

# LBM 晶格结构对纳米薄膜超快传热过程影响

毛煜东<sup>1,\*</sup>, 刘守宇<sup>1</sup>, 于明志<sup>1</sup>, 陈彬剑<sup>1</sup>, 张其龙<sup>2</sup>

(1. 山东建筑大学 热能工程学院, 山东 济南 250101; 2. 华电电力科学研究院有限公司, 浙江 杭州 310030)

**摘要:** 超快激光加热技术在微纳器件制造中发挥着重要作用, 研究超快激光作用在靶体内部的超快传热过程对器件的热设计有着重要意义。文章基于格子玻尔兹曼方法研究了纳米薄膜的超快传热过程, 围绕不同晶格结构对比分析了纳米薄膜内部的能量密度分布, 探索了薄膜内部的声子输运特性。结果表明: 纳米薄膜受到激光加热后, 在应用 D2Q9 和 D2Q5 模型得到的结果中, 薄膜内部能量均以“波状”形式传递且整体趋势相同, 但 D2Q9 模型得到的数值要略低于 D2Q5 模型; 通过对比应用 D1Q3 与 D2Q9 模型得到的结果, 发现沿薄膜厚度方向上的能量密度差异较大, 说明研究纳米薄膜内部超快传热过程时, 不能忽略沿薄膜径向传递的能量。

**关键词:** 纳米薄膜; 超快传热; 格子玻尔兹曼方法; 晶格结构

中图分类号: TK124

文献标识码: A

文章编号: 1673-7644(2024)02-0052-08

## Effect of LBM lattice structure on ultra-fast heat transfer process of nano-scale films

MAO Yudong<sup>1,\*</sup>, LIU Shouyu<sup>1</sup>, YU Mingzhi<sup>1</sup>, CHEN Binjian<sup>1</sup>, ZHANG Qilong<sup>2</sup>

(1. School of Thermal Engineering, Shandong Jianzhu University, Jinan 250101, China; 2. Huadian Electric Power Research Institute Co., Ltd., Hangzhou 310030, China)

**Abstract:** Ultra-fast laser heating technology plays an pivotal role in the fabrication of micro and nano devices. Investigating the ultrafast heat transfer processes inside the target during heating is of great significance for devices thermal design. This paper employs the lattice Boltzmann method to examine the ultrafast heat transfer processes in nano-thin films. The different lattice structures are selected to compare and analyze the energy density distribution inside the thin films and the transport characteristics of phonons in the film are explored. The results indicate that, following laser heating of the nano-film, the energy is transferred in the form of "wave-like" inside the film and the overall trend is consistent between the results obtained by D2Q9 and D2Q5 models. But the numerical values obtained by D2Q9 model is slightly lower than that of D2Q5 model. Through a comparison of results obtained D1Q3 model and D2Q9 model, it is found that the energy density along the direction of film thickness is significantly different. This emphasizes that, the energy transferred along the radial direction of the thin film cannot be disregarded in the study of the ultrafast heat transfer process inside the thin film.

**Key words:** nano thin film; ultrafast heat transfer; lattice Boltzmann method; lattice structures

收稿日期: 2022-11-03

基金项目: 山东省高等学校青创科技支持计划项目(2019KJH012); 济南市科研带头人工作室项目(2019GXRC056); 山东省自然科学基金项目(ZR2017BEE052)

作者简介: 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[\* 通信作者]

## 0 引言

近年来,随着我国经济的发展,对工业提出了更高的要求。将超快激光应用到工业生产中,对提升其质量和效率有着重要意义<sup>[1]</sup>。超快激光主要包括飞秒激光(脉冲的宽度)和皮秒激光,因其具备峰值能量密度高、加热速度快和精准性高等特点,已广泛应用于精密加工、医疗卫生等领域<sup>[2-3]</sup>。其中,半导体激光加工技术近年来得到快速发展,纳米硅薄膜的应用越来越广泛<sup>[4]</sup>。超快激光与纳米硅薄膜将在微纳米电子器件的制造中发挥重要作用<sup>[5]</sup>。借助超快激光加热纳米硅薄膜探索微纳尺度下的超快传热过程,对材料的加工、热处理等技术具有十分重要的现实意义<sup>[6]</sup>。

对于大多数热流密度不高、热作用时间较长的宏观导热问题,基于傅里叶导热定律得出的结果已经满足了实际工程问题的需要<sup>[7]</sup>。随着电子器件的特征尺寸降低到微纳米量级,需要考虑非傅里叶效应。这是由于傅里叶定律忽略了热传导过程中温度梯度和热流矢量之间的弛豫时间,暗含热以扩散的方式传播<sup>[8]</sup>。在微纳米系统中,热效应的特殊性通常表现在两个方面:在空间上,当各种热载流子(在非金属中主要是声子)的平均自由程可以与晶粒或者器件的特征尺寸相互比拟时会发生微空间尺度传热现象;在时间上,当各种热载流子的弛豫时间可以与特征能量激发时间相比拟时会发生微时间尺度热传输,如实际工程中常见的快速或者超快速的加热、冷却过程<sup>[9]</sup>。

玻尔兹曼输运方程(Boltzmann Transport Equation, BTE)可用于研究声子在宏观和微观尺度上的输运。考虑具有不同群速度和频率的声子模式会使计算结果更加准确,但计算成本也会更高。为减少计算量,基于德拜假设的灰色模型已广泛应用<sup>[10]</sup>。此外,声子输运还通过其他数值方法开展研究,如分子动力学和蒙特卡罗模拟等<sup>[11-12]</sup>。格子玻尔兹曼方法(Lattice Boltzmann Method, LBM)是BTE常用的数值解法之一,在连续体水平和微观尺度的研究中得到了推广<sup>[13]</sup>。基于LBM而来的格子BGK模型(Lattice Bhatnagar-Gross-Krook, LBGK)简化了BTE中的碰撞算子项<sup>[14]</sup>,成为LBM中的主要研究模型。LBM最初应用在模拟复杂物理条件下的单相和多相流体流动,是一种通过预测虚拟流体颗粒分布的流体流动建模技术<sup>[15]</sup>。近年来,LBM已广泛

