

基于电驱动纳米光栅的结构设计及仿真分析

张周强*, 周玲, 郭忠超, 黄乾玮, 李晓飞

西安工程大学机电工程学院, 陕西 西安 710600

摘要 针对传统机械光栅周期不可调、检测精度低、无法实现光谱的连续扫描等问题,提出了一种基于石墨烯(GNP)和聚二甲基硅氧烷(PDMS)构成的复合材料的低压直流电驱动可调谐纳米光栅,并对光栅整体结构进行了设计。利用 COMSOL Multiphysics 软件研究了光栅结构尺寸和驱动电压对光栅周期和膜层温度的影响规律。分析结果表明,在低电压驱动下膜层最大温度变化约为 160 °C,光栅周期在 5 s 内的最大调谐量为 160 nm。此外,在不同的驱动电压下,光栅周期和膜层温度的变化规律是相似的,这满足了工业气体的不同检测需求。

关键词 光栅; 纳米光栅; 石墨烯; 电热驱动; 光栅周期

中图分类号 TB332

文献标志码 A

doi: 10.3788/AOS202141.2105001

Structure Design and Simulation Analysis Based on Electrically Driven Nanograting

Zhang Zhouqiang*, Zhou Ling, Guo Zhongchao, Huang Qianwei, Li Xiaofei

School of Mechanical and Electrical Engineering, Xi'an Polytechnic University, Xi'an, Shaanxi 710600, China

Abstract Aiming at the problems of traditional mechanical gratings, such as unadjustable period, low detection accuracy and inability to realize continuous spectral scanning, a low-voltage direct current driven tunable nanograting based on composite material made of graphene (GNP) and polydimethylsiloxane (PDMS) is proposed, and the overall structure of grating is designed. The effects of grating structure size and driving voltage on grating period and film temperature are studied by using COMSOL Multiphysics software. The analysis results show that the maximum temperature change of film is about 160 °C and the maximum tuning amount of grating period is 160 nm within 5 s under low-voltage driving. Moreover, the changing laws of grating period and film temperature are similar under different driving voltages, which meets the different detection requirements for industrial gases.

Key words gratings; nanograting; graphene; electrothermal drive; grating period

OCIS codes 050.2770; 050.1970; 050.1220

1 引言

光栅作为重要的分光元件,被广泛应用于光学检测领域。由于传统意义上的光栅的周期是确定的、检测波段是固定的,故无法实现波长的连续扫描。近年来,可调柔性光栅引起了研究人员的广泛关注。利用形状记忆聚合物(SMP)的特点,可调柔性光栅可通过光激励、电热激励等外部激励方式来

驱动光栅形状变化进而实现光栅周期的改变。

随着柔性材料的发展以及其驱动形式的多元化,各种类型的外部激励驱动方式被成功应用于光栅元件的驱动,包括光驱动、电热驱动、液压驱动等。将 SMP 材料与其他材料复合能够获得性能良好的形状记忆聚合物复合(SMPC)材料。Koerner 等^[1-2]利用电驱动的方式实现了 SMPC 材料的变形,即在热塑性聚氨酯(TPU)中加入碳纳米管

收稿日期: 2021-04-12; **修回日期:** 2021-05-10; **录用日期:** 2021-05-24

基金项目: 国家自然科学基金青年项目(61701384)、陕西省教育厅重点科学研究计划项目(20JS051)、西安工程大学柯桥纺织产业创新研究院项目(19KQYB03)

通信作者: *zhangzhouqiang208@126.com

(CNT),提高了 SMPC 的力学性能和形状记忆性能。Yang 等^[3]提出了利用外部热源驱动的可调柔性光栅。所用驱动器的波长调谐范围为 30~38 nm,但在高温情况下其存在响应时间久、功耗大等问题,故其应用受限。Zhang 等^[4-5]提出了光驱动可调透射光栅,在 3 s 驱动时间内能达到光栅周期变化量为 2.7% 的连续周期调谐,调谐能力较低,光栅周期的最大调谐量约为 132 nm。由于聚合物具有结构复杂和不易分散性的特点,故其光驱动效率不稳定,且对驱动环境依赖性较高。Aschwanen 等^[6]将柔性的电活性聚合物(EAP)作为驱动器来控制柔性光栅的周期变化。电驱动无需外加热源,直接通过材料内部导电生热产生变形即可完成形状恢复^[7-10]。

