumar R, Huybrechts K, et al. An ultra-small, low-power, all-optical flip-flop memory on a silicon chip[J]. *Nature Photonics*, 2010, **4**(3): 182-187.

[5] Estevez M C, Alvarez M, Lechuga L M. Integrated optical devices for lab-on-a-chip biosensing applications[J]. *Laser & Photonics Reviews*, 2012, **6**(4): 463-487.

[6] Dai Daoxin, Bauters J, Bowers J E. Passive technologies for future large-scale photonic integrated circuits on silicon: polarization handling,

light non-reciprocity and loss reduction[J]. *Light: Science & Applications*, 2012, **1**: e1.

[7] Lee D H, Choo S J, Jung U, et al. Low-loss silicon waveguides with sidewall roughness reduction using a SiO_2 hard mask and fluorine-based dry etching[J]. *Journal of Micromechanics and Microengineering*, 2014, **25**: **015003**.

[8] Wood M G, Chen Li, Burr J R, et al. Optimization of electron beam patterned hydrogen silsesquioxane mask edge roughness for low-loss silicon waveguides[J]. *Journal of Nanophotonics*, 2014, **8**(1): **083098**.

[9] Shi Zujun, Shao Shiqian, Wang Yi. Improved the surface roughness of silicon nanophotonic devices by thermal oxidation method[J]. *Journal of Physics: Conference Series*, 2011, **276**: **012087**.

[10] Duan Qianqian, Ren Xinyu, Jian Aoqun, et al. Micro-mechanism of silicon-based waveguide surface smoothing in hydrogen annealing[J]. *Chinese Physics Letters*, 2016, **33**: **126801**.

[11] Mitwally M E, Tsuchiya T, Tabata O, et al. Surface roughness modification of free standing single crystal silicon microstructures using KrF excimer laser treatment for mechanical performance improvement[J]. *Journal of Surface Engineered Materials and Advanced Technology*, 2015, **5**(1): 28-41.

[12] Liang E Z, Hung S C, Hsieh Y P, et al. Effective energy densities in KrF excimer laser reformation as a sidewall smoothing technique[J]. *Journal of Vacuum Science & Technology B*, 2008, **26**(1): 110-116.

[13] Xia Qiangfei, Murphy P F, Gao He, et al. Ultrafast and selective reduction of sidewall roughness in silicon waveguides using self-perfection by liquefaction[J]. *Nanotechnology*, 2009, **20**: **345302**.

[14] Mitwally M E, Tsuchiya T, Tabata O, et al. Improvement of tensile strength of freestanding single crystal silicon microstructures using localized harsh laser treatment[J]. *Japanese Journal of Applied Physics*, 2014, **53**: **06JM03**.

[15] 靳羽华，赵艳，蒋毅坚. 准分子激光微透镜整形均束装置[J]. 中国激光，2015，**42**：**0602003**.（Jin Yuhua, Zhao Yan, Jiang Yijian. Microlens beam shaping and homogenizing optical system for excimer laser. *Chinese Journal of Lasers*, 2015, **42**: **0602003**）

[16] Klingshirn C F, Baltz R V, Haug H. Semiconductor optics[M]. Karlsruhe: Springer-Verlag, 2005: 44-47.

[17] 王玺，方晓东. 准分子激光辐照 K9 玻璃的热力效应分析[J]. 强激光与粒子束，2016，**28**：**041002**.（Wang Xi, Fang Xiaodong. Thermal and mechanical damage in K9 glass irradiated by KrF excimer laser. *High Power Laser and Particle Beams*, 2016, **28**: **041002**）

[18] Li Zewen, Zhang Hongchao, Shen Zhonghua, et al. Time-resolved temperature measurement and numerical simulation of millisecond laser irradiated silicon[J]. *Journal of Applied Physics*, 2013, **114**: **033104**.

[19] Wang Xi, Shen Zhonghua, Lu Jian, et al. Laser-induced damage threshold of silicon in millisecond, nanosecond, and picosecond regimes [J]. *Journal of Applied Physics*, 2010, **108**: **033103**.

Numerical simulation and analysis on temperature field for laser melting finishing on SOI nano optical waveguide

Yan Shubin[1], Chen Huibin[2], Yun Liyu[3], Jiao Guotai[2]

(1. *Key Laboratory of Instrumentation Science and Dynamic Measurement (Ministry of Education)*, *North University of China*, *Taiyuan* 030051, *China*;

2. *College of Mechatronic Engineering*, *North University of China*, *Taiyuan* 030051, *China*;

3. *People Armed Police Command College*, *Tianjin* 300250, *China*)

Abstract: Laser surface melting technology can effectively reduce nano optical waveguide sidewall roughness for scattering loss reduction. To clarify the temperature field evolution law of KrF excimer laser surface melting on waveguide sidewall, a two dimensional finite element numerical model is established, which has taken into account the effects of temperature dependences of material parameters and latent heat. Several investigations have been made about the relationships between the carry behavior forward of melting pool boundary and different processing parameters. Simulation results indicate that melting pool begins developing in the corner between the upper surface of waveguide and the laser-facing sidewall surface. At a given laser incidence angle, the depth of melting pool is correlated positively with the average energy density. Melting pool shape is mainly controlled by laser incident angle: with the decreasing incidence angle, the melting pool appears firstly single-edge U-shaped, then single-edge V-shaped, and finally single-edge V-shaped with an obtuse angle. Analysis shows that melting pool shape induced by a larger laser incidence angle is more favourable to the finishing process of waveguide sidewall. On this basis, a new process method is proposed for determinating laser incident angle to optimize the shapes of melting pool and then selecting the appropriate laser energy density to obtain sufficient melting depth.

Key words: laser heating; surface micromachining; finite element method; optical waveguides; surface roughness

PACS: 02.60.Cb; 42.62.-b; 61.80.Ba