应用于电子和声子输运的模拟以及微纳尺度导热的研究中。Jiaung等<sup>[16]</sup>在2004年建立了模拟声子动力学的一种格子Boltzmann计算格式,并在2008年进行了改进<sup>[17]</sup>;Escobar等<sup>[18]</sup>应用LBM研究了一维半导体材料中的瞬态多空间尺度和时间尺度的导热过程,与基于扩散-弹道输运方程、傅里叶导热方程和CV模型的结果做了对比,并简要总结了主要导热模型的使用范围。此后,不同类型的晶格结构(通常用 $DnQm$ 来表示,其中 $n$ 为空间维数; $m$ 为晶格方向数)逐渐应用到传热传质研究中,如应用一维晶格D1Q2、D1Q3解决瞬态传导和辐射传热问题<sup>[19]</sup>,而二维晶格D2Q5和D2Q9则应用在纳米级传热模拟<sup>[20-21]</sup>。Kan等<sup>[22]</sup>采用三维LBM的D3Q15模型预测了纳米颗粒多孔材料的有效导热系数。尽管LBM已成功应用于计算流体力学、传热传质等过程,但在研究能量传输时,采用不同的晶格结构对结果的影响也不容忽视<sup>[23]</sup>。文章基于LBM方法模拟了以超快激光为热源的纳米硅薄膜超快传热过程,并分析了不同晶格结构对传热过程的影响。

## 1 理论分析

### 1.1 晶格模型

LBM可分为碰撞和传播两个过程。在晶格方向的引导下,声子以恒定的群速度从一个节点弹射到连续节点,再与连续晶格上产生的其他声子碰撞,并继续向相邻晶格传播。声子在所有节点上遵循类似的重复事件,直到能量达到平衡。3种晶格模型如图1所示。在LBM中,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。在D2Q5模型中,每个节点有4个相邻点,所以有4个与之相关的离散传播方向;而D2Q9模型的每个节点有8个相邻点,这意味着D2Q9模型有着更多的传播途径。

对于D1Q3模型, $\omega_0 = 1/2$ 、 $\omega_{1,2} = 1/4$ ,参数 $c_i$ 取值由式(1)表示为

$$c_i = \begin{bmatrix} 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (1)$$

对于D2Q5模型, $\omega_0 = 1/3$ 、 $\omega_{1,2,3,4} = 1/6$ ,参数 $c_i$ 取值由式(2)表示为

$$c_i = \begin{bmatrix} 0 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \end{bmatrix}, \quad (2)$$

对于D2Q9模型, $\omega_0 = 4/9$ 、 $\omega_{1,2,3,4} = 1/9$ 、 $\omega_{5,6,7,8} = 1/36$ ,参数 $c_i$ 取值由式(3)表示为

$$c_i = \begin{bmatrix} 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \end{bmatrix}, \quad (3)$$

式中  $\omega_i$  为权重系数;  $c_i$  为离散速度;  $i$  为离散速度集的索引。

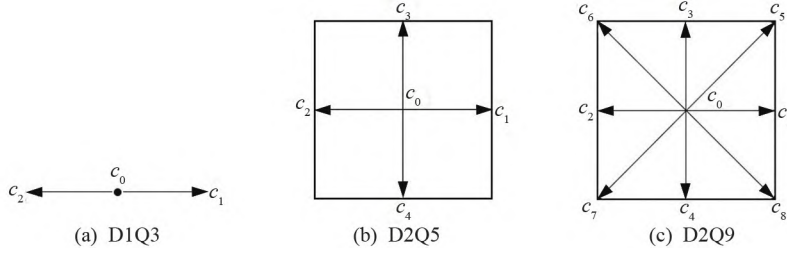


图1 晶格模型示意图

## 1.2 物理模型

超快激光辐照到纳米硅薄膜表面的物理模型如图2所示。激光从薄膜径向向中心位置垂直照射纳米硅薄膜,其厚度尺寸为  $L$ 。由于薄膜内部能量传播主要集中在厚度方向,当径向能量的传播距离达不到径向边界时,扩大其边界并不会对结果产生影响,为便于后续的模拟分析,选取径向尺寸  $M$  与厚度尺寸恒成比例,其为  $L$  的 10 倍,并设定纳米薄膜与外界的联系面为绝热边界。

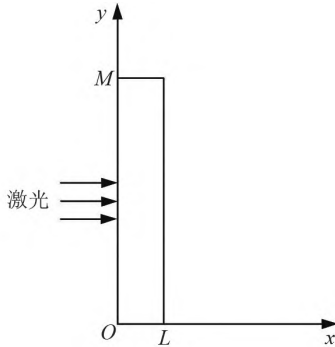


图2 超快激光辐照纳米硅薄膜物理模型图

## 1.3 数学模型

LBGK 模型的表达式由式(4)表示为

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla f = \frac{f^{eq} - f}{\tau}, \quad (4)$$

式中  $f$  为热载子的分布函数;  $t$  为时间;  $v$  为热载子的群速度;  $\tau$  为弛豫时间(粒子发生两次碰撞的时间间隔);  $f^{eq}$  为平衡分布函数。

忽略温度对色散关系和声子态密度的影响,采用德拜假设的灰色模型,可得到以声子能量密度表示的 BTE,由式(5)表示为

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + v \cdot \nabla \theta = \frac{\theta^0 - \theta}{\tau}, \quad (5)$$

