

金刚石压砧加载下激光超声的有限元模拟

冯 文 杨德兴 廖 威 郭钰宁

(西北工业大学理学院陕西省光信息技术重点实验室, 教育部空间应用物理与化学重点实验室, 陕西 西安 710072)

摘要 采用有限元方法(FEM)建立了金刚石压砧(DAC)加载下脉冲激光激发超声波的数值分析模型。数值模拟了高压下样品中的瞬态温度场和超声位移场,得到了激光垂直照射下入射点异侧不同位置处的超声波波形,分析了超声位移场随时间变化的特征。结果表明,在 DAC 加载下,热弹作用产生的超声波具有明显的指向性,其纵波能量主要集中于激光入射方向附近,而横波的能量集中于偏离激光入射点 $30^\circ \sim 55^\circ$ 的倾角之间。上述特征与自由面热弹作用结果差异很大,而与自由面烧蚀作用结果相似。

关键词 激光技术;激光超声;位移场;金刚石压砧;有限元方法

中图分类号 TN249 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/CJL201138.0803005

Numerical Simulation of Laser Induced Ultrasonic in a Diamond Anvil Cell by Finite Element Method

Feng Wen Yang Dexing Liao Wei Guo Yuning

(The Key Laboratory of Space Applied Physics and Chemistry, Ministry of Education,
Shaanxi Key Laboratory of Optical Information Technology, School of Science,
Northwestern Polytechnical University, Xi'an, Shaanxi 710072, China)

Abstract A numerical simulation model for a pulsed laser induced ultrasonic in a diamond anvil cell (DAC) is established by using finite element method (FEM). The transient temperature field and ultrasonic displacement field in sample under high pressure are simulated. Ultrasonic waveforms at different positions in the rear face of sample under the irradiation of a vertically incident laser pulse are obtained, and the characteristics of ultrasonic displacement field changing with time are analyzed. The numerical results show that, ultrasonic wave generated in thermoelastic effect has obvious directionality in a DAC. The energy of longitudinal wave is concentrated near the laser incident direction, and the energy of shear wave is concentrated between 30° and 55° that deflects from the laser incident point. The characteristics are different from the results of free surface in thermoelastic effect, but they are similar to the results of free surface in ablation effect.

Key words laser technique; laser ultrasonic; displacement field; diamond anvil cell; finite element method

OCIS codes 280.3375; 350.5340; 200.4740

1 引 言

脉冲激光超声技术以其非接触激发、宽频带以及在样品中能同时激发出多种模式等特点,在材料无损检测等领域得到了广泛应用^[1,2]。近年来,随着地球物理和武器物理等高压研究领域中对材料高压性质研究的需要,利用金刚石压砧(DAC)加载进行高压声速精密测量成为高压物理研究的一个重要

手段^[3~7],然而,限于样品尺寸和探测空间,DAC 加载下高压声速的精密测量并不容易。脉冲激光超声技术以其独有的特点为 DAC 加载下高压声速的测量提供了一条新的途径。近几年来,激光超声技术应用于 DAC 加载下声速的测量得到了迅速发展。2008 年,Decremps 等^[3]采用激光超声方法测量了 DAC 加载下 AlPdMn 单晶中的高压声速。同年,

收稿日期: 2011-03-08; **收到修改稿日期**: 2011-04-19

作者简介: 冯 文(1987—),男,硕士研究生,主要从事激光超声技术方面的研究。E-mail: fengw1811@mail.nwpu.edu.cn

导师简介: 杨德兴(1966—),男,博士,教授,主要从事光波场调控、光纤传感与激光超声技术等方面的研究。

E-mail: dxyang@nwpu.edu.cn(通信联系人)

Armstrong 等^[4]用飞秒激光作为激发源,对体积比 4:1 的甲醇和乙醇混合液体在 DAC 加载的 0~24 GPa 压力范围内的声速进行了测量, Nikolay 等^[5]在 0~23 GPa 压力范围内利用激光超声技术同时测量了铁的纵波声速和横波声速。2009 年, Decremps 等^[6]采用皮秒激光超声技术在 DAC 加载下测量了汞的超声声速。2010 年 Asahara 等^[7]利用激光超声技术测量了液体水在 0~25 GPa 压力范围内的声速。

