

多层超薄薄膜介质光热辐射的三维理论研究^{*}

闫长春[†] 薛国刚 刘 诚 高淑梅

(徐州师范大学物理系, 徐州 221116)

(2004 年 7 月 9 日收到 2004 年 12 月 13 日收到修改稿)

在柱坐标系下,以热传导方程及边界条件为基础,通过 Hankel 变换及逆变换,得到多层热单介质膜中的温度场.以特殊参数为例,对膜层为三层时的特殊情况进行讨论,得知对于高热扩散率的薄膜材料,纵向和横向的热导率比值越大,相位的变化也越大.低热扩散率薄膜材料,不同的纵向和横向的热导率比对光热信号的影响很小.同时,光吸收系数越小,频率变化对相位影响越明显.

关键词:多层,热单介质膜,温度场

PACC:0760D,0762,0720

1. 引 言

随着社会的发展,科学技术的不断进步,各种新型材料不断推出,并在诸多领域得到广泛的应用.热导率作为材料的重要热学性质,因此对这些新材料热导率的研究也尤为必要.目前,对这些新材料热学性质的理论和实验已经比较完善,在实验上也有许多方法,如光声技术^[1]、光热辐射技术^[2]、光热偏转技术^[3,4]、脉冲电热技术^[5]、ISTS 技术^[6]、光热位移技术^[7,8]等等.要测量这些材料的热导率,就必须有相应成熟的理论.而目前,为了使集成电路储存器的容量增大,且体积变小,都尽量使电容器两金属板之间的介电系数变大.同时,为了使集成电路两元件之间绝缘,这两元件之间介质介电系数必须很小,从而减小寄生电容对电路的影响.于是,就出现了多膜层结构.而这些膜层由于很薄,只有几十、几百、至多几千个纳米量级^[9].所以,这些膜层就不再表现为各向同性,却表现为各向异性特点,即热单轴晶体情况.所有这些对材料及加工技术的要求越来越高,而对材料性质的研究也尤为必要,热学性质的研究是其中极为重要的一个方面.由于当材料的厚度等越来越小时,它们的热学参数也显示尺寸效应,且常规方法难以测量,常常采用光热位移方法等进行测量.然而

目前,多层热单轴介质光热三维理论尚未出现,而本文则将多层热单轴介质在连续调制光辐照下,介质吸收光能并转变为热,热量通过热传导在材料内扩散,从而形成温度场,通过 Hankel 变换得到多层热单轴介质各层的温度场变化分布,建立了连续调制激光照射多层材料的三维模型.从而为各种光热辐射技术测量提供理论依据,尤其是光热位移技术.

2. 基本理论

假设 k_{iz} 为第 i 层介质的 z 方向热导率, k_{it} 为第 i 层介质的表面热导率, Δz_i 为第 i 层厚度, α_i 为第 i 层介质的光吸收系数, ρ_i 为第 i 层介质的密度, c_i 为第 i 层介质的热容, $I = I_0(1 + \cos(\omega t))\exp(-r^2/a^2)$ 为入射光的强度分布, T_i 为第 i 层介质的温度变化分布, Q_i 为第 i 层介质吸收的热量,如图 1 所

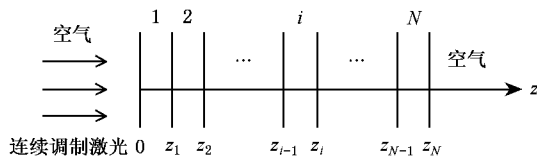


图 1 连续调制激光辐照三层介质薄膜示意图

示,则第 i 层介质在柱坐标系下的热传导方程为^[10]

^{*} 江苏省教育厅自然科学基金(批准号:ZXL050304 和 04KJD140196)和徐州师范大学自然科学基金(批准号:03XLB06)资助的课题.

[†] E-mail: yancc@xynu.edu.cn

$$k_{iz} \frac{\partial^2 T_i}{\partial z^2} + k_{ir} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right) T_i - \rho_i c_i \frac{\partial T_i}{\partial t} = -Q_i(r, z, t), \quad (1)$$

其中

$$Q_i(r, z, t) = \frac{I_0 \alpha_i \cos(\omega t)}{2} e^{-\sum_{m=1}^{i-1} \alpha_m z_m - \alpha_i (z - \sum_{m=1}^{i-1} \Delta z_m) - r^2/a^2},$$

只考虑交流成分.

