

金刚石/ZnSe 结构中瞬态热栅场的有限元法分析

王敬时 程 营 黄巧建 徐晓东 刘晓峻

(南京大学声学研究所 近代声学国家重点实验室, 江苏 南京 210093)

摘要 利用有限元法分析计算了脉冲激光激发瞬态热栅在金刚石薄膜/ZnSe 衬底双层结构中的三维温度场分布及变化。通过比较不同厚度金刚石薄膜样品的温度场分布, 结果显示金刚石薄膜的厚度对样品中温度场的分布有较大影响, 随着薄膜厚度的增大, 峰值温度提高并且二次加热现象更加明显。

关键词 薄膜; 激光超声; 瞬态热栅; 有限元方法; 二次加热

中图分类号 TN249; O426 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS200828s1.0138

Finite Element Analysis of Laser-Induced Transient Surface Grating Fields of Diamond/ZnSe

Wang Jingshi Cheng Ying Huang Qiaojian Xu Xiaodong Liu Xiaojun

(State Key Laboratory of Modern Acoustics, Institute of Acoustics, Nanjing University,
Nanjing, Jiangsu 210093, China)

Abstract The finite element method is introduced to study the three-dimensional temperature fields for bilayer structure of diamond/ZnSe substrate films irradiated by laser-induced transient surface grating. The temperature fields are compared for different thickness of diamond film. It is shown that the thickness of the diamond films has great influence on the temperature distribution of the films. With the thickness increase of the diamond film, the peak of temperature field in the sample increases and the twice heating becomes more obvious.

Key words thin films; laser ultrasonic; transient thermal grating; finite element method; twice heating

1 引 言

金刚石膜材料具有优良的物理和机械性能, 在高新技术领域具有十分广阔的应用前景, 被视为最有潜力的新材料^[1]。对于金刚石/衬底结构, 由于金刚石薄膜的热扩散率非常大而且薄膜厚度很小, 使得金刚石薄膜的热扩散率很难准确测量。因此, 开展脉冲激光激发瞬态热栅在金刚石薄膜/衬底结构中的光热效应的理论研究十分必要, 它对于用瞬态热栅法测量金刚石薄膜的实验具有指导作用。瞬态热栅法(TTG)是由 H. Eichler 等^[2]和 D. W. Pohl 等^[3]分别独立提出的, 具有光照时间短、非接触测量以及样品尺寸小等优点, 现已成功地应用于材料热扩散率^[4,5]的测量。C. D. Marshall 等^[6]利用瞬态热栅法研究了在不同

温度下 MgO 基底上 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ 薄膜的各向异性热扩散率^[7]。但是, 目前该方法在测量薄膜材料热传导率方面还有待发展。

有限元方法(FEM)能够模拟各种复杂几何模型, 得到多个物理场的全场数值解, 并可以考虑到实际工作中各种具体环境的影响, 是一种非常有效的分析手段^[8~10]。本文引入有限元方法, 计算分析了三维直角坐标系下脉冲激光激发瞬态热栅在金刚石薄膜/ZnSe 衬底双层结构中的温度场全场分布及变化。

2 理论模型

2.1 瞬态热栅的形成

如图 1 所示, 当两束相干脉冲光以一定的角度

基金项目: 国家自然科学基金(10674069, 10374041, 10574071)资助课题。

作者简介: 王敬时(1985—), 女, 硕士研究生, 主要从事激光超声方面的研究。E-mail: jswsatan@yahoo.com.cn

导师简介: 刘晓峻(1964—), 男, 博士, 教授, 主要从事功能材料的光、声无损评价等方面的研究。

E-mail: liuxiaojun@nju.edu.cn(通信联系人)

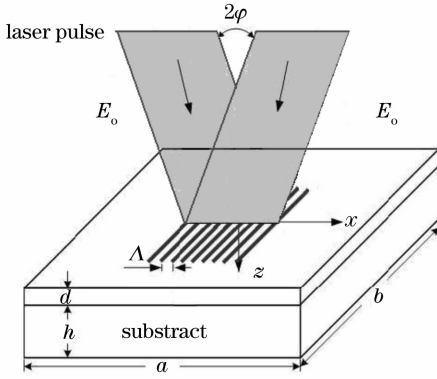


图 1 脉冲激光在金刚石薄膜/ZnSe 衬底材料上
激发瞬态热栅示意图

Fig.1 Configuration of laser-induced transient thermal
grating in the diamond/ZnSe sample