式中  $\theta$  为能量密度;  $\theta^0$  为平衡能量密度。

文章仅给出较为复杂的 D2Q9 数学模型推导过程, D1Q3 和 D2Q5 模型推导过程类似,不再赘述。D2Q9 中有 9 个离散速度( $i=0,1,2,\dots,8$ ),控制方程可由式(6)表示为

$$\frac{\partial \theta_i}{\partial t} + v_i \left( \frac{\partial \theta_i}{\partial x} + \frac{\partial \theta_i}{\partial y} \right) = - \frac{\theta_i - \theta_i^0}{\tau}, \quad (6)$$

式中  $x$  和  $y$  为位置参数。为方便计算进行下列无量纲变换,由式(7)~(10)表示为

$$x^* = x/L, y^* = y/L, t^* = t/\tau, \quad (7)$$

$$\varphi_1 = \theta(T_0) = C_v T_0, \quad (8)$$

$$\theta_i^*(x^*, y^*, t^*) = \frac{\theta_i(x, y, t) - \omega_i \varphi_1}{\varphi_1}, \quad (9)$$

$$\theta^* = \theta_0^* + \theta_1^* + \theta_2^* + \theta_3^* + \theta_4^* + \theta_5^* + \theta_6^* + \theta_7^* + \theta_8^* = \frac{\theta(x, y, t) - \varphi_1}{\varphi_1}, \quad (10)$$

式中  $x^*$ 、 $y^*$  为无量纲位置参数;  $t^*$  为无量纲时间参数;  $\varphi_1$  为初始温度下的能量;  $T_0$  为初始温度;  $C_v$  为硅的体积热容;  $\theta^*$  为总无量纲能量密度参数;  $\theta_i^*$  代表沿不同方向无量纲能量密度参数。

基于 LBM,建立超快激光加热纳米薄膜问题的导热模型由式(11)和(12)表示为

$$\frac{\partial \theta_i}{\partial t} + v_i \left( \frac{\partial \theta_i}{\partial x} + \frac{\partial \theta_i}{\partial y} \right) = - \frac{\theta_i - \theta_i^0}{\tau} + Q(x, y, t), \quad (11)$$

$$Q(x, y, t) = 0.94J \frac{1-R}{t_p \cdot \delta} \exp\left(-\frac{x}{\delta} - \frac{y^2}{r_0^2} - 1.992 \frac{t}{t_p}\right), \quad (12)$$

式中  $Q(x, y, t)$  为激光能量的吸收率;  $J$  为激光能量发射密度;  $R$  为表面反射率;  $t_p$  为激光脉冲的持续时间;  $\delta$  为激光穿透深度;  $r_0$  为激光热源影响半径。

将式(7)~(10)带入式(11)中得到无量纲化后的控制方程,由式(13)~(21)表示为

$$\frac{\partial \theta_0^*}{\partial t^*} = \frac{4(\theta_1^* + \theta_2^* + \theta_3^* + \theta_4^* + \theta_5^* + \theta_6^* + \theta_7^* + \theta_8^*) - 5\theta_0^*}{9} + \frac{4Q_0\gamma}{9\varphi_1} \exp(-x^*\xi - y^{*2}\psi^2 - 1.992t^*\gamma), \quad (13)$$

$$\frac{\partial \theta_1^*}{\partial t^*} + Kn \frac{\partial \theta_1^*}{\partial x^*} = \frac{\theta_0^* + \theta_2^* + \theta_3^* + \theta_4^* + \theta_5^* + \theta_6^* + \theta_7^* + \theta_8^* - 8\theta_1^*}{9} + \frac{Q_0\gamma}{9\varphi_1} \exp(-x^*\xi - y^{*2}\psi^2 - 1.992t^*\gamma), \quad (14)$$

$$\frac{\partial \theta_2^*}{\partial t^*} - Kn \frac{\partial \theta_2^*}{\partial x^*} = \frac{\theta_0^* + \theta_1^* + \theta_3^* + \theta_4^* + \theta_5^* + \theta_6^* + \theta_7^* + \theta_8^* - 8\theta_2^*}{9} + \frac{Q_0\gamma}{9\varphi_1} \exp(-x^*\xi - y^{*2}\psi^2 - 1.992t^*\gamma), \quad (15)$$

$$\frac{\partial \theta_3^*}{\partial t^*} + Kn \frac{\partial \theta_3^*}{\partial y^*} = \frac{\theta_0^* + \theta_1^* + \theta_2^* + \theta_4^* + \theta_5^* + \theta_6^* + \theta_7^* + \theta_8^* - 8\theta_3^*}{9} + \frac{Q_0\gamma}{9\varphi_1} \exp(-x^*\xi - y^{*2}\psi^2 - 1.992t^*\gamma), \quad (16)$$

$$\frac{\partial \theta_4^*}{\partial t^*} - Kn \frac{\partial \theta_4^*}{\partial y^*} = \frac{\theta_0^* + \theta_1^* + \theta_2^* + \theta_3^* + \theta_5^* + \theta_6^* + \theta_7^* + \theta_8^* - 8\theta_4^*}{9} + \frac{Q_0\gamma}{9\varphi_1} \exp(-x^*\xi - y^{*2}\psi^2 - 1.992t^*\gamma), \quad (17)$$

$$\frac{\partial \theta_5^*}{\partial t^*} + Kn \left( \frac{\partial \theta_5^*}{\partial x^*} + \frac{\partial \theta_5^*}{\partial y^*} \right) = \frac{\theta_0^* + \theta_1^* + \theta_2^* + \theta_3^* + \theta_4^* + \theta_6^* + \theta_7^* + \theta_8^* - 35\theta_5^*}{36} + \frac{Q_0\gamma}{36\varphi_1} \exp(-x^*\xi - y^{*2}\psi^2 - 1.992t^*\gamma), \quad (18)$$

