

doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-6-1216-1225

УДК 53.072

Моделирование процесса стационарного термоотражения для измерения теплопроводности материалов

Анастасия Сергеевна Тукмакова^{1✉}, Пётр Сергеевич Демченко²,
Иван Леонидович Тхоржевский³, Анна Владимировна Новотельнова⁴,
Михаил Константинович Ходзицкий⁵

^{1,2,3,5} ООО «ТИДЕКС», Санкт-Петербург, 194292, Российская Федерация

^{1,2,3,4} Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация

¹ astukmakova@itmo.ru✉, <https://orcid.org/0000-0002-9123-8983>

² petr.s.demchenko@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-4948-2023>

³ iltkhorzhevskiy@itmo.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9781-0610>

⁴ novotelnova@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0073-2415>

⁵ khodzitskiy@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7261-8350>

Аннотация

Предмет исследования. Измерение теплопроводности методом стационарного термоотражения основано на эффекте нагрева исследуемого образца лазерным излучением. Мощность отраженного от образца излучения определяется с помощью дополнительного зондирующего лазера. Изменение коэффициента отражения исследуемого материала при нагреве пропорционально изменению температуры образца. Поглощенная материалом мощность излучения выступает в качестве объемного источника теплоты. Величина теплопроводности рассчитана в соответствии с законом теплопроводности Фурье. При этом установка стационарного термоотражения требует калибровки, то есть проведения измерений теплопроводности эталонных образцов. Величина калибровочного коэффициента, в свою очередь, зависит от характеристик используемых в установке лазеров. В работе предложена численная модель нагрева образца, позволяющая учитывать форму и диаметр пучка падающего излучения, распределение мощности излучения по площади пучка, коэффициент поглощения и отражения материала. Предложена методика определения коэффициентов отражения и поглощения образцов, включающая экспериментальные измерения и расчеты с учетом эффекта Фабри–Перо. **Метод.** Исследования выполнены для образцов германия, кремния, арсенида галлия и ситалла. Облучение проведено диодным одномодовым лазером в непрерывном режиме с длиной волны 980 нм. Распределение мощности падающего излучения по площади пучка аппроксимировано в соответствии с функцией Гаусса в программе OriginPro. Выполнено измерение мощности излучения, прошедшего через образцы и отраженного от них. Температура образцов при облучении определена при помощи тепловизора. Коэффициенты отражения и поглощения образцов исследуемых материалов получены по результатам измерения мощности излучения с использованием математической модели взаимодействия плоскополяризованного ТЕ электромагнитного излучения с материалом. Сравнение результатов расчета с известными данными для образцов германия, кремния и ситалла показало их соответствие. Для арсенида галлия отмечено расхождение результатов расчета с данными, полученными другими исследователями. С целью изучения образцов арсенида галлия применена модель, учитывающая эффект Фабри–Перо, а оптические свойства определены численно, путем поиска минимума модулей передаточных функций прошедшего и отраженного излучений в программе MATLAB. Модель электромагнитного нагрева исследуемых образцов реализована в программной среде COMSOL Multiphysics. **Основные результаты.** Предложена методика определения коэффициентов отражения и поглощения материалов, исследуемых методом стационарного термоотражения. Представленная модель позволяет учесть форму, ширину пучка и распределение мощности излучения, а также величину поглощенной мощности излучения для каждого образца. Различие расчетных значений температуры образца с результатами измерений не превышает 9 %. **Практическая значимость.** Модель может быть применена для измерения теплопроводности объемных и тонкопленочных материалов с малоизученными свойствами.

Ключевые слова

стационарное термоотражение, коэффициент теплопроводности, оптические методы измерения теплопроводности, моделирование электромагнитного нагрева

Благодарности

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 22-22-00597 «Исследование теплопроводности тонкопленочных термоэлектриков оптическими методами».

Ссылка для цитирования: Тукмакова А.С., Демченко П.С., Тхоржевский И.Л., Новотельнова А.В., Ходзицкий М.К. Моделирование процесса стационарного термоотражения для измерения теплопроводности материалов // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22, № 6. С. 1216–1225. doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-6-1216-1225

Simulating the process of steady-state thermorefectance for measuring the thermal conductivity of materials

Anastasiia S. Tukmakova¹✉, Petr S. Demchenko², Ivan L. Tkhorzhevskiy³, Anna V. Novotelnova⁴, Mikhail K. Khodzitskiy⁵

^{1,2,3,5} ООО Tidex, Saint Petersburg, 194292, Russian Federation

^{1,2,3,4} ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation

¹ astukmakova@itmo.ru✉, <https://orcid.org/0000-0002-9123-8983>

² petr.s.demchenko@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-4948-2023>

³ itkhorzhevskiy@itmo.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9781-0610>

