

应用 D2Q9 格子玻尔兹曼模型研究超快激光传热过程

赵国晨¹, 孙浩森², 王先征¹, 于明志¹, 毛煜东^{1,*}

(1. 山东建筑大学 热能工程学院, 山东 济南 250101; 2. 山东建筑大学 学报编辑部, 山东 济南 250101)

摘要:目前,硅薄膜以及超快激光加热技术已经广泛应用于微/纳米的电子器件,其导热机理的研究将对微/纳米电子系统的热管理具有重要的指导意义。采用二维 D2Q9 的格子玻尔兹曼方法(Lattice Boltzmann Method, LBM)模拟超快激光加热硅薄膜的声子输运,并比较了一维 LBM 获得的结果。结果表明:当薄膜的克努森数 >0.1 时,受到激光扰动后,其内部会出现热量的波状传递现象,波动的大小与薄膜的克努森数有关,且会逐渐趋于平缓;其一维结果中虽也可以捕捉到这种热波现象,但会过高地估计薄膜内部的能量密度,因此激光径向方向的影响是不可忽视的。

关键词:超快激光;硅薄膜;格子玻尔兹曼方法;声子

中图分类号:TK124

文献标识码:A

文章编号:1673-7644(2023)05-0074-08

Application of D2Q9 Lattice Boltzmann Method to study ultrafast laser heat transfer process

ZHAO Guochen¹, SUN Haosen², WANG Xianzheng¹, YU Mingzhi¹, MAO Yudong^{1,*}

(1. School of Thermal Engineering, Shandong Jianzhu University, Jinan 250101, China; 2. Editorial Department of Journal of Shandong Jianzhu University, Jinan 250101, China)

Abstract: At present, silicon thin film and ultrafast laser heating technology have been widely used in micro/nano electronic devices, and the study of its thermal conductivity mechanism will be an important guide for the thermal management of micro/nano electronic systems. The phonon transport simulation of ultrafast laser-heated silicon thin films is carried out using the two-dimensional D2Q9 Lattice Boltzmann Method (LBM), and the results are compared with those obtained by one-dimensional LBM. The results show that when the Knudsen number of the film is higher than 0.1, there will be a wave-like heat transfer phenomenon inside the film after it is perturbed by the laser. The magnitude of the fluctuation is related to the Knudsen number of the film and it will be gradually leveled off. The thermal wave phenomenon can also be captured in one-dimensional results, but the energy density inside the film is overestimated. Therefore, the influence of the radial direction of the laser cannot be ignored.

Key words: ultrafast laser; silicon thin film; Lattice Boltzmann Method; phonon

0 引言

超快激光技术因具有加热速度快、能量密度和精准性高等优点而广泛应用于激光焊接^[1]、激光加工^[2-3]等诸多领域。硅薄膜是一种比较常见的半导

体材料^[4],在芯片^[5]、太阳能电池^[6-7]和各种电子系统^[8]等领域都具有十分广泛的应用。借助超快激光加热硅薄膜探索微/纳米结构的传热过程,对于材料加工、热处理^[9]以及微电子系统的散热^[10]等技术具有重要的现实意义。

收稿日期:2022-05-12

基金项目:山东省高等学校科技计划项目(J16LG07);济南市科研带头人工作室项目(2019GXRC056)

作者简介:赵国晨(1997—),男,在读硕士,主要从事微尺度传热等方面的研究。E-mail: 2647271071@qq.com

通讯作者*:毛煜东(1989—),男,副教授,博士,主要从事微尺度传热传质等方面的研究。E-mail: maoyudong@sdjzu.edu.cn

傅里叶定律可用来描述宏观上的传热过程,但其假设热的传播速度无限大且是以扩散的方式在材料中传播,对于超快速加热过程并不适用。格子玻尔兹曼方法(Lattice Boltzmann Method, LBM)是玻尔兹曼输运方程(Boltzmann Transport Equation, BTE)常用的数值解法,具有计算工作量较小、边界处理简单、易于编程等优点,非常适合于求解微纳米尺度下的热输运问题。BTE 方程具有非常复杂的碰撞项,无法对其直接求解。1954 年,BHATNAGAR、GROSS 和 KROOK 在不影响求解结果的前提下引入了一个简单的碰撞算子模型简化了 BTE 模型,称为 LBGK 模型,成为后来 LBM 的主要研究模型^[11]。

硅薄膜作为半导体材料,其内部热量传递的热载体为声子^[12]。德拜模型认为所有声子都以单一、固定的速度传播,而与声子的频率无关,将所有声子分支压缩成一个线性色散关系^[13]。在遵循德拜模型假设的前提下推导出了灰色 LBM 模型(Gray LBM Model),忽略了声子特性的频率依赖性,大大简化了求解过程,因此也成为了模拟声子输运的主要模型。文章应用灰色 LBM 模型研究了超快激光加热硅薄膜的二维导热问题,探究了这种超短时间、超小尺寸的传热问题,展示了二维薄膜内部能量密度的分布情况,并对比分析了一维结果^[14]。

1 理论分析

1.1 晶格模型

LBM 主要由玻尔兹曼输运方程、晶格、格点至格点的传输限制等部分组成^[15]。晶格可以描述为对研究区域的空间离散化,进而可以扩展为对速度域进行离散化,因为粒子或粒子群在 LBM 中只允许沿着连接两个连续相邻节点的方向移动。两个常用的二维晶格示意图如图 1 所示。