实验上对激光超声的测量通常选择在激发源的异侧或同侧表面的某个特殊位置进行探测,可以获得该点超声波形的时变特征并可计算出超声传播速度,但难以获得对超声波的激发力源、内部波形以及传播演化特征的完整认识。另外,不同超声波模式的探测还依赖于探测点位置的选择。目前,利用有限元方法(FEM)已对单层材料、流-固界面以及覆盖了一层微米量级厚度透明薄膜的金属的激光超声进行了研究,模拟结果能有效地分析超声波的产生和传播过程^[8~13]。DAC 加载下的数值模型与透明薄膜-基底的模型具有一定的相似性,此时,金属膜两侧金刚石窗口的厚度比金属大很多,是一种“三明治”结构。本文考虑样品物性在高压下发生改变的特点,利用有限元方法建立 DAC 加载下脉冲激光激发超声波的数值分析模型,分析瞬态温度场与位移场随时间、空间的变化关系和表面不同位置处的波形特征。

2 理论模型

图 1 为脉冲激光辐照 DAC 加载样品的示意图。中间层为铝薄膜,其上、下表面加载金刚石窗口,金刚石与铝界面理想接触。当能量低于材料损伤阈值的脉冲激光透过窗口材料照射到铝上表面时,可以只考虑热弹激发超声波的机制。考虑到脉冲激光为高斯型分布,且介质满足柱对称结构,因此,理论分

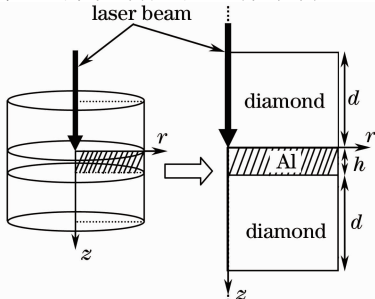


图 1 激光辐照样品示意图

Fig. 1 Schematic diagram for laser irradiating specimen

析采用柱坐标系。

材料吸收激光能量激发的瞬态温度场满足经典热传导方程^[12]

$$\rho_i c_i \frac{\partial T_i(r, z, t)}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r k_i \frac{\partial T_i(r, z, t)}{\partial r} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[k_i \frac{\partial T_i(r, z, t)}{\partial z} \right], \quad (1)$$

式中 $T(r, z, t)$ 为温度场分布, ρ, c, k 分别为材料的密度、比热容和热传导系数,下标 i 为 1 和 2 时分别代表样品材料和窗口材料的参数。

金刚石的外表面绝热,则边界条件为

$$-k_2 \frac{\partial T_2(r, z, t)}{\partial z} \Big|_{z=-d} = 0, \quad (2)$$

$$-k_2 \frac{\partial T_2(r, z, t)}{\partial z} \Big|_{z=h+d} = 0. \quad (3)$$

假定金刚石与铝膜之间为完全接触的理想界面,则界面处的温度和热流连续,即

$$T_1(r, 0, t) = T_2(r, 0, t), \quad (4)$$

$$-k_1 \frac{\partial T_1(r, z, t)}{\partial z} \Big|_{z=0} + Q = -k_2 \frac{\partial T_2(r, z, t)}{\partial z} \Big|_{z=0}, \quad (5)$$

式中 Q 为样品铝吸收激光的能量。考虑到激光在样品中的光学穿透效应,则有

$$Q = \beta(1-R)I_0 f(r)g(t) \exp(-\beta z), \quad (6)$$

式中 β 为样品的光学穿透系数, R 为材料表面的光反射系数, I_0 为入射激光的峰值光强, $f(r)$ 和 $g(t)$ 分别为高斯型脉冲激光的空间和时间分布,其表达式分别为

$$f(r) = \exp\left(-\frac{r^2}{r_0^2}\right), \quad (7)$$

$$g(t) = \exp\left[-\frac{(t-t_0)^2}{\tau^2}\right], \quad (8)$$

式中 r_0 为激光光斑半径, t_0 为峰值到达时间, τ 为激光脉冲半峰全宽。

由局部热膨胀所引起的瞬态位移场满足方程^[8]

$$(\lambda_i + 2\mu_i) \nabla \cdot (\nabla \cdot \mathbf{U}_i) - \mu_i \nabla \times \nabla \times \mathbf{U}_i - \rho_i \frac{\partial^2 \mathbf{U}_i}{\partial t^2} = \alpha_i (3\lambda_i + 2\mu_i) \nabla T_i, \quad (9)$$