边界条件

$$k_{1z} \frac{\partial T_1}{\partial z} = 0, \quad z = 0, \quad (2a)$$

$$T_i = T_{i+1}, \quad z = z_i (i = 1, 2, \dots, N-1), \quad (2b)$$

$$k_{iz} \frac{\partial T_i}{\partial z} = k_{i+1z} \frac{\partial T_{i+1}}{\partial z}, \quad z = z_i (i = 1, 2, \dots, N-1), \quad (2c)$$

$$k_{Nz} \frac{\partial T_N}{\partial z} = 0, \quad z = z_N. \quad (2d)$$

将 T_i 进行 Hankel 变换, 有

$$\begin{aligned} \tau_i(\xi, z, t) &= \tau_i(\xi, z) \cos(\omega t) \\ &= \int_0^\infty T_i(r, z) \cos(\omega t) J_0(\xi r) r dr, \quad (3) \end{aligned}$$

则(1)式可变为

$$\begin{aligned} & \left(k_{iz} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - k_{ir} \xi^2 - i\omega \rho_i c_i \right) \tau_i(\xi, z) \\ &= -\frac{I_0 a^2 \alpha_i}{2} \exp\left(-\frac{a^2 \xi^2}{4} - \sum_{m=1}^{i-1} \alpha_m \Delta z_m - \alpha_i \left(z - \sum_{m=1}^{i-1} \Delta z_m\right)\right). \quad (4) \end{aligned}$$

设 $\tau_i(\xi, z)$ 的一个特解为

$$\tau_i(\xi, z) = \exp\left(-\alpha_i \left(z - \sum_{m=1}^{i-1} \Delta z_m\right)\right) H_i(\xi),$$

并代入(4)式得

$$H_i(\xi) = \frac{-I_0 \alpha_i a^2 \exp\left(-\frac{a^2 \xi^2}{4} - \sum_{m=1}^{i-1} \alpha_m \Delta z_m\right)}{\alpha_i^2 k_{iz} - \xi^2 k_{ir} - i\omega \rho_i c_i}, \quad (5)$$

$\tau_i(\xi, z)$ 的通解设为

$$\begin{aligned} & \tau_i(\xi, z) \\ &= A_i \exp\left(z - \sum_{m=1}^{i-1} \Delta z_m\right) \sqrt{\frac{k_{ir} \xi^2 + i\omega \rho_i c_i}{k_{iz}}} \\ &+ B_i \exp\left(-\left(z - \sum_{m=1}^{i-1} \Delta z_m\right) \sqrt{\frac{k_{ir} \xi^2 + i\omega \rho_i c_i}{k_{iz}}}\right) \\ &+ H_i(\xi) \exp\left(-\alpha_i \left(z - \sum_{m=1}^{i-1} \Delta z_m\right)\right), \quad (6) \end{aligned}$$

将边界条件(2a)(2b)(2c)(2d)进行 Hankel 变换

$$\frac{\partial \tau_1}{\partial z} = 0, \quad z = 0, \quad (7a)$$

$$\begin{aligned} \tau_i &= \tau_{i+1}, \quad z = z_i \\ &(i = 1, 2, \dots, N-1), \quad (7b) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} k_{iz} \frac{\partial \tau_i}{\partial z} &= k_{i+1z} \frac{\partial \tau_{i+1}}{\partial z}, \\ z &= z_i \quad (i = 1, 2, \dots, N-1), \quad (7c) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \tau_N}{\partial z} = 0, \quad z = z_N. \quad (7d)$$