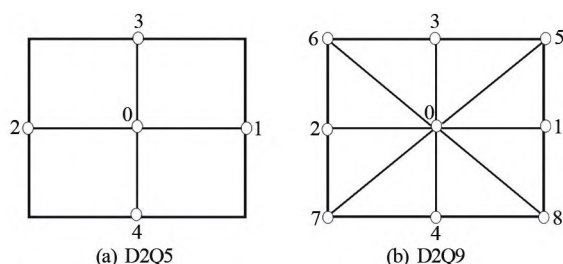


图 1 二维晶格模型示意图

D2Q5 是二维晶格中最简单的模型,其每个格点只有 4 个相邻点,所以仅有 4 个与之相关的离散传播速度,这还不足以代表粒子可以传播的所有可能方向。为了取得更加精确的结果,文章选用传播

速度更多的 D2Q9 模型,其每个格点有 8 个相邻点交换能量,可以很好地模拟二维传热问题^[16]。

1.2 格点到格点的传输限制

格点到格点的传输限制迫使粒子在离散时间步长内从一个晶格位置跳到相邻晶格位置,从而有效地将格点到格点的距离 d 与离散时间步长 dt 的大小相关联,如图 2 所示,其中 c 为离散速度。这一限制有助于简化玻尔兹曼方程的离散推导。

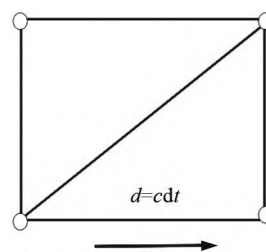


图 2 格点到格点的传输

1.3 控制方程的推导和离散

Boltzmann-BGK 模型的表达式由方程(1)表示为

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \Delta f = \frac{f^{\text{eq}} - f}{\tau}, \quad (1)$$

式中 f 为速度分布函数; v 为粒子的群速度; τ 为弛豫时间(粒子发生两次碰撞的时间间隔); f^{eq} 为平衡状态下的速度分布函数。

由声子能量密度表示的 BTE 可由式(2)表示为

$$\frac{\partial e}{\partial t} + v \cdot \left(\frac{\partial e}{\partial x} + \frac{\partial e}{\partial y} \right) = \frac{e^0 - e}{\tau_0} + qv, \quad (2)$$

式中 e 为能量密度; e^0 为平衡能量密度; x 和 y 为位置参数; τ_0 为声子弛豫时间。

文章采用的 D2Q9 模型,共有 9 个离散速度,控制方程可由式(3)表示为

$$\frac{\partial e_i}{\partial t} + v_i \left(\frac{\partial e_i}{\partial x} + \frac{\partial e_i}{\partial y} \right) = - \frac{e_i - e_i^0}{\tau} + qv, \quad (3)$$

式中 $i=0,1,2,\dots,8$ 为不同的速度方向。当 $i=0$ 时, $e_0^0 = \frac{4}{9}e^0$; 当 $i=1,2,3,4$ 时, $e_i^0 = \frac{1}{9}e^0$; 当 $i=5,6,7,8$ 时, $e_i^0 = \frac{1}{36}e^0$ 。

为方便计算进行下列无量纲变换,由式(4)~(6)表示为

$$x^* = x/L, y^* = y/M, t^* = t/\tau, \quad (4)$$

$$e_i^*(x^*, y^*, t^*) = \frac{e_i(x, y, t) - b_i E_1}{E_1}, \quad (5)$$

$$e^* = e_0^* + e_1^* + e_2^* + e_3^* + e_4^* + e_5^* + e_6^* + e_7^* + e_8^* = \frac{e(x, y, t) - E_1}{E_1}, \quad (6)$$

式中 x^* 、 y^* 为无量纲位置参数; L 、 M 分别为薄膜厚度方向和长度方向的特征尺寸; t^* 为无量纲时间参数; e^* 为无量纲能量密度参数; b_i 为不同方向的比重系数, 相加和为 1; E_1 为初始温度下的能量, $E_1 = e(T_0) = C_v T_0$, 其中 C_v 为硅的体积热容; T_0 为初始温度。