式中 \mathbf{U} 表示材料内质点的位移, λ 和 μ 为拉梅常数,其与体积模量和剪切模量存在一定的关系, α 为热膨胀系数。

考虑金刚石的外表面为自由面,由于金刚石与铝之间为理想接触,因此其界面的应力和位移连续

$$\boldsymbol{\sigma}_1 = \boldsymbol{\sigma}_2, \quad \mathbf{U}_1 = \mathbf{U}_2. \quad (10)$$

初始条件为

$$U_i(r, z, t) \Big|_{t=0} = 0, \quad \frac{\partial U_i(r, z, t)}{\partial t} \Big|_{t=0} = 0. \quad (11)$$

3 数值模拟结果与讨论

3.1 激光和材料参数

脉冲激光半径为 $2.5 \mu\text{m}$ ，脉宽为 0.3 ns ，激光峰值光强为 $1.5 \times 10^9 \text{ W/cm}^2$ ，计算的时间尺度为 1 ns 时激光的峰值到达样品表面。金属铝膜样品的半径为 $150 \mu\text{m}$ ，假设每次加压后样品的厚度均为 $30 \mu\text{m}$ ，表面反射率和光学穿透深度分别为 0.92 和 7 nm ^[14]。实验中金刚石窗口厚度一般为毫米量级，为便于计算且在不影响计算精度的情况下，将窗口半径和厚度均取为 $150 \mu\text{m}$ 。由于 DAC 高压加载主要改变了材料的力学性能参数，对热学性能参数影响很小，而金刚石只是作为加载窗口，且是最坚硬的材料，因而高压下金刚石的性能参数改变对分析 DAC 加载下铝中超声波的传播规律影响很小。这里只考虑高压对样品铝的力学性能参数的影响，具体参数见表 1^[15,16]。

表 1 不同高压加载下铝的物理参数

Table 1 Thermophysical properties of aluminum under different pressures

P / GPa	ρ / ρ_0	Thermal	Bulk	Shear
		expansion / (10^{-5} K^{-1})	modulus / GPa	modulus / GPa
0.000	1.0000	2.30	75.50	26.1
2.512	1.0330	2.15	87.50	30.1
5.012	1.0629	2.00	97.50	34.1
10.00	1.1152	1.87	116.7	42.0
15.85	1.1673	1.75	137.9	51.4
20.00	1.1879	1.65	153.3	58.0
25.12	1.2389	1.60	170.8	66.0

基于图 1 的几何简化模型建立如图 2 所示的有

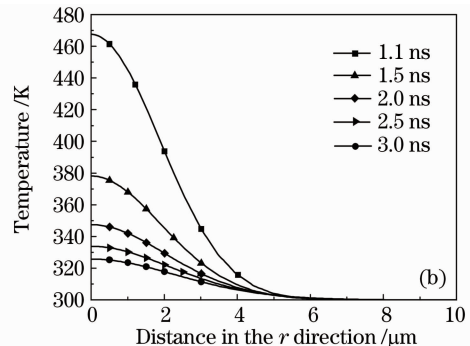
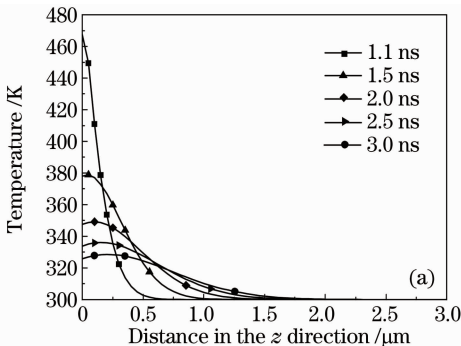


图 3 样品铝中不同时刻轴向(a)和径向(b)上的温度分布

Fig. 3 Temperature distributions in Al plate at (a) axial orientation and (b) radial orientation