本文利用具有良好导电性和较高杨氏模量的石墨烯(GNP)材料,设计了一种基于低压直流驱动的纳米可调光栅,该光栅由 GNP 和聚二甲基硅氧烷(PDMS)组成的复合材料构成。通过薄膜两端增加电激励的方式,实现了光栅周期的连续调谐。利用 COMSOL Multiphysics 软件研究了光栅结构尺寸和驱动电压对光栅周期和膜层温度的影响规律,并对仿真结果进行了分析。

2 纳米光栅的制备与特征

薄膜结构上分散的一系列透光狭缝构成了平面透射光栅,色散是光栅最显著的特征之一。光栅的色散现象是指光栅能将包含多种波长的复合光在空间中实现分散的现象^[4]。可调纳米光栅在满足传统机械光栅分光能力的基础上实现了光栅周期的可调。利用 GNP 良好的导电性和 PDMS 的弹性,在刻有光栅结构的光刻板上制备纳米光栅。

在纳米光栅薄膜的制备过程中,将经过光刻的硅板作为基底,基底表面的中间区域为 10 mm × 10 mm 的方形光栅区域,光栅区域中分布的是 1 μm 厚的光刻胶涂层。涂层之间整齐排布着光栅刻线,将两条刻线之间的距离定义为光栅周期(d),此时 $d = 5 \mu\text{m}$ 。柔性纳米光栅由驱动部分和分光部分组成^[11-12],光栅制备工艺流程如图 1 所示,光栅两端为驱动部分,中间为透射分光部分。在光刻硅板基底上采用涂覆工艺在其表面沉积薄膜。驱动部分由 GNP/PDMS 复合材料构成,通过将质量分数为 2% 的石墨烯纳米片分散到 PDMS 中可制得 GNP/PDMS 复合材料。在光栅分光区域之外涂抹 1 mm 厚的 GNP/PDMS 复合材料,在分光区域涂

抹 PDMS,涂抹好的硅板经过 5 h 烘干固化后,剪去不需要的薄膜部分,即可制得薄厚均匀的柔性纳米光栅薄膜。

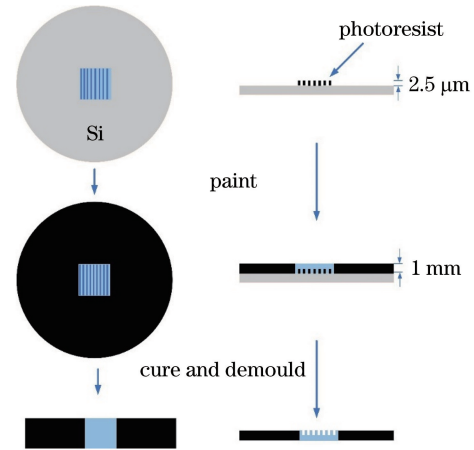


图 1 纳米光栅制备过程

Fig. 1 Preparation process of nanograting

图 2(a)为制备所得的光栅实物图。对制备所得的薄膜进行了多次拉伸实验,并对实验数据进行了线性拟合,实验中薄膜的宽度为 15 mm、初始长度为 30 mm。该纳米光栅薄膜满足广义胡克定律:

$$F = K \cdot \varepsilon, \quad (1)$$

式中: F 表示薄膜所受拉力; K 表示薄膜刚度系数, $K = 19.6 \text{ N/m}$; ε 表示薄膜应变。薄膜刚度拟合图如图 2(b)所示。图 2(c)为光学显微镜下 PDMS 的表面结构图,其中光栅结构周期 $a = b = 2.5 \mu\text{m}$,光栅周期 $d = a + b = 5 \mu\text{m}$ 。图 2(d)为 GNP/PDMS 表面结构,由于薄膜在制备过程中受环境因素和人为因素的影响,故薄膜表面存在气泡和杂质。