照射到样品的表面时,产生明暗相间的干涉条纹,样

品在吸收脉冲激光能量后形成相应的温度场分布和热膨胀条纹,从而形成热栅。其中, a, b 为样品的长和宽。金刚石薄膜和衬底的厚度分别为 d 和 h 。

样品中的光强分布可表示为

$$I = 2I_0(1 - R)\exp(-\beta z)[1 + \cos(2\pi x/\Lambda)], \quad (1)$$

式中 I_0 为脉冲激光强度。

对于 Q 开关,脉冲上升时间为 t_0 的激光器,脉冲激光的时域分布函数为

$$g(t) = \frac{t}{t_0} \exp\left(-\frac{t}{t_0}\right). \quad (2)$$

如果辐射激光是半径为 r_0 且呈高斯分布的脉冲光,对于 m 层介质,样品所吸收的激光能量转化为热能的表达式为:

$$Q(x, y, z, t) = \frac{Q_0}{\pi r_0^2} (1 - R) [1 + \cos(2\pi x/\Lambda)] \prod_{i=1}^m \beta_i \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{r_0^2}\right) \times \exp\left\{-\left[\sum_{i=1}^{m-1} (\beta_i - \beta_m) d_i + \beta_m z\right]\right\} g(t), \quad (3)$$

式中 d_i 为 i 层的厚度, Q_0 为样品吸收单脉冲的能量, R 为反射率, β 为光吸收系数, Λ 为热栅的栅距。

样品中的瞬态温度场分布 $T_i(x, y, z, t)$ 满足热扩散方程

$$\nabla^2 T_i(x, y, z, t) - \frac{1}{\alpha_i} \frac{\partial T_i(x, y, z, t)}{\partial t} = -\frac{Q(x, y, z, t)}{k_i}, \quad (4)$$

式中 $T_i(x, y, z, t)$ 为 t 时刻的温度场分布, k 为热传导率。

金刚石薄膜吸收脉冲激光的能量形成体热源, ZnSe 衬底对激发光可以认为是透明的。样品的初始温度为 300 K, 边界是绝热的, 表示为

$$T(x, y, z, t) \Big|_{t=0} = 300, \quad (5)$$

$$\frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial x} \Big|_{x=\pm a/2} = \frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial y} \Big|_{y=\pm b/2} = 0, \quad (6)$$

$$\frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial z} \Big|_{z=0} = \frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial z} \Big|_{z=d+h} = 0, \quad (7)$$

认为金刚石薄膜与 ZnSe 衬底之间热接触良好, 可得

$$T_f(x, y, z, t) \Big|_{z=d} = T_s(x, y, z, t) \Big|_{z=d}, \quad (8)$$

$$-k_f \frac{\partial T_f(x, y, z, t)}{\partial z} \Big|_{z=d} = -k_s \frac{\partial T_s(x, y, z, t)}{\partial z} \Big|_{z=d}. \quad (9)$$

2.2 有限元模型的构建

本文采用有限元数值计算方法^[11]对(4)式进行求解。建立上述模型的瞬态热传导有限元方程为

$$[C]\{\dot{\Phi}\} + [K]\{\Phi\} = \{H\}, \quad (10)$$

式中 $[C]$ 、 $[K]$ 和 $\{H\}$ 分别是热容矩阵、热传导矩阵和载荷矩阵。它们的元素由单元相应的矩阵元素集成, 分别表示为

$$C_{ij} = \sum_e \int_{V_e} \rho c N_i N_j dV, \quad H_i = \sum_e \int_{V_e} q N_i dV, \quad (11)$$

$$K_{ij} = \sum_e \int_{V_e} \left[k_x \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + k_y \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} + k_z \frac{\partial N_i}{\partial z} \frac{\partial N_j}{\partial z} \right] dV,$$

式中 N_i 为插值函数, $N_i(x_j, y_j, z_j) = \begin{cases} 0, & (j \neq i) \\ 1, & (j = i) \end{cases}$ 。

本文采用中心差分法求解方程(10), t 时刻的节点温度变化率 $\dot{\Phi}$ 可以表示为

$$\dot{\Phi}_i = \frac{1}{2\Delta t}(\Phi_{t+\Delta t} - \Phi_{t-\Delta t}), \quad (12)$$

将(12)式代入(10)式, 整理可得

$$\Phi_{t+\Delta t} = \Phi_{t-\Delta t} + 2[C]^{-1}(\{H\}_t - [K]\Phi_t)\Delta t. \quad (13)$$