限元网格模型，为了精确计算超声波的激发力源，在激光辐照附近区域选取了最小的网格，网格尺寸为 $0.2 \mu\text{m}$ ，而随着与超声力源区域距离的增大，其网格逐渐增大，最大尺寸为 $1 \mu\text{m}$ 。为了满足激光作用后弹性波传播的精度要求，一般要求网格尺寸小于弹性波波长的 $1/4$ ^[9]，对于空间分布为高斯分布，时间为 $\delta(t)$ 分布的脉冲激光在材料中激发的最小波长可表示为^[17]

$$\lambda_{\min} = \pi r_0 / \sqrt{2}. \quad (12)$$

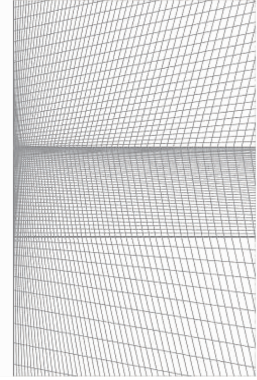


图 2 有限元网格模型图

Fig. 2 Diagram of finite element meshes

将 $r_0 = 2.5 \mu\text{m}$ 代入(12)式，得 $\lambda_{\min} = 5.55 \mu\text{m}$ 。在模拟计算中脉冲包络为高斯型，激发的最小波长大于 $5.55 \mu\text{m}$ ，因此，上述网格划分满足弹性波传播的精度要求。

3.2 模拟结果与讨论

通过对 $0 \sim 26 \text{ GPa}$ 加载压力范围内介质中温度场的计算，发现压力对温度场的影响很小而不易分辨。脉冲激光照射下样品中的温度变化情况如图 3 所示。其中图 3(a)为不同时刻在照射中心处沿样品深度方向的温度变化情况，可以看出，样品表面吸收的激光能量通过热扩散逐渐向样品的深处转移，但是在激光作用结束后，在表面 $1.5 \mu\text{m}$ 深度以

下,温度基本不会上升。图 3(b)为不同时刻在样品表面距照射中心 r 处的温度,在距离照射中心 $6\ \mu\text{m}$ 以外区域不存在温度的上升。综合考虑深度方向和表面的温度变化情况,脉冲激光的热作用区主要集中于表面附近的很小区域,近似为一个深度约为 $1.5\ \mu\text{m}$ 、半径约为 $6\ \mu\text{m}$ 的“碗形”区域。

图 4 给出了在 $2\ \text{ns}$ 时刻激光照射点附近的温度场分布。从图中可以看出,样品铝中的轴向热扩散深度约为 $1\ \mu\text{m}$,而金刚石中的轴向热扩散深度约为 $3\ \mu\text{m}$,即样品铝中的温升区域要比金刚石中的温升区域小,其原因是铝的光学穿透深度很小,同时铝的热传导系数比金刚石小很多。

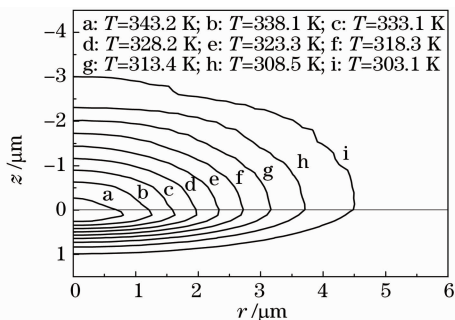


图 4 $2\ \text{ns}$ 时介质中的瞬态温度场分布

Fig. 4 Transient temperature field at $2\ \text{ns}$ in the medium

对图 3 和图 4 的分析表明温升区域分布于激光入射点附近的很小区域内,并且大部分激光能量被金刚石吸收,但是铝的热膨胀系数高出金刚石的热

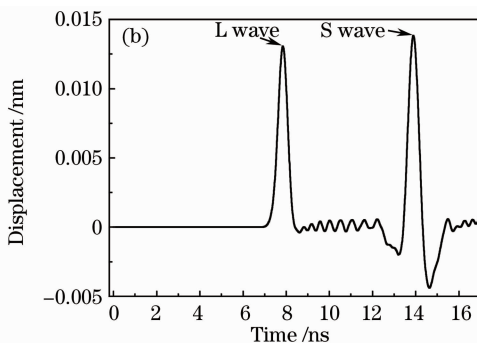
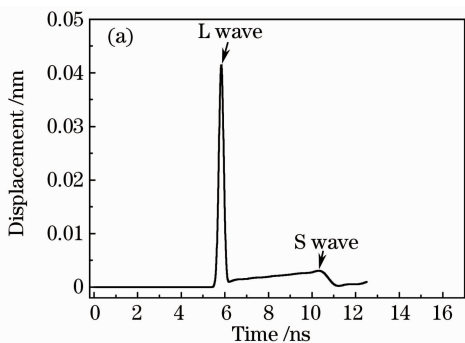