基于 LBM 建立超快激光加热薄膜问题的二维导热模型, 由式(7)表示为

$$\frac{\partial e_i}{\partial t} + v_i \left(\frac{\partial e_i}{\partial x} + \frac{\partial e_i}{\partial y} \right) = - \frac{e_i - e_i^0}{\tau} + S(x, y, t), \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial e_0^*}{\partial t^*} = & \frac{e_1^* + e_2^* + e_3^* + e_4^* + e_5^* + e_6^* + e_7^* + e_8^* - 5e_0^*}{9} + \\ & \frac{4 \cdot S_0 \cdot \gamma}{9E_1} \exp(-x^* \cdot \xi - y^{*2} \cdot \psi^2 - 1.992t^* \cdot \gamma), \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial e_1^*}{\partial t^*} + Kn \frac{\partial e_1^*}{\partial x^*} = & \frac{e_0^* + e_2^* + e_3^* + e_4^* + e_5^* + e_6^* + e_7^* + e_8^* - 8e_1^*}{9} + \\ & \frac{S_0 \cdot \gamma}{9E_1} \exp(-x^* \cdot \xi - y^{*2} \cdot \psi^2 - 1.992t^* \cdot \gamma), \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial e_2^*}{\partial t^*} - Kn \frac{\partial e_2^*}{\partial x^*} = & \frac{e_0^* + e_1^* + e_3^* + e_4^* + e_5^* + e_6^* + e_7^* + e_8^* - 8e_2^*}{9} + \\ & \frac{S_0 \cdot \gamma}{9E_1} \exp(-x^* \cdot \xi - y^{*2} \cdot \psi^2 - 1.992t^* \cdot \gamma), \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial e_3^*}{\partial t^*} + Kn \frac{\partial e_3^*}{\partial y^*} = & \frac{e_0^* + e_1^* + e_2^* + e_4^* + e_5^* + e_6^* + e_7^* + e_8^* - 8e_3^*}{9} + \\ & \frac{S_0 \cdot \gamma}{9E_1} \exp(-x^* \cdot \xi - y^{*2} \cdot \psi^2 - 1.992t^* \cdot \gamma), \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial e_4^*}{\partial t^*} - Kn \frac{\partial e_4^*}{\partial y^*} = & \frac{e_0^* + e_1^* + e_2^* + e_3^* + e_5^* + e_6^* + e_7^* + e_8^* - 8e_4^*}{9} + \\ & \frac{S_0 \cdot \gamma}{9E_1} \exp(-x^* \cdot \xi - y^{*2} \cdot \psi^2 - 1.992t^* \cdot \gamma), \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial e_5^*}{\partial t^*} + Kn \left(\frac{\partial e_5^*}{\partial x^*} + \frac{\partial e_5^*}{\partial y^*} \right) = & \frac{e_0^* + e_1^* + e_2^* + e_3^* + e_4^* + e_6^* + e_7^* + e_8^* - 35e_5^*}{36} + \\ & \frac{S_0 \cdot \gamma}{36E_1} \exp(-x^* \cdot \xi - y^{*2} \cdot \psi^2 - 1.992t^* \cdot \gamma), \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial e_6^*}{\partial t^*} - Kn \left(\frac{\partial e_6^*}{\partial x^*} + \frac{\partial e_6^*}{\partial y^*} \right) = & \frac{e_0^* + e_1^* + e_2^* + e_3^* + e_4^* + e_5^* + e_7^* + e_8^* - 35e_6^*}{36} + \\ & \frac{S_0 \cdot \gamma}{36E_1} \exp(-x^* \cdot \xi - y^{*2} \cdot \psi^2 - 1.992t^* \cdot \gamma), \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial e_7^*}{\partial t^*} + Kn \left(\frac{\partial e_7^*}{\partial x^*} + \frac{\partial e_7^*}{\partial y^*} \right) = & \frac{e_0^* + e_1^* + e_2^* + e_3^* + e_4^* + e_5^* + e_6^* + e_8^* - 35e_7^*}{36} + \\ & \frac{S_0 \cdot \gamma}{36E_1} \exp(-x^* \cdot \xi - y^{*2} \cdot \psi^2 - 1.992t^* \cdot \gamma), \end{aligned} \quad (16)$$

式中 $S(x, y, t)$ 为激光能量的吸收率, 可由式(8)表示为

$$S(x, y, t) = 0.94J \frac{1-R}{t_p \cdot \delta} \exp\left(-\frac{x}{\delta} - \frac{y^2}{r_0^2} - 1.992 \frac{t}{t_p}\right), \quad (8)$$

式中 J 为激光能量的发射密度; R 为表面反射率; t_p 为激光脉冲的持续时间; δ 为激光的穿透深度; r_0 为激光热源影响半径。

将式(4)~(6)的无量纲变化带入式(7), 得到无量纲化后的控制方程, 由式(9)~(17)表示为

$$\frac{\partial e_8^*}{\partial t^*} - Kn \left(\frac{\partial e_8^*}{\partial x^*} + \frac{\partial e_8^*}{\partial y^*} \right) = \frac{e_0^* + e_1^* + e_2^* + e_3^* + e_4^* + e_5^* + e_6^* + e_7^* - 35e_8^*}{36} + \frac{S_0 \cdot \gamma}{36E_1} \exp(-x^* \cdot \xi - y^{*2} \cdot \psi^2 - 1.992t^* \cdot \gamma) \quad (17)$$

离散化后的无量纲化的控制方程可以由式(18)~(26)表示为

$$e_0^*(x, y, t + \Delta t) = \left(1 - \frac{5}{9}W\right)e_0^* + \frac{e_1^* + e_2^* + e_3^* + e_4^* + e_5^* + e_6^* + e_7^* + e_8^*}{9}W + W \cdot \frac{4 \cdot S_0 \cdot \gamma}{9E_1} \exp(-x^* \cdot \xi - y^{*2} \cdot \psi^2 - 1.992t^* \cdot \gamma), \quad (18)$$

$$e_1^*(x + \Delta x, y, t + \Delta t) = \left(1 - \frac{8}{9}W\right)e_1^* + \frac{e_0^* + e_2^* + e_3^* + e_4^* + e_5^* + e_6^* + e_7^* + e_8^*}{9}W + W \cdot \frac{S_0 \cdot \gamma}{9E_1} \exp(-x^* \cdot \xi - y^{*2} \cdot \psi^2 - 1.992t^* \cdot \gamma), \quad (19)$$