3 模型仿真分析

3.1 模型建立

利用仿真软件 COMSOL Multiphysics 中的固体力学模块、传热模块以及 AC/DC(交流/直流)电流电压接口模块对柔性纳米光栅进行耦合分析。定义薄膜中间区域为分光区域,两端为电压驱动部分,定义相邻两条光栅线之间的距离为光栅周期 d ,薄膜的厚度为 H ,直流驱动电压范围为 3~9 V,驱动位置为 GNP/PDMS 薄膜两端。在 x - y 平面中选择一个中心矩形,矩形中心与分光部分重合,在 z 轴方向构建出一定厚度的薄膜以及光栅周期结构。假设 GNP 线弹性能力的瞬态假设方程为

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \nabla \cdot \mathbf{S} + Fv, \quad (2)$$

式中: ρ 为密度; v 为泊松比; \mathbf{S} 为黏性应力; t 为时

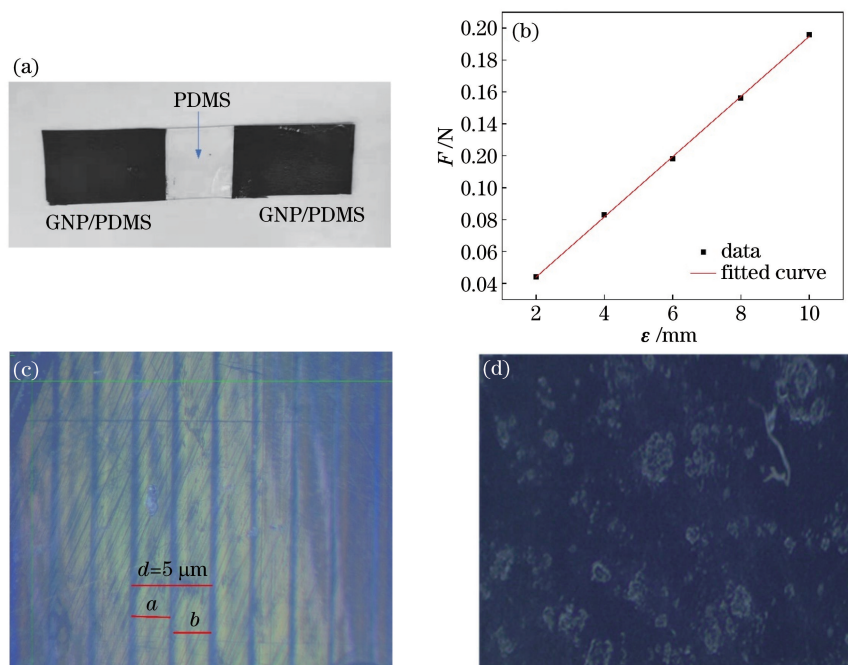


图 2 纳米光栅表面形貌。(a)纳米光栅实物图;(b)薄膜刚度拟合曲线;(c) PDMS 表面结构;(d) GNP/PDMS 表面结构
Fig. 2 Surface morphology of nanograting. (a) Physical drawing of nanograting; (b) fitted curve of film stiffness; (c) surface structure of PDMS; (d) surface structure of GNP/PDMS

间; u 为位移; F 为拉力大小。应变与位移的关系为

$$\epsilon = \frac{1}{2}[(\nabla u)^T + (\nabla u)]. \quad (3)$$

将薄膜两端设置为固定约束端,当 GNP/PDMS 薄膜预应变小于 GNP/PDMS 薄膜长度的 10%时,随着膜层温度升高,薄膜膨胀。当薄膜的预应变大于 GNP/PDMS 薄膜长度的 10%且小于 40%时,随着膜层温度升高,薄膜收缩,进而引起光栅分光部分发生形变。在固体传热模块中,设置温度场与结构的热膨胀相耦合,GNP 良好的电热性能使得复合薄膜的温度升高,产生的热应力引起薄膜变形。COMSOL Multiphysics 能很好地模拟光栅在电驱动过程中所产生的薄膜热传导、热对流以及热辐射现象,光栅的瞬态传热方程为

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(e + \frac{1}{2} v^2 \right) \right] + \nabla \cdot \left[\rho v \left(e + \frac{1}{2} v^2 \right) \right] =$$

$$-\nabla \cdot \mathbf{q} + \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{v}) + \rho \nu \cdot \mathbf{F}_1, \quad (4)$$

式中: e 表示单位质量内能; \mathbf{v} 表示速度; v 表示速度大小; \mathbf{q} 表示热通量; $\boldsymbol{\sigma}$ 表示总应力大小; \mathbf{F}_1 表示单位质量的体积力大小。