图 5 不同探测点处的声波波形。(a)激光照射点对心处;(b)异侧表面偏离激光照射点 45° 处

Fig. 5 Ultrasonic waves at different probe points. (a) At the epicenter; (b) location in rear face deflected 45° from the point of laser irradiation

图 6 为不同压力下在探测点处得到的声波波形,探测点分别为激光照射点对心处[图 6(a)]和异侧表面偏离激光照射点 45° 处[图 6(b)]。从图中可以看出,压力加载下激发的超声纵波和横波的幅度都小于无压力时所激发的,而随着加载压力的增大,幅度也不断减小,但波形并未改变,这主要是因为加载压力的增大导致热膨胀系数降低所致。由于热膨

胀系数 1 个数量级,因而铝中产生的弹性形变会远远大于金刚石中产生的弹性形变,则可认为 DAC 高压加载下激光超声热弹力源主要是由样品铝中的弹性形变引起的。

图 5 给出了覆盖金刚石压砧但未施加压力时激光入射点异侧不同位置处的波形,其中图 5(a)为铝膜的激光照射点对心处声波波形。从图中可以看出,由于高硬度金刚石窗口的存在,超声波形已完全不同热弹机制下在单层材料中激发的波形^[18],其波形与烧蚀效应中近似为 δ 函数的激光脉冲所激发的波形^[19]更相似。这种情况下,纵波波形特征十分明显,而横波则不易观察到。这是由于高硬度金刚石窗口加载下,在脉冲激光作用下铝膜无法自由向外热膨胀,其因热膨胀形成的作用力因金刚石的抵挡反作用于铝膜,与烧蚀情况相似,等效于在自由界面上增加了一个指向铝膜内部的作用力,因而相对于自由表面的热弹效应纵波波形特征非常明显,在这个位置更有利于探测纵波。图 5(b)为异侧表面偏离激光照射点 45° 处的声波波形,此时纵、横波的特征都很明显。相对于(a)图中的波形,纵波幅度有所降低,但横波有明显的增强,因此,这个位置有利于对纵波、横波的同时探测。也可以看出, 45° 处纵波波形有所展宽,这是由于声波在介质中传播发生色散引起的,因为激发力源到达异侧表面偏离激光照射点 45° 处的距离是到达对心处的 $\sqrt{2}$ 倍。

胀系数降低,温度场分布基本一致,引起温升区域的应力应变也会减小,从而声波幅度降低。还可明显看出,随着压力的增大,超声纵、横波到达同一探测点的时间变短,表明超声波在样品铝中的传播速度也发生了变化。

图 7 给出了无加载压力时样品铝中超声位移全场变化过程图。其中实线椭圆形所圈区域表示纵波

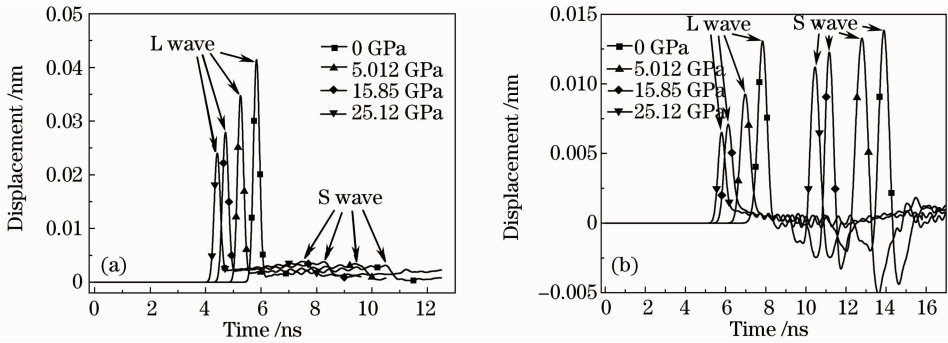


图 6 不同加载压力下的声波波形。(a)激光照射点对心处;(b)异侧表面偏离激光照射点 45° 处
Fig. 6 Ultrasonic waveforms under different pressure loads. (a) At the epicenter; (b) location in rear face deflected 45° from the point of laser irradiation