$$e_2^*(x - \Delta x, y, t + \Delta t) = \left(1 - \frac{1}{9}W\right)e_2^* + \frac{e_1^* + e_0^* + e_3^* + e_4^* + e_5^* + e_6^* + e_7^* + e_8^*}{9}W + W \cdot \frac{S_0 \cdot \gamma}{9E_1} \exp(-x^* \cdot \xi - y^{*2} \cdot \psi^2 - 1.992t^* \cdot \gamma), \quad (20)$$

$$e_3^*(x, y + \Delta y, t + \Delta t) = \left(1 - \frac{1}{9}W\right)e_3^* + \frac{e_1^* + e_2^* + e_0^* + e_4^* + e_5^* + e_6^* + e_7^* + e_8^*}{9}W + W \cdot \frac{S_0 \cdot \gamma}{9E_1} \exp(-x^* \cdot \xi - y^{*2} \cdot \psi^2 - 1.992t^* \cdot \gamma), \quad (21)$$

$$e_4^*(x, y - \Delta y, t + \Delta t) = \left(1 - \frac{1}{9}W\right)e_4^* + \frac{e_1^* + e_2^* + e_3^* + e_0^* + e_5^* + e_6^* + e_7^* + e_8^*}{9}W + W \cdot \frac{S_0 \cdot \gamma}{9E_1} \exp(-x^* \cdot \xi - y^{*2} \cdot \psi^2 - 1.992t^* \cdot \gamma), \quad (22)$$

$$e_5^*(x + \Delta x, y + \Delta y, t + \Delta t) = \left(1 - \frac{35}{36}W\right)e_5^* + \frac{e_1^* + e_2^* + e_3^* + e_4^* + e_0^* + e_6^* + e_7^* + e_8^*}{9}W + W \cdot \frac{S_0 \cdot \gamma}{36E_1} \exp(-x^* \cdot \xi - y^{*2} \cdot \psi^2 - 1.992t^* \cdot \gamma), \quad (23)$$

$$e_6^*(x - \Delta x, y + \Delta y, t + \Delta t) = \left(1 - \frac{35}{36}W\right)e_6^* + \frac{e_1^* + e_2^* + e_3^* + e_4^* + e_5^* + e_0^* + e_7^* + e_8^*}{9}W + W \cdot \frac{S_0 \cdot \gamma}{36E_1} \exp(-x^* \cdot \xi - y^{*2} \cdot \psi^2 - 1.992t^* \cdot \gamma), \quad (24)$$

$$e_7^*(x - \Delta x, y - \Delta y, t + \Delta t) = \left(1 - \frac{35}{36}W\right)e_7^* + \frac{e_1^* + e_2^* + e_3^* + e_4^* + e_5^* + e_6^* + e_0^* + e_8^*}{9}W + W \cdot \frac{S_0 \cdot \gamma}{36E_1} \exp(-x^* \cdot \xi - y^{*2} \cdot \psi^2 - 1.992t^* \cdot \gamma), \quad (25)$$

$$e_8^*(x + \Delta x, y - \Delta y, t + \Delta t) = \left(1 - \frac{35}{36}W\right)e_8^* + \frac{e_1^* + e_2^* + e_3^* + e_4^* + e_5^* + e_6^* + e_7^* + e_0^*}{9}W + W \cdot \frac{S_0 \cdot \gamma}{36E_1} \exp(-x^* \cdot \xi - y^{*2} \cdot \psi^2 - 1.992t^* \cdot \gamma), \quad (26)$$

式中 $W = \Delta t^* = \frac{\Delta x^*}{Kn}$ 、 $\xi = \frac{L}{\delta}$ 、 $\gamma = \frac{\tau}{t_p}$ 、 $\psi = \frac{L}{r_0}$, 均为中间参数, 无特殊含义; $S_0 = 0.94 \frac{J(1-R)}{\delta}$ 、克努森数 $Kn =$

$\frac{l}{L}$ 、 l 为声子的平均自由程。

2 方法验证

尺寸效应会对热导率产生影响,是纳米尺度传热的显著特征之一。ALVAREZ 等^[17]基于扩展的不可逆热力学,提出了一个尺寸相关的有效导热系数表达式,由式(27)表示为

$$k_{\text{eff}} = \frac{k_F}{2\pi^2 Kn^2} (\sqrt{1 + 4\pi^2 Kn^2} - 1), \quad (27)$$