$$\frac{\partial \theta_6^*}{\partial t^*} - Kn \left( \frac{\partial \theta_6^*}{\partial x^*} + \frac{\partial \theta_6^*}{\partial y^*} \right) = \frac{\theta_0^* + \theta_1^* + \theta_2^* + \theta_3^* + \theta_4^* + \theta_5^* + \theta_7^* + \theta_8^* - 35\theta_6^*}{36} + \frac{Q_0\gamma}{36\varphi_1} \exp(-x^*\xi - y^{*2}\psi^2 - 1.992t^*\gamma), \quad (19)$$

$$\frac{\partial \theta_7^*}{\partial t^*} + Kn \left( \frac{\partial \theta_7^*}{\partial x^*} + \frac{\partial \theta_7^*}{\partial y^*} \right) = \frac{\theta_0^* + \theta_1^* + \theta_2^* + \theta_3^* + \theta_4^* + \theta_5^* + \theta_6^* + \theta_8^* - 35\theta_7^*}{36} + \frac{Q_0\gamma}{36\varphi_1} \exp(-x^*\xi - y^{*2}\psi^2 - 1.992t^*\gamma), \quad (20)$$

$$\frac{\partial \theta_8^*}{\partial t^*} - Kn \left( \frac{\partial \theta_8^*}{\partial x^*} + \frac{\partial \theta_8^*}{\partial y^*} \right) = \frac{\theta_0^* + \theta_1^* + \theta_2^* + \theta_3^* + \theta_4^* + \theta_5^* + \theta_6^* + \theta_7^* - 35\theta_8^*}{36} + \frac{Q_0\gamma}{36\varphi_1} \exp(-x^*\xi - y^{*2}\psi^2 - 1.992t^*\gamma), \quad (21)$$

式中克努森数  $Kn = l/L$ , 其中  $l$  为声子平均自由程;

$\xi = L/\delta$ 、 $\psi = L/r_0$ 、 $\gamma = \tau/t_p$ 、 $Q_0 = 0.94J(1-R)/\delta$ ; 这些均为中间参数, 无特殊含义。

将无量纲后的控制方程进行离散化并忽略高阶项后即可进行数值模拟。

## 2 数值模拟结果分析

纳米硅薄膜和超快激光的物理参数见表1。特征尺寸  $L$  随着克努森数  $Kn$  的变化而变化。选用的



不同 LBM 模型中除晶格结构外以下参数均相同。

表 1 硅薄膜和超快激光参数表

参数	数值
体积热容 $C_v / (\text{J} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{K}^{-1})$	$2.3 \times 10^6$
声子平均自由程 $l / \text{nm}$	41
声子弛豫时间 $\tau / \text{ps}$	6.5
脉冲持续时间 $t_p / \text{ps}$	0.65
激光通量 $J / (\text{J} \cdot \text{m}^{-2})$	732
光学穿透深度 $\delta / \text{nm}$	15.3
表面反射率 $R$	0.93

## 2.1 应用 D2Q5 与 D2Q9 模型沿薄膜厚度方向模拟结果

采用 D2Q5 和 D2Q9 模型模拟了激光加热纳米硅薄膜沿厚度方向的超快传热过程。两种模型在不同无量纲  $t^*$  时刻下薄膜被加热面中心位置沿厚度方向无量纲能量密度分布分别如图 3(a) ~ (c) 所示,  $Kn$  分别为 0.5、1.0 和 2.0, 所对应薄膜厚度分别为 82.0、41.0 和 20.5 nm。在图 3(a) 中, 超快激光在薄膜左侧中心位置辐照, 薄膜左侧的能量密度在超短时间内快速上升。当  $t^* = 0.1$  时激光脉冲结束, 薄膜左边界能量密度达到最大值, 此时两种模型模拟结果由于传热过程进行较短并无明显差异。随着无量纲时间的增加, 薄膜内能量以“波状”形式逐渐向薄膜右侧传递, 意味着薄膜内声子以有限速度传播。即当晶格内能量堆积到下一个节点的值高于上一个节点时, 薄膜内部就会体现出能量的“凸起”现象, 这是傅里叶模型无法捕捉到的。另外, 随着无量纲时间的增加, 两种模型的差异呈现先增大后减小的趋势; 由于两种模型中声子传播速度相同, 所以出现波峰的无量纲位置始终相同。值得注意的是 D2Q9 模型的数值小于 D2Q5 模型的, 这是由于在声子散射机制中, 根据散射前后声子动量是否守恒, 可以分为 Normal 过程(N 过程)和 Umklapp 过程(U 过程)。在高温时, 能量大的声子数量较多且多发生 U 过程, 而 U 过程可以改变声子动量的方向, 是产生热阻的主要因素。低温时, 高温声子数较少而多发生 N 过程, 在 N 过程中声子的动量不会发生变化, 只改变声子的动量分布。因此, 在无量纲能量密度较大时, U 过程的发生导致声子-声子碰撞产生较大的热阻。D2Q9 晶格因其更多的传播方向导致声子-声子散射有更多的碰撞途径, 从而产生比 D2Q5 晶格更大的热阻, 因此使用 D2Q9 得到的能量密度

会低于 D2Q5 模型。声子实际碰撞后会朝向四面八方传播, 所以采用的 D2Q9 模型相比于 D2Q5 模型更具合理性。随着能量向薄膜内部的传播, 高温声子数减少, N 过程逐渐替代 U 过程。此时产生热阻的主要因素是声子与晶体中的缺陷(杂质、位错)散射, 因此 D2Q9 模型多出的 4 个传播方向不会再由声子-声子散射产生更大的热阻, 从而越来越趋近于 D2Q5 模型。在无量纲时间达到  $t^* = 10$  时, 由于绝热边界条件, 薄膜厚度方向的能量密度分布已接近平衡, 但 D2Q9 模型与 D2Q5 模型的无量纲密度差值仅为 0.003, 这是由于较小的  $Kn$  所导致。