在形变过程中,薄膜的弹性阻尼会发生微小变化,而薄膜的形变具有温度依赖性,故为了使仿真结果接近实验值,在传热接口处添加了热膨胀和温度耦合模块。其中,热膨胀模块的作用是修正整个薄膜的热应变张量,温度耦合模块的作用是将传热接口和固体力学接口计算出的温度变量耦合在一起。对薄膜模型进行了简化,控制薄膜分光部分的光栅尺寸不变,选取薄膜中一个部分进行仿真分析,仿真模型结构如图 3 所示,其中薄膜厚度 H 为 1 mm,光栅周期 d 为 5 μm ,薄膜宽度 B 为 6 mm,GNP/PDMS 薄膜长度 $L_1=L_2=30$ mm,PDMS 薄膜长度 $L=7.5$ mm。材料属性如表 1 所示。

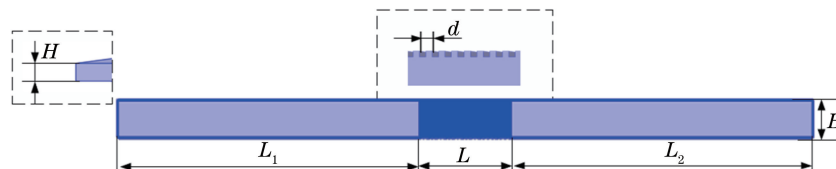


图 3 薄膜仿真模型

Fig. 3 Simulation model of thin film

表 1 薄膜中的材料属性

Table 1 Material properties in thin film

Material	Expansivity / (10^{-4} K^{-1})	Heat capacity		Density / ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$)	Electrical conductivity / ($\text{S} \cdot \text{m}^{-1}$)	Young's modulus /kPa	Poisson's ratio
		at constant pressure / ($\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$)	Relative permittivity				
PDMS	9.00	1460	2.75	970	0.75	750	0.49
GNP	7.86	730	0.50	960	0.50	284	0.48

3.2 光栅结构参数对周期调谐范围的影响

控制两端驱动薄膜预应变为 GNP/PDMS 薄膜长度的 40%，对其施加电驱动后的薄膜应力分布如图 4 所示。可以发现，应力最大位置处于柔性薄膜

驱动部分的上表面和下表面，最大拉伸应力为 $2.6 \times 10^5 \text{ N}$ 。GNP 在预应变大于 GNP/PDMS 薄膜长度的 10% 时，薄膜会受热收缩，从而导致光栅周期变大。释放驱动后，光栅周期恢复。