式中 k_F 为硅的体导热系数。从表达式中可以清楚地看出有效导热系数取决于克努森数,而克努森数反映了纳米级导热系数的尺寸效应。此外,当平均自由程远小于器件的特征长度时,有效热导率近似等于体热导率。相反,当器件的尺寸趋于零时,克努森数趋于无穷大,有效导热系数近似线性地取决于器件的尺寸。该模型的优点为在较大克努森数范围内的结果与实验结果一致^[17]。AMON 等^[18]运用 LBM 研究了纳米尺度硅薄膜中的热传输,表明硅薄膜的面外有效导热系数取决于克努森数和表面调节系数,其表达式可由式(28)表示为

$$k_{\text{eff}} = \frac{k_F}{1 + 2Kn(2 - \alpha)/\alpha}, \quad (28)$$

式中表面调节系数 α 为扩散反射的热载体分数,文章取 $\alpha=1$ 。该模型不仅反映了尺寸效应,而且还反映了热载体在硅薄膜表面的扩散和镜面散射的影响。

将文章所研方法获得的热导率结果与 ALVAREZ 等^[17]、AMON 等^[18]的结果进行比较,如图 3 所示,在 0~150 nm 厚度范围内,文章方法所获得的热导率与两者的结果较为吻合,尤其与 ALVAREZ 等^[17]的结果吻合度较高,而与 AMON 等^[18]的结果误差最大值 $\leq 20 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$ 。

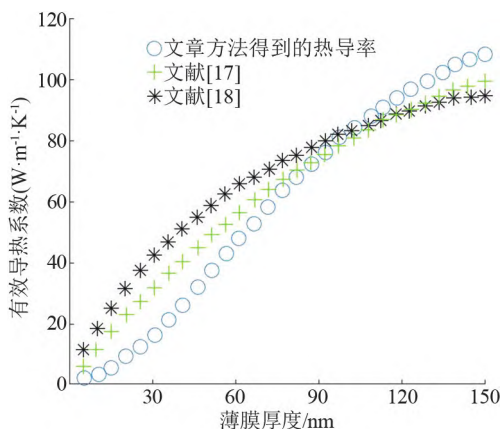


图3 不同方法获得的有效导热系数对比图

3 结果与分析

3.1 超快激光加热硅薄膜厚度方向传热问题

采用绝热边界条件,涉及到的参数见表 1。

表 1 硅薄膜与超快激光基本参数表

参数名称	数值
硅薄膜的定容比热容 $C_v/(\text{J} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{K}^{-1})$	1.66×10^6
初始温度 T_0/K	300
硅薄膜中声子的平均自由程 l/nm	41
硅薄膜中声子的弛豫时间 τ/ps	6.5
激光的脉冲持续时间 t_p/ps	0.65
激光能量密度 $J/(\text{J} \cdot \text{m}^{-2})$	312
激光穿透深度 δ/nm	15.3
表面反射率 R	0.93

为了方便与一维结果进行对比,将被激光照射后薄膜的温度分布转换为无量纲能量密度分布,结果如图 4 所示,其中图 4(a)~(c)为激光开始照射后不同时间的薄膜被加热中心位置的厚度方向的无量纲能量密度分布图。超快激光在无量纲时间 $t^*=0$ 时照射薄膜一侧的中心位置,此时被加热区域的无量纲能量密度开始快速上升并且向薄膜内部传递。在激光持续加热阶段,被加热面的无量纲能量密度快速升高,而激光对薄膜内部的影响随着厚度方向的深入逐渐减弱。这是由于超快激光在很短的时间内将大量的能量传递到薄膜,使得薄膜靠近被加热面区域的能量密度急剧升高,此时能量在薄膜内部传递的速度远远小于激光传递给薄膜能量的速度。

$Kn=0.5$ 时无量纲能量密度的分布图如图 4(a)所示,此时薄膜的厚度为 82 nm,固定薄膜的纵向长度为薄膜厚度的 10 倍。当无量纲时间 t^* 为 0.04、0.10 时,二维 LBM 与一维 LBM 模拟的结果基本吻合,薄膜左侧被加热面附近区域的能量密度明显高于其他区域,且薄膜靠近右侧位置的无量纲能量密度为 0,说明此时激光加热还未影响到薄膜右侧位置。在这两个时间点时激光还处在加热薄膜阶段,被加热位置的能量密度快速上升,此时由于时间较短,激光主要作用在薄膜厚度方向,而在纵向上的能量传递较小。激光对薄膜的穿透深度有限,加热主要作用在被穿透区域,所以在时间较短时激光对薄膜右侧不会有明显的影响。当 t^* 为 0.60 和 1.20 时,可以看到能量在薄膜内部是以波的形式传递,且随着能量的传递无量纲能量密度的峰值是逐渐减小的。此时的一维与二维模拟的结果虽然在相同时刻

时在薄膜内部传递的规律及波峰出现的位置是基本相同的,但是二维 LBM 模拟的无量纲密度的数值已经明显小于一维 LBM 模拟的结果。当激光开始照射薄膜后引起薄膜左侧的能量急剧升高并开始沿厚度方向和纵向传递,相对于能量的升高速度,能量的传递会有有一定的迟滞,这一点是被傅里叶模型忽略的,所以能量在傅里叶模型下都是以扩散形式传递的。由于模拟采用的是绝热边界条件,所以当激光照射结束后,能量在薄膜内部的传递是守恒的。一维 LBM 忽略了能量在薄膜纵向上的传递,能量仅在横向传递,随着时间增加,二维 LBM 会有越来越多的能量传递到纵向,直到整个薄膜达到平衡。