将(6)式代入(7a)(7b)(7c)(7d)可得方程组

$$\begin{bmatrix} \sqrt{\frac{k_{1r} \xi^2 + i\omega \rho_1 c_1}{k_{1z}}} & -\sqrt{\frac{k_{1r} \xi^2 + i\omega \rho_1 c_1}{k_{1z}}} & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \exp\left(\Delta z_i \sqrt{\frac{k_{ir} \xi^2 + i\omega \rho_i c_i}{k_{iz}}}\right) \\ 0 & 0 & \dots & k_{iz} \sqrt{\frac{k_{ir} \xi^2 + i\omega \rho_i c_i}{k_{iz}}} \exp\left(\Delta z_i \sqrt{\frac{k_{ir} \xi^2 + i\omega \rho_i c_i}{k_{iz}}}\right) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned}
 & \begin{matrix} 0 & & 0 \\ \exp\left(-\Delta z_i \sqrt{\frac{k_{ir}\xi^2 + i\omega\rho_i c_i}{k_{iz}}}\right) & & 1 \\ -k_{iz}\sqrt{\frac{k_{ir}\xi^2 + i\omega\rho_i c_o}{k_{iz}}} \exp\left(-\Delta z_i \sqrt{\frac{k_{ir}\xi^2 + i\omega\rho_i c_i}{k_{iz}}}\right) & & -k_{i+1z}\sqrt{\frac{k_{i+1r}\xi^2 + i\omega\rho_{i+1} c_{i+1}}{k_{i+1z}}} \\ 0 & & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & \dots & 0 \\ k_{i+1z}\sqrt{\frac{k_{i+1r}\xi^2 + i\omega\rho_{i+1} c_{i+1}}{k_{i+1z}}} & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \sqrt{\frac{k_{Nr}\xi^2 + i\omega\rho_N c_N}{k_{Nz}}} \exp\left(\Delta z_N \sqrt{\frac{k_{Nr}\xi^2 + i\omega\rho_N c_N}{k_{Nz}}}\right) \end{matrix} \left[\begin{matrix} A_1 \\ B_1 \\ \\ A_i \\ B_i \\ \\ A_N \\ B_N \end{matrix} \right] \\
 & = [\alpha_1 H_1, H_2 - H_1 \exp(-\alpha_1 \Delta z_1), \dots, H_{i+1} - H_i \exp(-\alpha_i \Delta z_i), \\
 & \quad -k_{i+1z}\alpha_{i+1} H_{i+1} + k_{iz}\alpha_i H_i \exp(-\alpha_i \Delta z_i), \dots, \alpha_N H_N \exp(-\alpha_N \Delta z_N)]^T. \tag{8}
 \end{aligned}$$

通过解方程组可得 A_i, B_i ,并将它们代入(6)式 ,进行逆 Hankel 变换可得到任意膜层中的温度变化分布 $T_i(r, z, t)$,即

其中

$$\begin{aligned}
 A &= \frac{\alpha H(\xi) (e^{-\alpha z} - e^{-z\Delta})}{\Delta (e^{z\Delta} - e^{-z\Delta})} + \frac{\alpha H(\xi)}{\Delta}, \\
 B &= \frac{\alpha H(\xi) (e^{-\alpha z} - e^{z\Delta})}{\Delta (e^{z\Delta} - e^{-z\Delta})},
 \end{aligned}$$

$$T_i(r, z, t) = \int_0^\infty \tau_i(\xi, z) \cos(\omega t) J_0(\xi_r) \xi d\xi. \tag{9}$$

2.1. 当只有单层膜时 ,即 $N = 1$

$$H(\xi) = \frac{-I_0 \alpha a^2 \exp\left(-\frac{a^2 \xi^2}{4}\right)}{\alpha (\alpha^2 k_z - \xi^2 k_r - i\omega\rho c)},$$

$$\Delta = \sqrt{\frac{k_r \xi^2 + i\omega\rho c}{k_z}}.$$

将解得的 A, B 代入(9)式可得

$$\begin{aligned}
 T(r, z, t) &= \cos \omega t \left[\int_0^\infty A \exp\left(z \sqrt{\frac{k_r \xi^2 + \omega\rho c}{k_z}}\right) \right. \\
 &\quad + B \exp\left(-z \sqrt{\frac{k_r \xi^2 + i\omega\rho c}{k_z}}\right) \\
 &\quad \left. + H(\xi) \exp(-\alpha z) \right] J_0(\xi_r) \xi d\xi, \tag{10}
 \end{aligned}$$