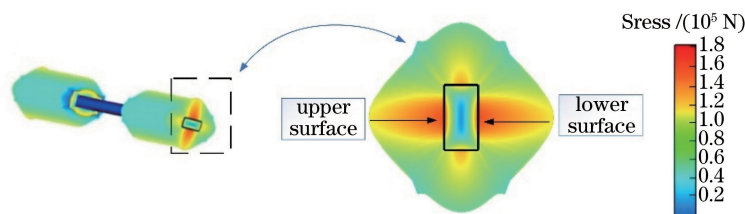


图 4 低压电驱动状态下柔性光栅的应力分布

Fig. 4 Stress distribution of flexible grating driven by low voltage

在图 4 模拟结果的基础上，保持驱动电压为 6 V，设置环境温度为 20 °C、最大模拟时间为 5 s，改

变纳米光栅薄膜的结构尺寸。从图 5(a)中可以看出，纳米光栅的薄膜温度与光驱动时间呈正相关，随

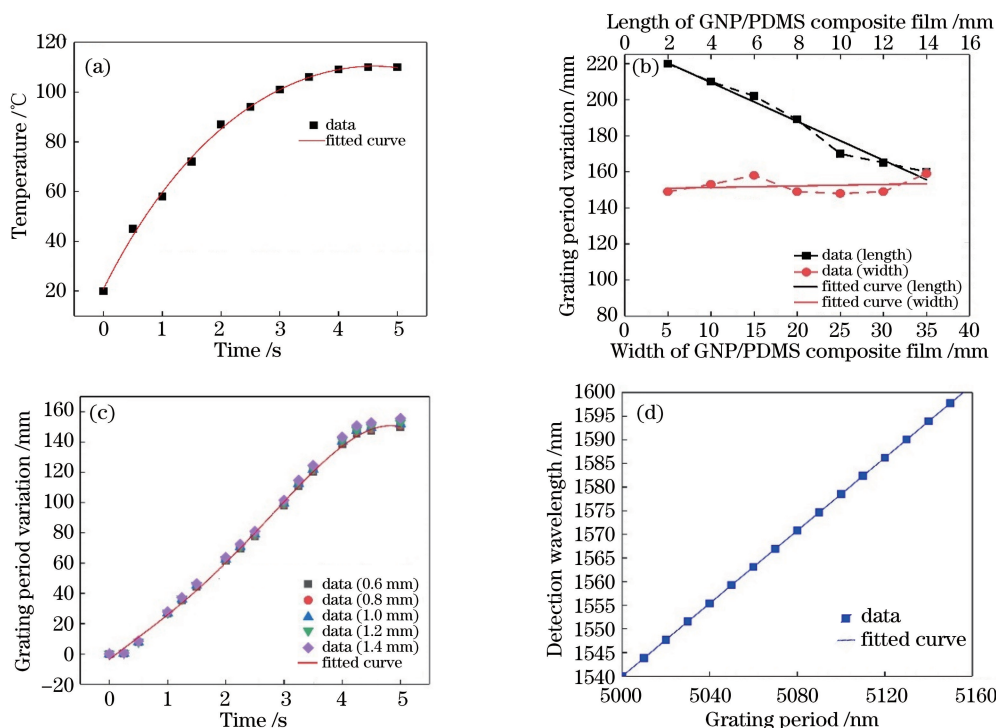


图 5 仿真结果。(a)膜层温度与仿真时间的关系；(b)薄膜宽度与长度对光栅周期的影响；(c)薄膜厚度对光栅周期的影响；(d)光栅周期与检测波长的关系

Fig. 5 Simulation results. (a) Relationship between film temperature and simulation time; (b) influence of width and length of thin film on grating period; (c) influence of thickness of thin film on grating period; (d) relationship between grating period and detection wavelength

着模拟时间的增加,薄膜温度升高。图 5(b)、(c)分别展示了光栅驱动薄膜长度和宽度以及厚度对光栅周期的影响。从图 5(b)中可以看出,光栅周期的变化量与驱动薄膜长度有直接关系,与薄膜宽度无关。驱动薄膜的长度越小,薄膜表面的温升速率越快,光栅周期变化量越大,长度与光栅周期变化量呈负相关。从图 5(c)中可以看出,光栅周期与薄膜厚度无关。当光栅驱动薄膜长度为 30 mm 时,光栅周期最大变化量可达到 160 nm。

由光栅方程可知光栅周期与检测波长的关系,光栅方程为

$$A \sin \theta = k\lambda, k = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \quad (5)$$

式中: A 为光栅常数; θ 为衍射角,即光的入射方向与光栅法线之间的夹角; k 为衍射级数; λ 为入射光的波长。以光栅一级衍射角为 18° 为例,光栅周期对应的检测波段为 1540~1600 nm,如图 5(d)所示。

3.3 驱动电压对膜层温度的影响及温升过程分析

对于电驱动纳米光栅薄膜,薄膜膜层温度主要取决于电热功率以及空间温度。电热功率越大,膜层表面温度越高。空间温度由 COMSOL Multiphysics 设定的传热方式以及薄膜表面温度决

定,将薄膜表面的“分光区域中点,即 PDMS 膜层的中点”“薄膜连接点”以及“驱动薄膜(GNP/PDMS)中点”的平均温度作为膜层温度探测点。图 6(a)为电驱动下纳米光栅在上述三个位置处的膜层温度随仿真时间的变化关系。可以看出,驱动部分膜层温度最高,分光部分膜层温度最低。