脉冲的位置,虚线椭圆形所圈区域表示横波的位置,灰度较大区域表示位移幅度较大。在 2 ns 时刻[图 7(a)]还很难分辨出超声的纵、横波;5 ns 时刻[图 7(b)]能清晰地分辨出超声纵波和横波;8 ns 时刻[图 7(c)]纵波经铝和金刚石的下界面反射向上传播,其与横波存在交叠;而 12 ns 时刻[图 7(d)],

横波经下界面反射向上传播。通过 4 幅不同时刻的位移场分布图也能看出纵波在越靠近轴线的地方其灰度较大,而横波是在偏离轴线的一个角度范围内灰度较大,这说明在 DAC 加载的情况下,超声纵、横波的空间强度分布有明显的差别。

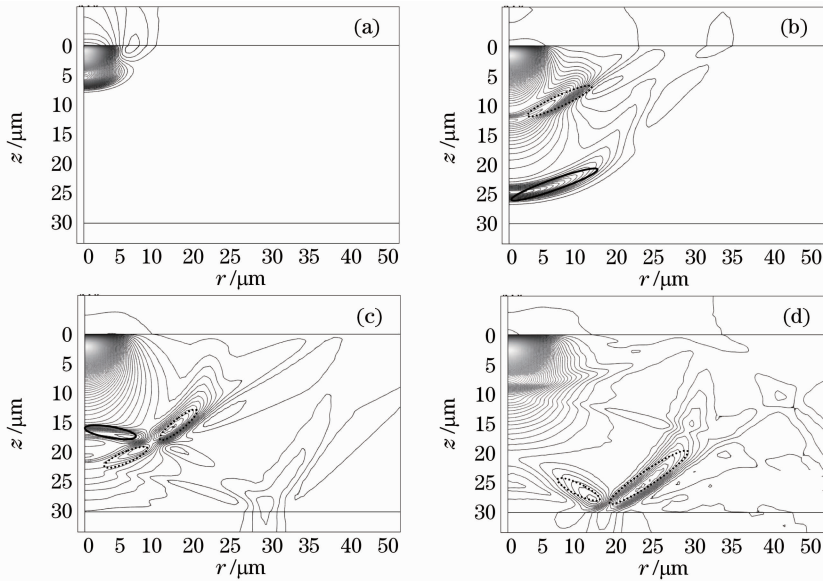


图 7 不同时刻的超声位移场。(a) 2 ns;(b) 5 ns;(c) 8 ns;(d) 12 ns
Fig. 7 Ultrasonic displacement field at different time. (a) 2 ns; (b) 5 ns; (c) 8 ns; (d) 12 ns

4 结 论

在热弹机制下利用有限元方法模拟了 DAC 加载下脉冲激光垂直照射金属铝膜激发超声以及纵波和横波的传播过程。分别对超声波的激发力源、波形以及在传播过程中的演化特征进行了详细分析。结果表明,在 DAC 加载下,热弹作用产生的超声波具有明显的指向性,其纵波能量主要集中于激光入射方向附近,而横波的能量集中于偏离激光入射点 $30^\circ \sim 55^\circ$ 的倾角之间。上述特征与自由面热弹作用

结果差异很大,与自由面烧蚀作用结果却十分相似。说明金刚石窗口对激光超声有显著的影响。对超声波指向性的模拟研究对于优化 DAC 加载下利用激光超声进行高压声速测量的实验布局,提高超声信号的探测精度具有一定的参考意义。

参 考 文 献

- Zhang Shuyi. Laser ultrasound and materials nondestructive evaluation[J]. *Applied Acoustic*, 1992, **11**(4): 1~6
- 张淑仪. 激光超声与材料无损评价[J]. *应用声学*, 1992, **11**(4):