2.2. 当有三层膜时 ,即 $N = 3$

设第一层和第三层是纯铜 ,第二层为一高电介质 ,于是构成一电容器 .并设各参数分别为三层膜的

光吸收系数 $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 10^3 \text{ m}^{-1}$, 三层膜厚都为 $1 \times 10^{-5} \text{ m}$, 密度 $\rho_1 = \rho_3 = 8.954 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$, 比热 $c_1 = c_3 = 3.831 \times 10^2 \text{ J/kg} \cdot ^\circ\text{C}$, z 方向热导率 $k_{1z} = k_{3z} = 386 \text{ W/m} \cdot ^\circ\text{C}$, $k_{2z} = 5 \text{ W/m} \cdot ^\circ\text{C}$, z 方向的热扩散率分别为 $k_{1z}/\rho_1 C_1 = k_{3z}/\rho_3 C_3 = 1.123 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$, $k_{2z}/\rho_2 C_2 = 1.0 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$. 激光束腰半径 $a = 4 \times 10^{-4} \text{ m}$, 激光功率 1 W , 将上述参数代入 (8) 式后, 将解得 A_1, B_1 , 代入 (6) (9) 式可得到前表面中心处温度变化分布 $T_1(0, 0)$ 相位随频率分布如图 2, 图 3, 图 4 所示.

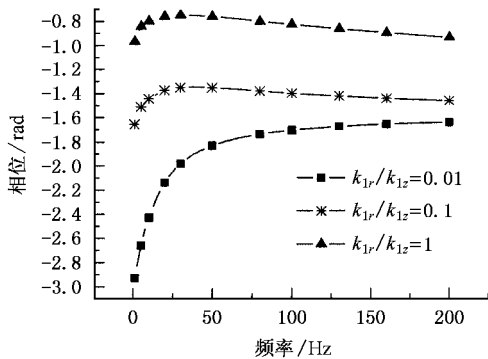


图 2 $k_{1r}/k_{1z} = 0.01, 0.1, 1$ 时, 三层膜前表面中心相位随频率变化图

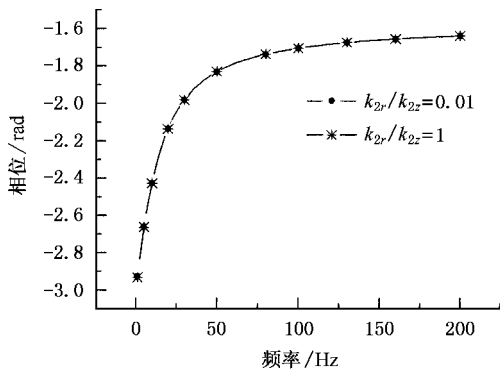


图 3 $k_{2r}/k_{2z} = 0.01, 1$ 时, 三层膜前表面中心相位随频率变化图

从图 2 可知, 对于高热扩散率的薄膜材料, 不同的纵向和横向的热导率比会对光热信号带来不同的影响. 同时, 纵向和横向的热导率比值越大, 相位的变化也越大. 由此, 只要测出相位随频率的变化关系, 一方面, 从相位的变化范围可判断高热率薄膜材料的各向异性程度. 另一方面, 通过非线性拟合可以拟合出高热率薄膜材料的纵向和横向的热导率比. 从图 3 可知, 对于和高热扩散率薄膜紧贴在一起的低热扩散率薄膜材料, 不同的纵向和横向的热导

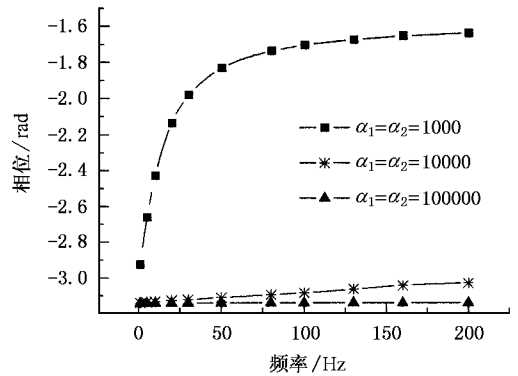


图 4 $k_{1r}/k_{1z} = k_{2r}/k_{2z} = 0.01$, $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 10^3 \text{ m}^{-1}, 10^3 \text{ m}^{-1}, 10^3 \text{ m}^{-1}$ 时, 三层膜前表面中心相位随频率变化图

率比对光热信号的影响很小. 这说明对光热信号起作用的主要来自高热扩散率的薄膜材料. 从图 4 可知, 不同的光吸收系数的材料相位随频率的变化也不同. 光吸收系数越小, 频率变化对相位影响越明显. 对于光吸收系数较大的薄膜材料, 要得到明显变化的光热信号, 必须将调制频率作较大的变化.