$Kn=1.0$ 和 2.0 时无量纲能量密度的分布分别如图 4(b) 和(c) 所示,此时的薄膜厚度分别为 41.0 、

20.5 nm 。随着薄膜厚度的减小,激光对薄膜厚度方向上的影响也越来越大,薄膜内部能量传递的波动性减弱,能量密度达到稳定所需的时间也越来越少。对比图 4(a) ~ (c) 发现薄膜最后达到稳定时的能量密度随着克努森数的增大而逐渐增大。为了进一步探究克努森数对薄膜内能量密度分布的影响,模拟了 $t^*=0.20$ 时不同克努森数的薄膜被加热中心位置厚度方向的无量纲能量密度分布,如图 4(d) 所示。可以看出,克努森数越大其能量密度峰值也就越大,峰值达到的无量纲位置越远。

一维 LBM 与二维 LBM 在不同克努森数情况下模拟的能量传递规律相同,二维 LBM 考虑了能量的纵向传递,导致横向传递的能量出现大幅度的减小,说明在研究薄膜中能量的传递时不能将纵向传递忽略。

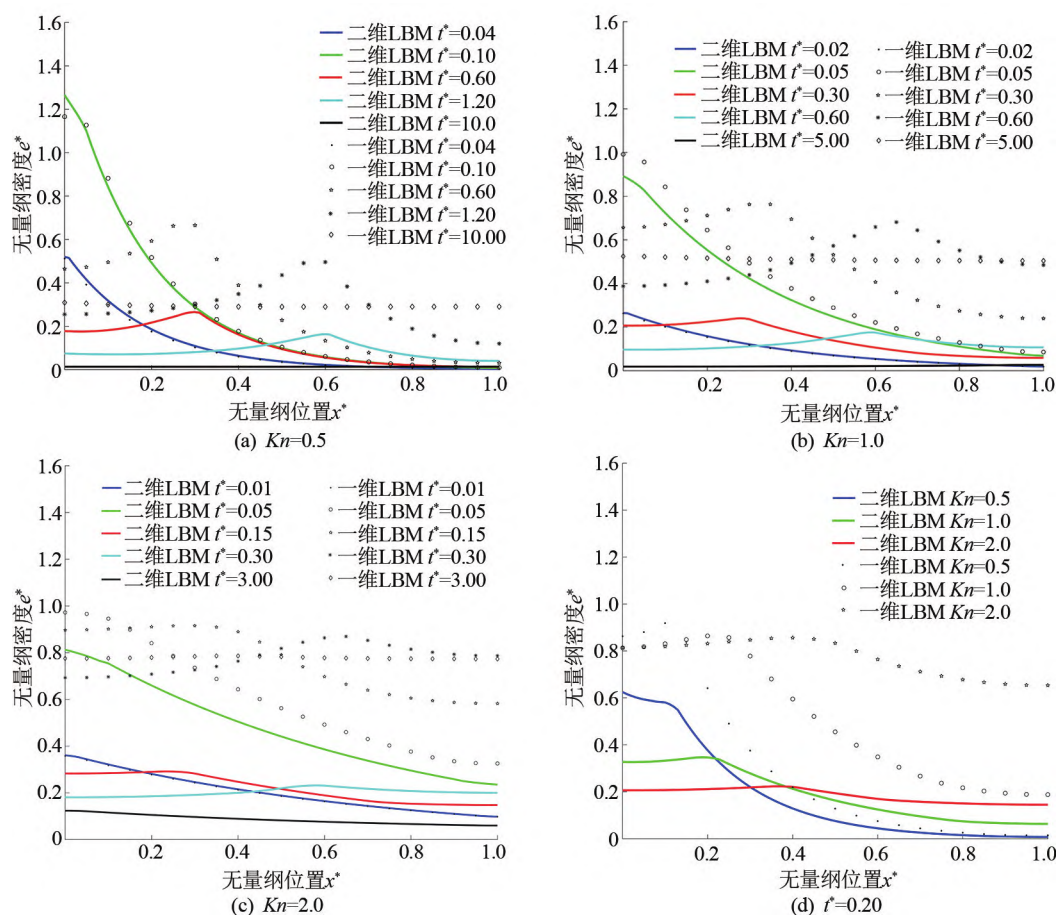


图4 硅薄膜被激光加热时厚度方向无量纲能量密度分布图

3.2 超快激光加热硅薄膜纵向传热问题

在不同 t^* 时刻,薄膜被加热面纵向能量密度分布如图 5(a) ~ (c) 所示。可以观察到,在激光加热阶段被加热的位置能量密度快速上升,而离加热位置较远的区域能量密度并没有明显变化,加热结束后能量随着时间逐渐向外传递,并展现出了与厚度

方向上类似的波动传递的现象。由于薄膜的纵向尺寸随厚度减小而减小,而激光加热半径不变,所以在图中可以观察到随着克努森数的增大,被加热区域占总区域的比例也逐渐增大。无量纲能量密度在被加热的中心位置最高,并向两侧逐渐减小。随着时间的推移能量不断向两侧传递,这一点与在厚度方

向上的传递规律类似。而相同时刻,薄膜厚度方向上的能量波动要大于纵向,在纵向上传递的能量是远小于厚度方向的,所以薄膜纵向上堆积的能量会小于厚度方向,进而造成能量波动小于厚度方向。薄膜的纵向尺寸大于厚度方向,能量密度在纵向上达到稳定需要的时间要长于厚度方向。