通过联立初始条件、边界条件和逐步迭代求解(13)式, 即可获得该问题的解。

3 数值计算和结果分析

基于上述理论, 本文计算了金刚石薄膜沉积在 ZnSe 衬底上的温度场分布。其中, 金刚石薄膜的厚度从 $5 \mu\text{m}$ 变化到 $50 \mu\text{m}$, 衬底的厚度固定为 0.2 mm , 样品的长和宽均为 1.7 mm 。脉冲激光的上升时间 t_0 和聚焦半径 r_0 分别取 3 ns 和 0.1 mm , 脉冲激光波长为 $10.6 \mu\text{m}$, 光吸收能量 Q_0 为 20 J , 热栅的栅距为 $10 \mu\text{m}$ 。金刚石的比热、密度、热传导率、光吸收系数分别为 $509 \text{ J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$ 、 $3500 \text{ kg}/\text{m}^3$ 、 $2300 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$ 、 5 m^{-1} , ZnSe 的比热、密度、热传导率、光吸收系数分别为 $335 \text{ J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$ 、 $5360 \text{ kg}/\text{m}^3$ 、 $19 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$ 、 0 。

图 2 所示为金刚石薄膜($10 \mu\text{m}$)表面沿 x 方向距脉冲激光中心不同距离的温度-时间变化曲线图。

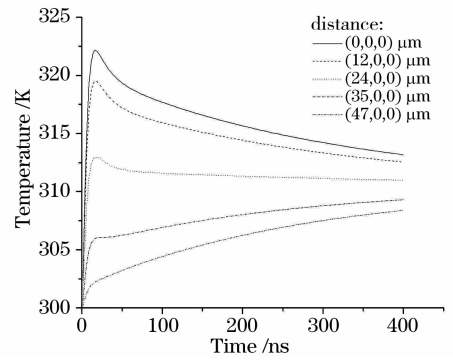
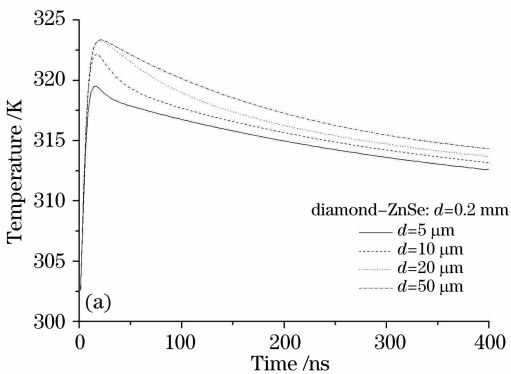


图 2 金刚石薄膜($10 \mu\text{m}$)表面沿 x 方向距脉冲激光中心不同距离的温度-时间变化曲线

Fig. 2 Temperature-time relation for different distances to irradiation centre on the diamond film ($10 \mu\text{m}$) along x direction. Diamond-ZnSe: $10 \mu\text{m} \sim 0.2 \text{ mm}$

由于脉冲激光在空间上是高斯分布的, 随着 x 值的增大, 金刚石薄膜表面峰值温度随之降低。在热栅栅距的一半内, 当照射中心位置大于 $24 \mu\text{m}$ 时, 可以观察到二次加热现象, 这是由于第一次加热时金刚石表面温度迅速上升, 而脉冲激光在空间上的高斯分布导致受热不均, 热量在第一次加热后由热栅的高温带向低温带扩散。随着 x 值的继续增大, 这一现象将不断重复。

图 3 分别为在脉冲激光辐射中心($0, 0, 0$)和沿 x 向距辐射中心 $35 \mu\text{m}$ ($35 \mu\text{m}, 0, 0$)处, 相同厚度的 ZnSe 衬底上不同厚度的金刚石薄膜($5 \mu\text{m} \leq d \leq 50 \mu\text{m}$)的温度分布。

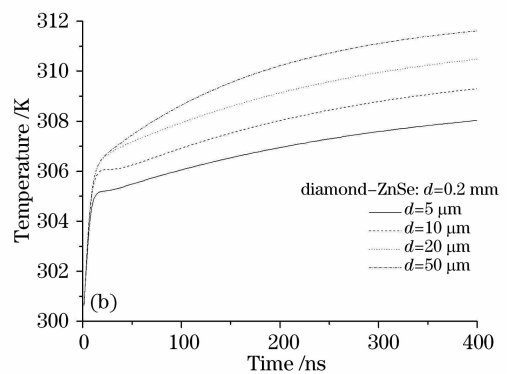


图 3 金刚石薄膜厚度对温度场分布的影响。(a) 脉冲辐射中心处, (b) 沿 x 向距辐射中心 $35 \mu\text{m}$ 处

Fig. 3 Temperature-field distribution for different diamond film thickness at (a) irradiation centre, (b) $35 \mu\text{m}$ to the centre along x direction