3. 结 论

对于多层介质膜来说, 由于膜层很薄, 这些膜层就不再表现为各向同性, 而是表现为各向异性, 即热单轴情况. 根据上面的讨论, 在柱坐标系下, 以热单轴各向异性介质的热传导方程为基础, 选择合适的边界条件, 通过 Hankel 变换和逆 Hankel 变换, 得到任意膜层中的温度变化分布. 并以特殊参数为例, 对当膜层为三层时的特殊情况进行讨论. 得知对于高热扩散率的薄膜材料, 纵向和横向的热导率比值越大, 相位的变化也越大. 若测出相位随频率的变化关系, 一方面, 从相位的变化范围可判断高热率薄膜材料的各向异性程度. 另一方面, 通过非线性拟合可以拟合出高热率薄膜材料的纵向和横向的热导率比. 低热扩散率薄膜材料, 不同的纵向和横向的热导率比对光热信号的影响很小. 说明对光热信号起贡献的主要来自高热扩散率的薄膜材料. 同时, 光吸收系数越小, 频率变化对相位影响越明显. 对于光吸收系数较大的薄膜材料, 要得到明显变化的光热信号, 必须将调制频率作较大的变化. 这就为以后集成电路等中间出现的多层薄膜热性质的测量提供了理论依据.

- [1] Perondi L J and Miranda L C M 1987 *J. Appl. Phys.* **62** 2955
- [2] Yan C C , Pan J and Gu J H 2003 *Chin. J. Laser* **30** 647 (in Chinese)[闫长春、潘 隽、顾济华 2003 中国激光 **30** 647]
- [3] Zhou W Y , Jie S W , Qian S F , Zhao S F , Zhao R A , Wang G , Qian L Q and Li W Z 1997 *Acta. Phys. Sin.* **46** 162 (in Chinese) [周维亚、解思深、钱生法、赵日安、王 刚、钱露茜、李文治 1997 物理学报 **46** 162]
- [4] Gu C D , Jin Z S , Lu X Y and Zou G T 1997 *Acta. Phys. Sin.* **46** 1984 (in Chinese)[顾长志、金曾孙、吕宪义、邹广田 1997 物理学报 **46** 1984]
- [5] Bauer S and De Reggi A S 1996 *J. Appl. Phys.* **80** 6124
- [6] Rogers J A , Mindas C , Yang Y and Nekson K A 1994 *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **323** 441
- [7] Ogawa E T , Hu C and Ho P S 1999 *J. Appl. Phys.* **86** 6018
- [8] Hu C , Ogawa E T and Ho P S 1999 *J. Appl. Phys.* **86** 6028
- [9] Liu S , Ning Y G , Zhang Y , Chen A , Zhang H W and Liu J G 2002 *Acta. Phys. Sin.* **50** 1447 (in Chinese)[刘 爽、宁永功、张毅、陈 艾、张怀武、刘俊刚 2001 物理学报 **50** 1447]
- [10] Ozisik M N 1980 *Heat conduction* (Ney York :Wiley) 464

Study on the three-dimensional theory of super thin multi-layered films irradiated by the continuously modulated laser^{*}

Yan Chang-Chun[†] Xue Guo-Gang Liu Cheng Gao Shu-Mei
 (Department of Physics ,Xuzhou Normal University ,Xuzhou 221116 ,China)
 (Received 9 July 2004 ; revised manuscript received 13 December 2004)

Abstract

On the basis of heat conduction equations and under special boundary conditions ,the temperatute fields of multilayered heated uniaxial films can be acquired in the cylindrical coordinate system by Hankel transformation and retransformation. As an example with specific parameters ,the special growth conditions for three-layered films are discussed. The larger are the lognitudinal heat conductions vs transverse ones of thin films for higher thermal diffusivity ,the larger are changes of phases of the temperature fields in the thin films. However ,it is faintly influencing for the lognitudinal heat conductions vs transverse ones of thin films for lower thermal diffusivity and the smaller is light absorbing coefficient ,the more evident is the influence on phases because of frequency change.

Keywords : multilayers , thermally uniaxial films , temperature field

PACC : 0760D , 0762 , 0720

^{*} Project supported by Natural Science Foundation of Jiangsu Educational Committee(Grant Nos. ZXL050304 and 04KJD140196) and the Natural Science Fund of Xuzhou Normal University(Grant No. 03XLB06).

[†]E-mail : yancc@xznu.edu.cn