为了研究在某一时刻薄膜内部纵向的能量密度

分布,模拟了当 $Kn=1.0$ 、 $t^*=0.10$ 时薄膜内部纵向的能量密度分布,结果如图 5(d) 所示。可以看出,薄膜在这一时刻,纵向上的能量密度随薄膜厚度的深入而减小,影响范围也逐渐变小,这是因为激光对薄膜的穿透深度会沿照射中心位置向两侧逐渐变浅,携带的能量也逐渐变小。由此可见薄膜内部纵向与厚度方向上的能量传递是会相互影响的。

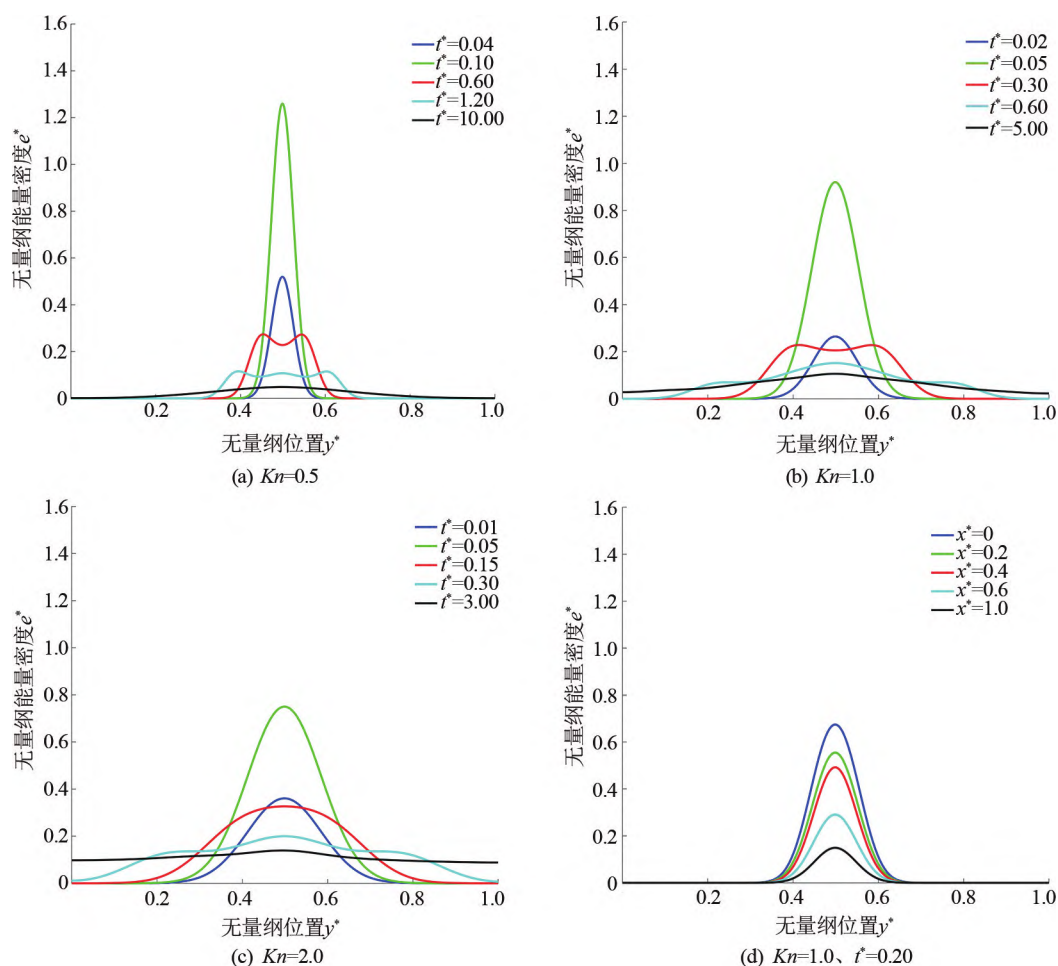


图5 硅薄膜被激光加热时纵向无量纲能量密度分布图

4 结论

基于玻尔兹曼输运方程,采用 D2Q9 的二维 LBM 模型模拟了超快激光加热硅薄膜的能量传递,主要结论如下:

(1) 薄膜被激光照射后,靠近加热位置的区域能量密度快速升高,随着时间的推移,影响的区域逐渐增大。在薄膜被加热区域附近,激光照射为能量来源,而薄膜内部的能量来源主要来自热传导。

(2) 能量在薄膜内部以波的形式传播,在厚度方向和纵向上的传递都展现出了明显的波动性,导致能量的峰值出现在了薄膜的内部,其位置会随着

时间而发生改变。

(3) 虽然当激光做热源时在厚度方向上携带的能量要多于纵向,但厚度方向与纵向上的能量在薄膜内部传递时会相互影响、相互传递,会与一维的模拟结果有较大差距,所以在研究薄膜传热问题时应同时考虑厚度方向和纵向上的传递,不能简单近似为一维传热问题。

参考文献:

- [1] 刘浩东,戴京涛. 激光焊接技术的应用研究进展与分析[J]. 电焊机,2022,52(1):95-102.
- [2] 肖荣诗,张寰臻,黄婷. 飞秒激光加工最新研究进展[J]. 机械工程学报,2016,52(17):176-186.