随着  $Kn$  的增大, 在图 3(a) ~ (c) 中可以看出薄膜内部的能量传递已显示出新的特性。(1) 声子穿过具有更大克努森数的薄膜所需的时间更短, 在同一无量纲位置出现波峰的时间也会变短, 这是因为声子在薄膜内部传播时为恒定的传播速度  $v$  ( $v = l/\tau$ )。当声子的平均自由程不变时,  $Kn$  的变大意味着减小了薄膜厚度, 因此声子会用更短的时间穿过薄膜。(2) 能量的波动性随薄膜变薄会减弱, 这可以用薄膜的尺寸效应来解释, 即当薄膜的特征尺度小到与声子平均自由程相当时, 薄膜的导热系数会随特征尺寸的减小而降低, 远达不到体态导热系数, 导致薄膜内部能量的堆积减少。在  $Kn = 2$  时, 薄膜厚度为 20.5 nm 已小于声子平均自由程 41 nm, 所以只体现出微弱的波动性。(3) 随薄膜变薄单位长度内所含有的能量升高, 待能量密度达到稳定后, 两种模型的差异也会略有增大, 在  $Kn = 1, 2$  时, 其差值分别为 0.01、0.02。但在激光脉冲结束时间  $t^* = 0.1$  时, 发现 3 种  $Kn$  下薄膜最左侧无量纲能量密度都约为 1.16。这是因为在自然条件下, 热量总是自发的从高温物体向低温物体转移。在激光辐照薄膜时表现为薄膜被加热面接受到能量后向薄膜内部传递, 激光辐照所带来的能量要首先使薄膜内部与薄膜表面中心位置的能量相等后才会使得薄膜中心点的能量升高, 所以薄膜左侧能量密度并没有随  $Kn$  变化而发生明显变化。

为了进一步研究  $Kn$  对两种模型预测结果的影响, 给出了无量纲时间  $t^* = 0.6$  时, 3 种不同克努森数的无量纲能量密度分布, 如图 3(d) 所示。由于薄膜变薄后高温声子数量增多导致 U 过程增强, 从而使 D2Q9 模型相比于 D2Q5 模型产生更大的热阻, 所以两种模型的差异随  $Kn$  增大也逐渐增大。

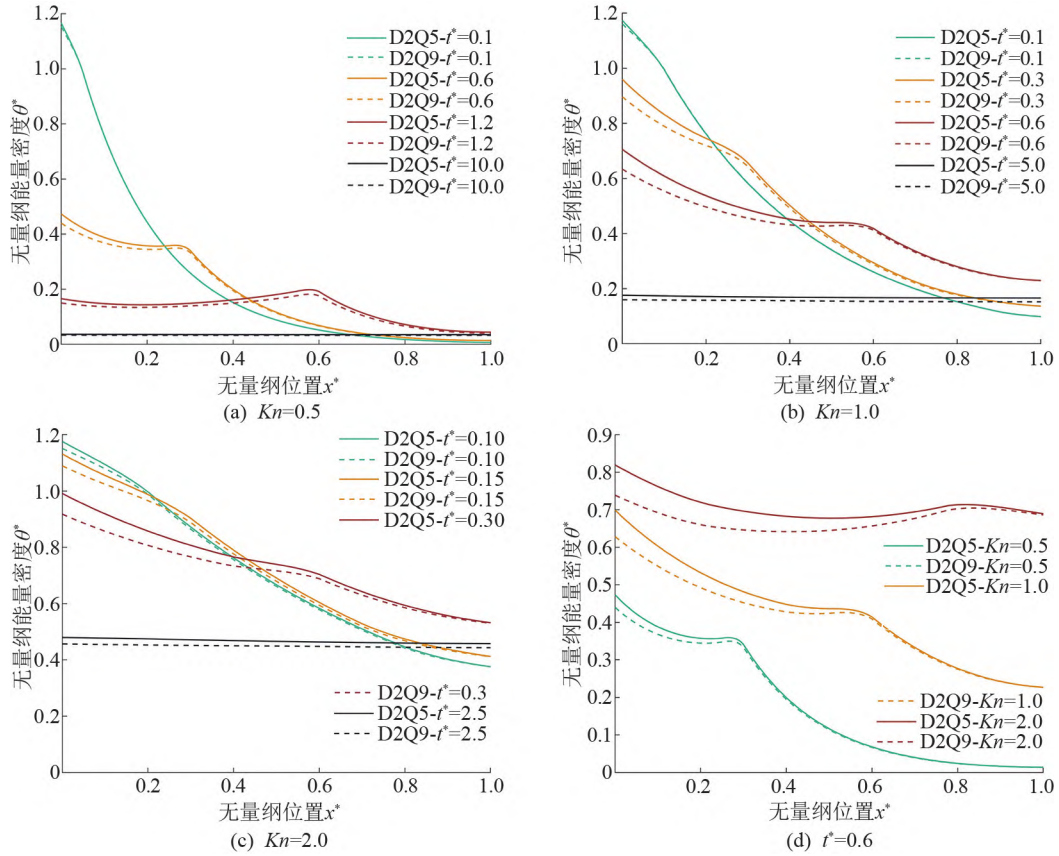
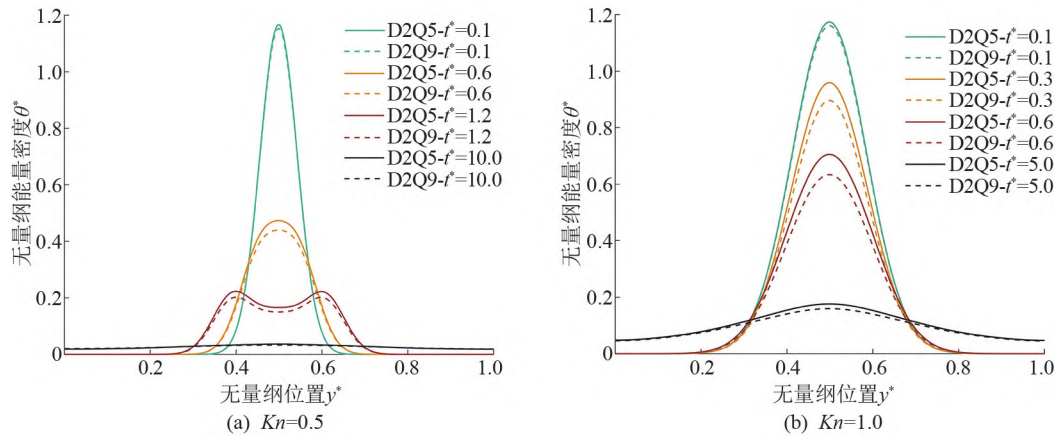