由图 3(a)可以看出, 在辐射中心处金刚石薄膜厚度对脉冲激光作用下薄膜/衬底结构温度场变化的总体趋势影响不大, 各厚度下温度场变化都表现为在脉冲激光加热过程中金刚石薄膜温度迅速上升, 之后随时间下降。同时随着金刚石薄膜厚度的

增大, 由于金刚石膜的穿透深度($1/\beta$)较大, 金刚石薄膜在脉冲激光加热时吸收更多的热量, 使得峰值温度随薄膜厚度增大而提高。图 3(b)显示, 在距辐射中心一定距离($35 \mu\text{m}$)处, 随着金刚石薄膜厚度的增大二次加热现象愈发明显。这是由于金刚石膜

的穿透深度($1/\beta$)较大,随着金刚石薄膜厚度的增大,在脉冲激光加热时热量将更多地被金刚石薄膜吸收,使得二次加热现象更加明显。

4 结 论

本文是基于三维直角坐标系下环形高斯脉冲激光激发瞬态热栅的多层膜模型,构建薄膜/衬底双层结构的有限元模型,计算分析了脉冲激光作用在金刚石薄膜/ZnSe 衬底结构样品中的瞬态温度场分布,发现金刚石薄膜中存在二次加热现象。通过比较分析了金刚石薄膜的厚度对样品温度场分布的影响,发现随着金刚石薄膜厚度的增大,样品中温度场的峰值温度提高、二次加热现象更加明显。

参 考 文 献

- 1 Sun PeiMing. Development of detective technology[J]. *Modern Physics*, 2002, (4): 29~31
孙培明. 检测技术的新发展[J]. 现代物理知识, 2002, (4): 29~31
- 2 H. Eichler, G. Salje, H. Stahl. Thermal diffusion measurements using spatially periodic temperature distributions induced by laser light[J]. *J. Appl. Phys.*, 1973, **44**: 5383
- 3 D. W. Pohl, S. E. Schwarz, V. Imniger. Forced Rayleigh scattering[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1973, **31**: 32
- 4 P. K. Kuo, M. Munidasa. Single-beam interferometry of a thermal bump[J]. *Appl. Opt.*, 1990, **29**: 5326
- 5 A. Harata, H. Nishimura, T. Tanaka *et al.*. Laser stimulated scattering microscope: A tool for investigating modified metallic surfaces[J]. *Rev. Sci. Instrum.*, 1993, **64**(3): 618
- 6 C. D. Marshall, I. M. Fishman, R. C. Dorfman *et al.*. Thermal diffusion, interfacial thermal barrier, and ultrasonic propagation in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ thin films: Sureface-selective transient-grating experiments[J]. *Phys. Rev. B*, 1992, **45**(17): 10009~10021
- 7 Luo Aihua, Zhao Chaoxian, Zhang Shuyi *et al.*. Measurement of the thermal diffusivity of solids by transient thermal gratings method[J]. *Chin. J. Lasers*, 2004, **31**(12): 1478~1482
罗爱华, 赵超先, 张淑仪 等. 利用瞬态热栅法测定固体材料的热扩散率[J]. 中国激光, 2004, **31**(12): 1478~1482
- 8 Xu Boqiang, Ni Xiaowu, Shen Zhonghua *et al.*. Numerical simulation of laser-generated ultrasonic by finite element method in the plate material[J]. *Chin. J. Lasers*, 2004, **31**(5): 621~625
许伯强, 倪晓武, 沈中华 等. 激光激发板状材料中超声导波的有限元数值模拟[J]. 中国激光, 2004, **31**(5): 621~625
- 9 Shen Zhonghua, Xu Boqiang, Ni Xiaowu *et al.*. Numerical simulation of pulsed laser induced ultrasound in monolayer and double layer materials [J]. *Chin. 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 Li Ye, Zhang Yongkang, Guo Huafeng. Analysis of creep property of film using laser thermal stress evaluation[J]. *Chin. J. Lasers*, 2007, **44**(suppl.): 91~97
李 粤, 张永康, 郭华锋. 用激光热应力法评估薄膜蠕变性能[J]. 中国激光, 2007, **44**(增刊): 91~97
- 11 D. P. Almond, P. M. Patel. *Photothermal Science and Technique* [M]. London: Chapman & Hall, 1996