图 6(b)为光栅薄膜在驱动电压分别为 3、6、9 V 时,三个位置处膜层温度随仿真时间的变化情况,其中 L_1 、 L_2 、 L_3 分别为驱动电压为 9 V 时,驱动薄膜中点处、薄膜连接点处、分光区域中点处的温度; L_4 、 L_5 、 L_6 分别为驱动电压为 6 V 时,驱动薄膜中点处、薄膜连接点处、分光区域中点处的温度; L_7 、 L_8 、 L_9 分别为驱动电压为 3 V 时,驱动薄膜中点处、薄膜连接点处、分光区域中点处的温度。可以看出,三个电压下膜层温度均随着驱动时间的增大而增大,且驱动薄膜中点处的温度最高。以薄膜两端驱动电压为 3 V 为例,设置环境温度为 20°C ,GNP/PDM 薄膜的温度与环境温度的差值为平均温升,研究了温升与驱动时间的关系,如图 6(c)所示。可以看出,随着驱动时间以及驱动功率的增大,温升增大。在不同驱动电压下各膜层探测点的平均

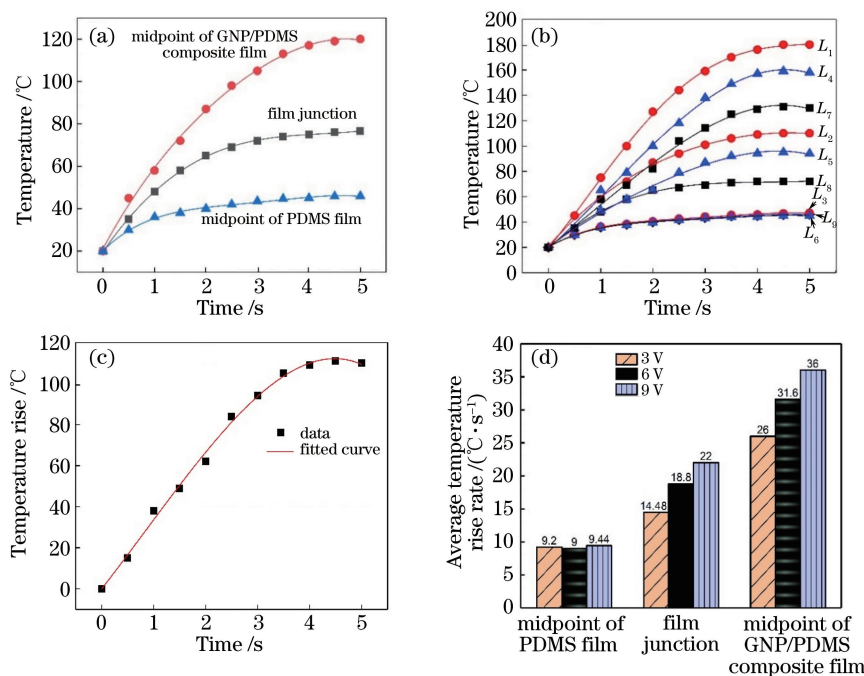


图 6 薄膜温度变化。(a)薄膜中探测点处的温度(点表示模拟数据,实线表示拟合曲线);(b)不同驱动电压下探测点处的温度变化(点表示模拟数据,实线表示拟合曲线);(c) GNP/PDM 薄膜的温升;(d)平均温升速率

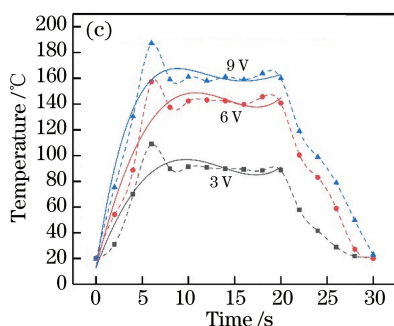
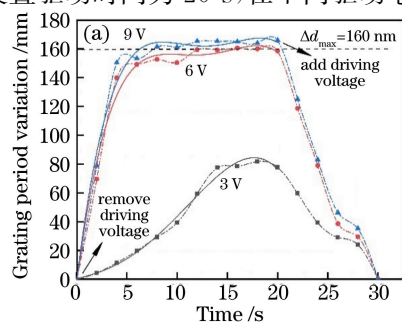
Fig. 6 Temperature change of thin film. (a) Temperature at detection point in thin film (point represents simulated data, and solid line represents fitted curve); (b) temperature change at detection point under different driving voltages (point represents simulated data, and solid line represents fitted curve); (c) temperature rise of GNP/PDMS composite film; (d) average temperature rise rate