图3 D2Q5 与 D2Q9 模型得到的沿薄膜厚度方向无量纲能量密度分布图

## 2.2 应用 D2Q5 与 D2Q9 模型沿薄膜径向模拟结果

薄膜受加热面的中心点沿薄膜径向无量纲能量密度分布分别如图 4(a) ~ (c) 所示。在图 4(a) 中,随着激光打入薄膜径向方向的中心处,在  $t^* = 0.1$  时能量密度达到最大值,随后能量密度峰值下降,逐渐向薄膜两侧扩散。在  $t^* = 1.2$  时,可以观察到能量同样以“波状”形式传递,D2Q9 模型也始终低于 D2Q5 模型,这意味着声子散射在薄膜径向上与厚度方向上保持同样的规律。值得注意的是,对比图

4(a) 与图 3(a),在  $t^* = 1.2$  时厚度方向能量已影响到无量纲  $x^*$  为 1 的位置;但薄膜径向能量无法传递到薄膜两侧,仅传递到无量纲  $y^*$  值为 0.3 和 0.7 附近的位置。这是因为在超快激光的能量表达式中,在径向上传递的能量是远小于厚度方向的;其次是因为薄膜的径向尺寸大于厚度尺寸。另外,能量密度在径向上达到稳定需要的时间要长于厚度方向,在  $t^* = 10$  时,径向方向的能量也并未达到平衡。



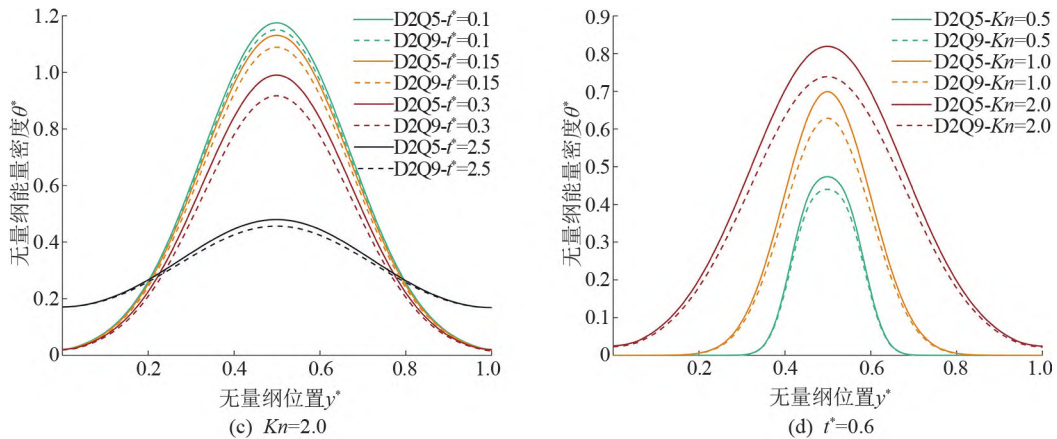


图4 D2Q5 和 D2Q9 模型得到的沿薄膜径向无量纲能量密度分布图

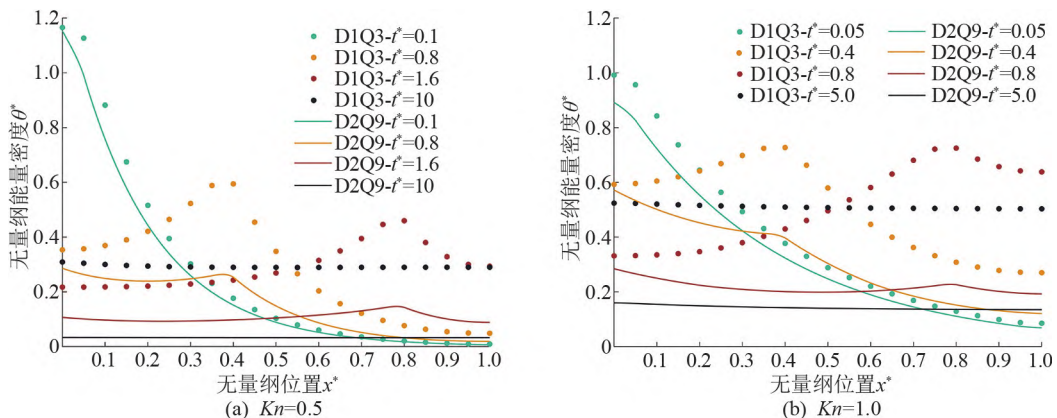
对比图 4(a)~(c),随着  $Kn$  的增大径向尺寸也相应减小,声子会在更短的时间内到达薄膜两侧,能量波动性在减弱且出现的时间也在滞后,如图 4(b)中在  $t^*=3$  时才会出现微弱的波动。这是因为在径向上传递的能量是远小于厚度方向的,其次薄膜的尺寸效应也会导致径向能量堆积的减少。需要说明的是,薄膜内部没有出现温度“凸起”现象的时刻并不意味着薄膜内能量不是以“热波”形式传递的,只是此时能量的堆积不足以使下一个节点的值高于上一个节点。 $t^*=0.6$  时,不同  $Kn$  的径向无量纲能量密度如图 4(d) 所示。可以明显看出,两种模型的差异随  $Kn$  的增大而增大,这些现象在定性分析上与厚度方向是一致的。