- 1~6
- 2 Zhang Shuyi. New techniques in ultrasound nondestructive evaluation[J]. *International Academic Trends*, 1998, (8): 58~60
张淑仪. 超声无损检测高新技术[J]. 国际学术动态, 1998, (8): 58~60
- 3 F. Decremps, L. Belliard, B. Perrin *et al.*. Sound velocity and absorption measurements under high pressure using picosecond ultrasonics in a diamond anvil cell; application to the stability study of AlPdMn[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2008, **100**(3): 035502
- 4 M. Armstrong, J. Crowhurst, E. Reed *et al.*. Ultrafast high strain rate acoustic wave measurements at high static pressure in a diamond anvil cell [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2008, **92**(10): 101930
- 5 Chigarev Nikolay, Zinin Pavel, Chungming Li *et al.*. Laser generation and detection of longitudinal and shear acoustic waves in a diamond anvil cell[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2008, **93**(18): 181905
- 6 F. Decremps, L. Belliard, B. Couzinet *et al.*. Liquid mercury sound velocity measurements under high pressure and high temperature by picosecond acoustics in a diamond anvils cell[J]. *Rev. Sci. Instrum.*, 2009, **80**(7): 073902
- 7 Yuki Asahara, Motohiko Murakami, Yasuo Ohishi *et al.*. Sound velocity measurement in liquid water up to 25 GPa and 900 K; Implications for densities of water at lower mantle conditions[J]. *Earth and Planetary Science Letters*, 2010, **289**(3): 479~485
- 8 Baiqiang Xu, Zhonghua Shen, Xiaowu Ni *et al.*. Numerical simulation of laser-induced ultrasonic by finite element method [J]. *J. Appl. Phys.*, 2004, **95**(4): 2116~2123
- 9 Shen Zhonghua, Xu Baiqiang, Ni Xiaowu *et al.*. Numerical simulation of pulsed induced ultrasound in monolayer and double layer materials [J]. *Chinese J. Lasers*, 2004, **31**(10): 1275~1280
沈中华, 许伯强, 倪晓武等. 单层和双层材料中的脉冲激光超声数值模拟[J]. 中国激光, 2004, **31**(10): 1275~1280
- 10 Jijun Wang, Zhonghua Shen, Baiqiang Xu *et al.*. Numerical simulation of laser-generated Lamb wave in transversely isotropic composite material by using the finite element method[J]. *Chin. Opt. Lett.*, 2005, **3**(s1): 308~310
- 11 Wang Jijun, Shen Zhonghua, Ni Xiaowu *et al.*. Analysis on precursor in laser ultrasonic in metal and non-metallic materials [J]. *Chinese J. Lasers*, 2006, **33**(8): 1127~1132
王纪俊, 沈中华, 倪晓武等. 金属和非金属材料中激光超声前驱小波分析[J]. 中国激光, 2006, **33**(8): 1127~1132
- 12 Jijun Wang, Zhonghua Shen, Xiaowu Ni *et al.*. Numerical simulation of laser-generated surface acoustic waves in the transparent coating on a substrate by the finite element method [J]. *Optical and Laser Technology*, 2007, **39**(1): 21~28
- 13 Xu Chengguang, Xu Baiqiang, Xu Guidong *et al.*. Numerical simulation of the laser-generated ultrasound at the fluid-solid interface by finite element method[J]. *Chinese J. Lasers*, 2010, **37**(7): 1885~1891
徐晨光, 许伯强, 徐桂东等. 激光热弹激励流-固界面波的有限元模拟[J]. 中国激光, 2010, **37**(7): 1885~1891
- 14 Sun Chengwei, Lu Qisheng, Fan Zhengxiu *et al.*. Effects of Laser Irradiation[M]. Beijing: National Defense Industry Press, 2002. 10~32
孙承伟, 陆启生, 范正修等. 激光辐照效应[M]. 北京: 国防工业出版社, 2002. 10~32
- 15 Shikai Xiang, Lingcang Cai, Fuqian Jing. Thermal properties of Al at high pressure and temperatures[J]. *Phys. Rev. B*, 2004, **70**(17): 174102
- 16 Yi Wang, Dongquan Chen, Xinwei Zhang. Calculated equation of state of Al, Cu, Ta, Mo, and W to 1000 GPa[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2000, **84**(15): 3220~3223
- 17 Y. Sohn, S. Krishnaswamy. Mass spring lattice modeling of the scanning laser source technique[J]. *Ultrasonics*, 2002, **39**(8): 543~551
- 18 C. B. Scruby, R. J. Dewhurst, D. A. Hutchins *et al.*. Quantitative studies of thermally generated elastic waves in laser-irradiated metals [J]. *J. Appl. Phys.*, 1980, **51**(2): 6210~6216
- 19 G. S. Taylor, D. A. Hutchins, C. Edwards *et al.*. TEA-CO₂ laser generation of ultrasonic in non metals [J]. *Ultrasonics*, 1990, **28**(6): 343~349