温升速率,如图 6(d)所示。可以看出,随着驱动薄膜两端电压的增大,驱动薄膜中点以及薄膜连接点处的平均温升速率提高。驱动电压对分光 PDMS 薄膜影响不大,随着驱动电压的增大,膜层温度稳定在 45 °C 左右。

3.4 实验分析

对 3.2 节中光栅模拟结果进行了实验验证分析,选取两个低压驱动器作为驱动电源,驱动器两端接入 GNP/PDMS 膜层表面,调节驱动器的安装位置与 GNP/PDMS 复合薄膜两端相对应。实验在 20 °C 左右的环境温度下进行,在驱动之前,控制 GNP/PDMS 复合薄膜的形变量范围为 GNP/PDMS 薄膜长度的 10%~40%,此时的复合薄膜为收缩状态。加上驱动电压后,驱动薄膜受热收缩,拉动分光部分的 PDMS 薄膜,相邻两条光栅之间的距离增大,光栅周期增大。移除驱动电压后,驱动薄膜恢复原形态,光栅复位,实现了光栅周期的调谐。

在实验中,设置驱动时间为 20 s,在不同驱动电



压下纳米光栅周期变化的实验结果和模拟结果对比如图 7(a)、(b)所示,其中 Δd_{\max} 为光栅周期最大变化量。从图 7(a)中可以发现,当驱动电压为 6 V 和 9 V 时 PDMS 光栅薄膜在 5 s 内能实现稳定变化,且随着驱动时间的增加,光栅周期在增大。当驱动电压为 3 V 时,薄膜的机械响应较慢。从图 7(b)中可以发现,在电驱动过程中,光栅周期的变化随驱动电压的增大而增大。驱动电压 6 V 和 9 V 下的实验结果与仿真结果相近,实验所得的光栅周期最大变化量为 160 nm。从图 7(a)、(b)中可以看出,当驱动电压为 6 V 时,仿真结果与实验结果最为接近,且薄膜在 5 s 内能达到 160 nm 的光栅周期变化量,薄膜机械响应最好,此时光栅周期可实现 3.2% 的连续周期调谐。从图 7(c)、(d)中可以看出,当驱动电压为 6 V 时,GNP/PDMS 膜层温度变化与仿真结果接近,加上驱动电压后,膜层温度可在 5 s 内达到 160 °C。

在实验中,薄膜的温度变化与仿真结果相近,但

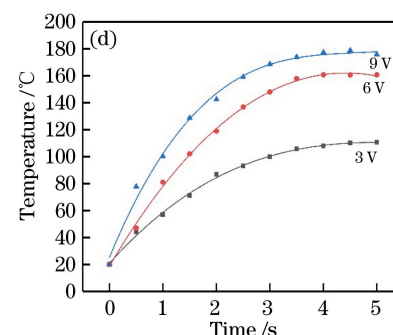
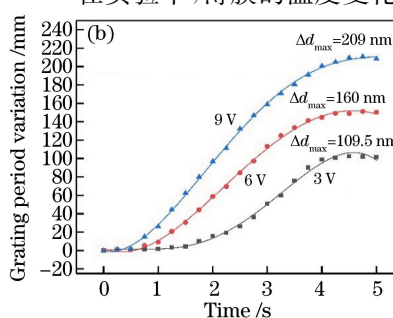


图 7 实验与模拟的对比。(a) 实验中驱动电压对光栅周期的影响(虚线代表实验数据,实线代表拟合曲线);(b) 仿真中驱动电压对光栅周期的影响(点代表模拟数据,实线代表拟合曲线);(c) 实验中驱动电压对 GNP/PDMS 膜层温度的影响(虚线代表实验数据,实线代表拟合曲线);(d) 仿真中驱动电压对 GNP/PDMS 膜层温度的影响(点代表模拟数据,实线代表拟合曲线)

Fig. 7 Comparison between experiment and simulation. (a) Influence of driving voltage on grating period in experiment (dotted line represents experimental data, and solid line represents fitted curve); (b) influence of driving voltage on grating period in simulation (point represents simulation data, and solid line represents fitted curve); (c) influence of driving voltage on temperature of GNP/PDMS film in experiment (dotted line represents experimental data, and solid line represents fitted curve); (d) influence of driving voltage on temperature of GNP/PDMS film in simulation (point represents simulation data, and solid line represents fitted curve)