### 2.3 应用 D1Q3 与 D2Q9 模型模拟结果

为研究不同维度的晶格结构对传热过程的影响,选取一维 D1Q3 模型与二维 D2Q9 模型模拟结果进行对比。不同  $Kn$  时,两种模型在超快激光加热薄膜厚度方向上无量纲能量密度分布分别如图 5(a)~(c) 所示。从图 5(a) 中可以看出,在无量纲时

间  $t^*=0.1$  时,二维结果与一维结果基本一致。这是由于超快传热过程进行的时间较短,激光主要作用在薄膜厚度方向而在径向上的能量传递较少。随着传热过程进行,在 D1Q3 模型中也可以体现出能量以“波状”形式传递。但是 D1Q3 模型中的“热波”更加突出,这是由于在二维 D2Q9 模型中考虑了径向的能量传递,部分声子传递到薄膜径向方向,而在厚度方向所携带的能量减少,进而声子在波峰处所积累的能量会降低。一维模型中忽略了能量在薄膜径向上的传递而仅在厚度方向传递,随着时间的增加,二维模型中会有越来越多的能量传递到径向,导致 D2Q9 模型数值大幅低于 D1Q3 模型。

对比图 5(a)~(c),可以发现更大的  $Kn$  会导致更大的波长,到达平衡后一维与二维的差距也在增大。 $t^*=0.25$  时,不同  $Kn$  时的无量纲能量密度如图 5(d) 所示,可以明显看出在薄膜右侧两者的差距随着  $Kn$  的增大而增大。通过与一维 D1Q3 模型的对比,发现不同维度晶格结构得到的结果差异较大,说明在研究薄膜内部传热时在径向传递的能量不能忽略。





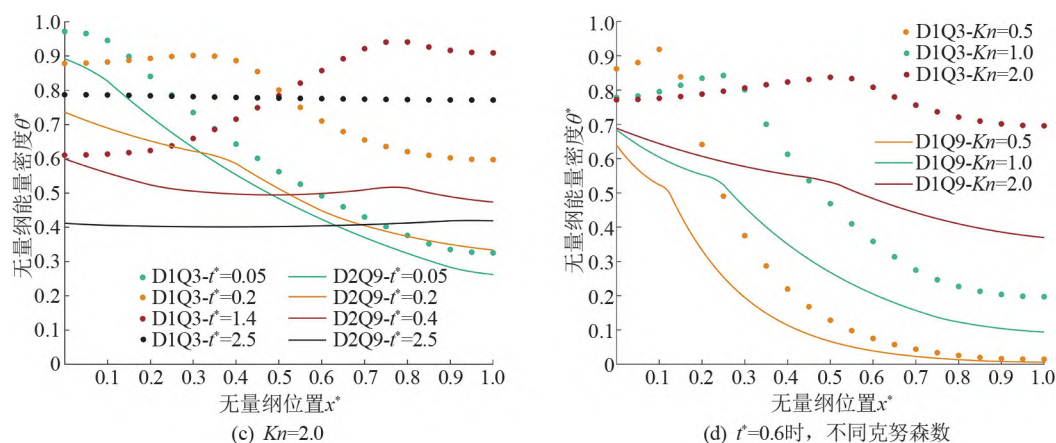


图5 D1Q3 和 D2Q9 模型得到的沿薄膜厚度方向无量纲能量密度分布图

### 3 结论

文章基于 LBM 演化而来的 LBGK 模型模拟了超快激光辐照纳米薄膜的超快传热问题,探讨了晶格结构对预测结果的影响,分析了薄膜内声子输运特性,得到主要结论如下:

(1) 应用 D1Q3、D2Q5 和 D2Q9 模型都可以显示出能量以“波状”形式在薄膜内传递,意味着声子以有限速度传播,这是傅里叶模型无法捕捉到的,验证了 LBM 方法在研究微纳米尺度传热问题中的可靠性。

(2) D2Q9 模型因其更多的传播方向得到了略低于 D2Q5 模型的模拟结果,且在模拟声子输运时 D2Q9 模型相比于 D2Q5 模型更具合理性。

(3) 随着努森数  $Kn$  的增大,薄膜的特征长度变小,其尺寸效应逐渐明显。结果会导致薄膜内能量传递的“波状”凸起现象减弱,这一现象在沿薄膜径向方向上更加明显。

(4) 在一维 D1Q3 模型中,由于忽略薄膜内径向能量传递而使模拟结果大幅高于二维 D2Q9 模拟结果,说明研究薄膜内部传热时在径向传递的能量不能被忽略,同时验证了二维模型的准确性以及客观性。

#### 参考文献:

- [1] 刘猛军. 超快激光在工业领域的应用[J]. 科学与信息化, 2022(6): 135-137.
- [2] 李远远, 颜敏. 激光微焊接技术专利技术分析[J]. 中国科技信息, 2022(14): 11-13.
- [3] 吕慧丽, 毛煜东, 孙浩森, 等. 基于改进 CV 模型模拟超快激光加热过程[J]. 山东建筑大学学报, 2020, 35(2): 33-38.