- [3] 邹贵生,林路禅,肖宇,等.超快激光纳米连接及其在微纳器件制造中的应用[J].中国激光,2021,48(15):128-145.
- [4] 郑春生,刘德杰,曾磊.多晶硅薄膜制备工艺与应用发展的现代研究[J].科学与信息化,2018(1):113,116.
- [5] 刘米丰,任卫朋,赵越,等.一种集成无源电容式高硅铝合金基微波功率芯片载体技术[J].电子元件与材料,2021,40(11):1112-1117.
- [6] 孙浩杰,庄松林.用于光伏电池的微结构光增强薄膜[J].应用激光,2021,41(4):849-852.
- [7] 官敏,于涛,常郑,等.太阳能光伏产业智能化开发及应用[J].硅酸盐通报,2021,40(3):693-703.
- [8] 余隽,唐祯安,魏广芬.微电子机械系统中微尺度热物性研究进展[J].机械强度,2001,23(4):465-470.
- [9] 徐红玉,张元冲,宋亚勤,等.脉冲激光加热薄膜微尺度热传递研究进展[J].物理学进展,2004,24(2):152-162.
- [10] ESCOBAR R A, CHAI S S, JHON M S, et al. Multi-length and time scale thermal transport using the lattice Boltzmann method with application to electronics cooling[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2006, 49(1/2): 97-107.
- [11] 毛煜东,吕慧丽,孙浩森,等.超快激光加热薄膜的格子玻尔兹曼模拟[J].山东建筑大学学报,2019,34(6):16-20.
- [12] KLEMENS P G. Thermal conductivity and lattice vibrational modes [J]. Solid State Physics, 1958, 7:1-98.
- [13] GUO Y Y, WANG M R. Lattice Boltzmann modeling of phonon transport[J]. Journal of Computational Physics. 2016,315:1-15.
- [14] 毛煜东.微纳尺度传热问题的理论分析和格子 Boltzmann 数值模拟[D].济南:山东大学,2015.
- [15] MCNAMARA G R, ZANETTI G. Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata[J]. Physical Review Letters, 1988, 61(20): 2332-2335.
- [16] ESCOBAR R. Lattice Boltzmann modeling of phonon transport in silicon films[D]. Pittsburgh: Carnegie Mellon University, 2005.
- [17] ALVAREZ F X, JOU D. Memory and nonlocal effects in heat transport: From diffusive to ballistic regimes[J]. Applied Physics Letters, 2007, 90(8): 083109.
- [18] AMON C H, GHAI S S, KIM W T, et al. Modeling of nanoscale transport phenomena: Application to information technology [J]. Physica, A. Statistical Mechanics and its Applications, 2006, 362(1): 36-41.

(学科责编:朱志鹏)

(上接第 73 页)

- [9] 刘梓标,林俊江,李和鑫,等.考虑电池产热的多孔介质复合相变材料的传热性能[J].清华大学学报(自然科学版),2022,62(6):1037-1043.
- [10] ZHAO C Y, DAI L N, TANG G H, et al. Numerical study of natural convection in porous media (metals) using Lattice Boltzmann Method (LBM)[J]. International Journal of Heat and Fluid Flow, 2010, 31(5): 925-934.
- [11] TAO Y B, YOU Y, HE Y L. Lattice Boltzmann simulation on phase change heat transfer in metal foams/paraffin composite phase change material[J]. Applied Thermal Engineering, 2016, 93: 476-485.
- [12] ABISHEK S, KING A J C, NADIM N, et al. Effect of microstructure on melting in metal-foam/paraffin composite phase change materials[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2018, 127: 135-144.
- [13] WANG G, WEI G S, XU C, et al. Numerical simulation of effective thermal conductivity and pore-scale melting process of PCMs in foam metals[J]. Applied Thermal Engineering, 2019, 147: 464-472.
- [14] HUANG X P, SUN C, CHEN Z Q, et al. Experimental and numerical studies on melting process of phase change materials (PCMs) embedded in open-cells metal foams [J]. International Journal of Thermal Sciences, 2021, 170: 107151.
- [15] 李健,郑雯瀚,洪芳军.三维多孔吸液芯毛细特性孔隙尺度格子 Boltzmann 模拟[J].工程热物理学报,2022,43(3):758-762.
- [16] CHEN B M, SONG L Q, GAO K K, et al. Two zone model for mushy region of solid-liquid phase change based on Lattice Boltzmann method[J]. International Communications in Heat and Mass Transfer, 2018, 98: 1-12.
- [17] JANY P, BEJAN A. Scaling theory of melting with natural convection in an enclosure[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 1988, 31(6): 1221-1235.
- [18] HOUSE J M, BECKERMAN C, SMITH T F. Effect of a centered conducting body on natural convection heat transfer in an enclosure [J]. Numerical Heat Transfer, Part A: Applications, 1990, 18(2): 213-225.
- [19] YOON H S, JUNG J H, LEE H S, et al. Effect of thermal boundary condition of an inner cube on three-dimensional natural convection in a cubical [J]. Journal of Mechanical Science and Technology, 2015, 29(10): 4527-4543.
- [20] 朱孟帅,王子龙,孙向昕,等.高孔密度下泡沫铜的填充率对石蜡融化传热机理的影响[J].化工进展,2022,41(6):3203-3211.

(学科责编:朱志鹏)