当驱动电压为 3 V 时,薄膜机械响应较慢,与光栅周期的变化仿真结果有一定的差异,主要原因可能是薄膜在制备过程中受环境以及加工工艺的影响,材料的实际性能与理论性能存在一定差异。

4 结 论

针对 GNP 材料具有良好的导电性和较高的杨氏模量,研究设计并制备了低压直流驱动的可调纳米光栅。该可调电驱动纳米光栅的两端是作为驱动部分的 GNP/PDMS 复合薄膜,中间是作为光栅分光部分的 PDMS 薄膜。对纳米光栅进行了仿真与实验分析,揭示了光栅周期和膜层温度的变化规律以及影响因素。最终发现,当纳米光栅薄膜结构尺寸不变,驱动电压越大,在 5 s 驱动时间内膜层的温度越高。电功率对 PDMS 分光薄膜膜层温度影响不大,随着驱动电压的增大,膜层温度稳定在 45 °C 左右。当保持 GNP/PDMS 复合薄膜的形变量为 GNP/PDMS 薄膜长度的 40% 且驱动电压为 6 V 时,薄膜机械响应最好,薄膜仿真结果与实验结果最接近。此时,光栅周期的最大调谐范围在 160 nm 左右,且光栅周期在 5 s 内能实现 3.2% 的连续周期调谐。除此之外,通过实验发现,光栅周期的调谐能力与 GNP/PDMS 的预拉伸量以及薄膜制备过程中各组分的百分比具有直接关系,仿真结果具有很好的参考价值,为后续纳米光栅结构的优化提供了指导。

参 考 文 献

- [1] Koerner H, Price G, Pearce N A, et al. Remotely actuated polymer nanocomposites: stress-recovery of carbon-nanotube-filled thermoplastic elastomers [J]. *Nature Materials*, 2004, 3(2): 115-120.
- [2] Benchirouf A, Müller C, Kanoun O. Electromechanical behavior of chemically reduced graphene oxide and multi-walled carbon nanotube hybrid material [J]. *Nanoscale Research Letters*, 2016, 11: 4.
- [3] Yang Y S, Lin Y H, Hu Y C, et al. A large-displacement thermal actuator designed for MEMS pitch-tunable grating [J]. *Journal of Micromechanics and Microengineering*, 2009, 19(1): 015001.
- [4] Zhang Z Q, Wang F L, Xu G S, et al. Design and simulation of optical drive tunable grating based on GNP and PDMS [J]. *Materials Research Express*, 2019, 6(5): 055704.
- [5] Wang F, Jia S H, Wang Y L, et al. Near-infrared light-controlled tunable grating based on graphene/elastomer composites [J]. *Optical Materials*, 2018, 76: 117-124.
- [6] Aschwanden M, Stemmer A. Polymeric, electrically tunable diffraction grating based on artificial muscles [J]. *Optics Letters*, 2006, 31(17): 2610-2612.
- [7] Leng J S, Wu X L, Liu Y J. Effect of a linear monomer on the thermomechanical properties of epoxy shape-memory polymer [J]. *Smart Materials and Structures*, 2009, 18(9): 095031.
- [8] Novoselov K S, Fal'ko V I, Colombo L, et al. A roadmap for graphene [J]. *Nature*, 2012, 490: 192-200.
- [9] Loomis J, King B, Burkhead T, et al. Graphene-nanoplatelet-based photomechanical actuators [J]. *Nanotechnology*, 2012, 23(4): 045501.
- [10] Krishnan M B, Rosset S, Bhattacharya S, et al. Fabrication of transmissive dielectric elastomer actuator driven tunable optical gratings with improved tunability [J]. *Optical Engineering*, 2016, 55(4): 047104.
- [11] Liu X, Li T, Ming A J, et al. MEMS compressed tunable grating [J]. *Proceedings of SPIE*, 2009, 7381: 73812L.
- [12] Wang X, Liu Y L, Li L Y. Measurement error and fitting accuracy of fringe structured light system [J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2020, 47(6): 0604004. 王潇, 刘育梁, 李丽艳. 光栅结构光系统测量误差与拟合精度研究 [J]. *中国激光*, 2020, 47(6): 0604004.