- [4] 李鹏迪. 硅半导体离子/中子辐照效应的多尺度模拟[D]. 郑州: 河南大学, 2020.
- [5] 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): 122-139.
- [6] 张明偲, 姜美玲, 冯紫薇, 等. 等离子激光纳米材料超快激光光热形变原理及应用[J]. 激光与光电子学进展, 2020, 57(11): 3-16.
- [7] 王齐悦. 基于傅里叶定理的隔热膜温度分布模型与最优厚度的计算[J]. 环球市场, 2020(5): 327, 329.
- [8] 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.
- [9] XUE T, ZHANG X B, TAMMA K. On a generalized non-local two-temperature heat transfer DAE modeling/simulation methodology for metal-nonmetal thermal inter-facial problems [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2019, 138: 508-515.
- [10] MURTHY J Y, MATHU S R. An improved computational procedure for sub-micron heat conduction [J]. Journal of Heat Transfer; Transactions of the ASME, 2003, 125(5): 904-910.
- [11] 袁世平, 姜培学. 固态金属中声子热传递的分子动力学模拟研究[J]. 工程热物理学报, 2005, 26(增刊1): 175-178.
- [12] 王赞, 赵睿杰, 陈云飞. 变截面纳米线声子输运蒙特卡洛模拟[J]. 中国科学: 技术科学, 2010, 40(3): 231-236.
- [13] TONG Z X, LI M J, XIE T, et al. Lattice boltzmann method for conduction and radiation heat transfer in composite materials[J]. Journal of Thermal Science, 2022, 31(3): 777-789.
- [14] WANG Y, SHU C, TEO C J. Development of LBGK and incompressible LBGK-based lattice Boltzmann flux solvers for simulation of incompressible flows [J]. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 2014, 75(5): 344-364.
- [15] CHEN S Y, DOOLEN G. Lattice Boltzmann method for fluid flows [J]. Annual Review of Fluid Mechanics, 1998, 30: 329-364.
- [16] JIAUNG W S, HO J R. Lattice Boltzmann study on size effect with geometrical bending on phonon heat conduction in a nanoduct[J]. Journal of Applied Physics, 2004, 95(3): 958-966.
- [17] JIAUNG W S, HO J R. Lattice-Boltzmann modeling of phonon hydrodynamics[J]. Physical Review E: Statistical, Nonlinear and Soft Matter Physics, 2008, 77(6): 601-611.

(下转第 88 页)



- vaporizer[J]. *Renewable Energy*, 2020, 149: 917–927.
- [18] GADGIL S, JOSHI N V. Climatic clusters of the Indian region[J]. *Journal of Climatology*, 1983, 3(1): 47–63.
- [19] 白鲁建. 气候区划在建筑节能中的应用与发展[J]. *建筑与文化*, 2020, 193(4): 173–175.
- [20] 白鲁建. 建筑节能设计气候区划方法研究[D]. 西安: 西安建筑科技大学, 2019: 95–97.
- [21] FOVELL R G, FOVELL M Y. Climate zones of the conterminous United States defined using cluster analysis [J]. *Journal of Climate*, 1993, 6(11): 2103–2134.
- [22] SHRADDHA K P, EMMANUEL M. Review and comparative study of clustering techniques [J]. *International Journal of Computer Science and Information Technologies*, 2014, 5(1): 805–812.
- [23] 李东和, 刘春路, 赵继龙, 等. GIS 技术在空间组织中的应用分析研究[J]. *山东建筑大学学报*, 2020, 35(6): 48–53.
- [24] 吕凯琳, 鲁俊忱, 刘衍, 等. 服务于建筑气候区划的空气温度空间化方法[J]. *建筑节能(中英文)*, 2021, 49(11): 52–60.
- [25] 刘智勇, 张鑫, 方睿红. 基于 DEM 的榆林市降水空间插值方法分析[J]. *西北农林科技大学学报(自然科学版)*, 2010, 38(7): 227–234.
- [26] 李新, 程国栋, 卢玲. 空间内插方法比较[J]. *地球科学进展*, 2000, 15(3): 260–265.
- [27] LE N D, ZIDEK J V. Statistical analysis of environmental space-time processes[M]. New York: Springer, 2006.
- [28] 郑景云, 卞娟娟, 葛全胜, 等. 1981~2010 年中国气候区划[J]. *科学通报*, 2013, 58(30): 3088–3099.

(学科责编: 朱志鹏)

(上接第 59 页)

- [18] ESCOBAR R A, AMON C H. Thin film phonon heat conduction by the dispersion lattice Boltzmann method[J]. *Journal of Heat Transfer*, 2008, 130(9): 257–266.
- [19] SUN Y J, ZHANG X B. Analysis of transient conduction and radiation problems using the Lattice Boltzmann and finite volume methods[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2016, 97: 611–617.
- [20] PU Q, AALIZADEH F, AGHAMOLAEI D, et al. Lattice Boltzmann simulation of convective flow and heat transfer in a nanofluid-filled hollow cavity [J]. *International Journal of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow*, 2019, 29(9): 3075–3094.
- [21] DARZI A A R, FARHADI M, JOURABIAN M. Lattice Boltzmann simulation of heat transfer enhancement during melting by using nanoparticles [J]. *Iranian Journal of Science and Technology-Transactions of Mechanical Engineering*, 2013, 37(M1): 23–27.
- [22] KAN A K, MAO S, WANG N, et al. Simulation and experimental study on thermal conductivity of nano-granule porous material based on Lattice-Boltzmann method [J]. *Journal of Thermal Science*, 2021, 30(1): 248–256.
- [23] NABOVATI A, SELLAN D P, AMON C H. On the lattice Boltzmann method for phonon transport [J]. *Journal of Computational Physics*, 2011, 230(15): 5864–5876.

(学科责编: 朱志鹏)