⁴ novotelnova@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0073-2415>

⁵ khodzitskiy@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7261-8350>

Abstract

The measurement of thermal conductivity by the method of steady-state thermorefectance is based on the effect of heating the sample by laser radiation. The power of reflected radiation from the sample is measured using an additional probe laser. The change in the reflection coefficient of the studied material due to the heating is proportional to the change of the sample temperature. The radiation power absorbed by the material acts as a volumetric heat source. The value of thermal conductivity is calculated according to the Fourier's law of thermal conductivity. A steady-state thermorefectance setup requires calibration, i.e., thermal conductivity measurement of reference samples. The value of the calibration coefficient, in turn, depends on the characteristics of the lasers used in the setup. In this work, a numerical model of sample heating is proposed which allows considering the shape and diameter of the incident radiation beam, the distribution of radiation power over the beam area, and the absorption and reflection coefficients of the material. A methodology for samples reflection and absorption coefficients determination, including measurements and calculations considering the Fabry-Perot effect, is proposed. The study was performed for the samples of germanium, silicon, gallium arsenide, and sital. The irradiation was performed with a continuous wave single-mode diode laser with a wavelength of 980 nm. The incident radiation power distribution over the beam area was approximated according to the Gaussian function in the OriginPro software. The radiation power that passed through the samples and reflected from them was measured. The temperature of the samples during irradiation was measured with a thermal imager. The reflection and absorption coefficients of the samples were determined from the results of radiation power measurements using a mathematical model of the interaction of plane-polarized TE electromagnetic radiation with the material. Comparison of the calculation results with the literature data for germanium, silicon, and sital samples showed their correspondence. For gallium arsenide there was a discrepancy between the calculation results and the literature data. For gallium arsenide samples, a model considering the Fabry-Perot effect was used, and the optical properties were determined numerically by searching for the minimum modules of the transfer functions of the transmitted and reflected radiation in the Matlab program. The model of electromagnetic heating of the investigated samples was implemented in the COMSOL Multiphysics software. A method for the determination of the reflection and absorption coefficients of materials investigated by the steady-state thermorefectance is proposed. The proposed model allows considering beam shape, width and distribution of the radiation power as well as the value of the absorbed radiation power for each sample. The difference between the calculated values of the sample temperature and the measurement results does not exceed 9 %. The model can be applied to measure the thermal conductivity of bulk and thin-film materials with unknown properties.

Keywords

steady-state thermorefectance, thermal conductivity coefficient, optical methods for thermal conductivity measurement, electromagnetic heating modelling

Acknowledgements

This work was supported by the Russian Science Foundation grant No. 22-22-00597 “Study of thermal conductivity of thin-film thermoelectrics by optical “methods”.

For citation: Tukmakova A.S., Demchenko P.S., Tkhorzhevskiy I.L., Novotelnova A.V., Khodzitskiy M.K. Simulating the process of steady-state thermorefectance for measuring the thermal conductivity of materials. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 6, pp. 1216–1225 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-6-1216-1225

Введение

Измерение теплопроводности материалов оптическими методами имеет ряд преимуществ, таких как отсутствие контактов и контактного сопротивления, высокая скорость, возможность проводить измерение нескольких образцов одновременно, минимизация вероятности повреждения образца. Наличие всех этих преимуществ делает оптические методы наиболее подходящими для измерения теплопроводности тонких пленок — объектов с толщиной от 10 нм до 2,5 мкм, и толстых пленок — объектов с толщиной от 2 до 100 мкм [1]. Измерение теплопроводности тонких пленок — оригинальная задача, для решения которой невозможно использовать классические методы измерений, разработанные для объемных образцов. Для подобных измерений в последнее время часто применяются нестационарные оптические методы: метод лазерной вспышки [2], термоотражение в частотной [3] и временной [4] областях. Однако данные методы не позволяют непосредственно получить величину теплопроводности. Как правило, в результате измерений возможно получить зависимость температуры тела от времени воздействия. Зная данную зависимость, можно рассчитать величину температуропроводности и далее, после проведения дополнительных измерений теплоемкости и плотности материала, — коэффициент теплопроводности. Обработка результатов измерения также связана с необходимостью точного определения фазового сдвига сигнала. Все это вносит трудности в обработку результатов, увеличивает время исследования, приводит к технологической сложности установок и повышению неопределенности результатов измерений.

Метод стационарного термоотражения (СТО) (steady-state thermoreflectance [5]) — оптический метод измерения теплопроводности, который, при этом, относится к стационарным. СТО обладает главным преимуществом стационарных методов — позволяет непосредственно определить величину теплопроводности, обрабатывая результаты эксперимента при помощи закона Фурье [6]. За счет того, что метод является оптическим, удается нивелировать недостатки, характерные для классических неоптических стационарных методов: длительное время проведения измерений; использование контактов; высокую чувствительность к потерям на конвекцию и лучистый теплообмен. СТО подходит как для измерения объемных материалов, так и для толстых и тонких пленок.

При СТО нагрев осуществляется лазером, модулированным прямоугольным сигналом, что позволяет достичь стационарного режима за время порядка десятков микросекунд. При измерении образцы, как правило, покрываются тонкой металлической пленкой с известным коэффициентом отражения, который изменяется при нагреве. Это изменение отслеживается сканирующим источником. Метод СТО предложен сравнительно недавно и уже использован для исследования теплопроводности образцов диоксида кремния, оксида алюминия, образцов алмаза и кварца, и показал высокую точность измерений [5]. СТО позволяет изме-

рять как продольную, так и поперечную составляющие теплопроводности.

Относительное изменение отражения $\Delta R/R$ при СТО пропорционально относительному изменению напряжения $\Delta V/V$, измеряемому детектором мощности излучения зондирующего лазера. Величина $\Delta V/V$, в свою очередь, пропорциональна абсолютному изменению температуры ΔT исследуемого образца, так что $\Delta V/V = \beta_{TO} \cdot \Delta T$, где β_{TO} — коэффициент термоотражения материала металлического покрытия либо образца. Принимая значение β_{TO} постоянным, можно рассчитать ΔT . При помощи образца с известной теплопроводностью, зная мощность поглощенного излучения, возможно проведение калибровки установки СТО — определение калибровочного коэффициента. После проведения калибровки возможно измерить теплопроводность других образцов.

Для проведения калибровки установки СТО целесообразно применять численное моделирование. Цель данной работы — создание и верификация численной модели нагрева различных образцов материалов за счет поглощения электромагнитного излучения при СТО, позволяющей проводить оценку поля температуры в образце. Модель учитывает оптические свойства исследуемых образцов и характер излучения (форму и диаметр пучка). Верификация модели включает в себя измерение температурного поля в образцах при помощи тепловизора и сравнение результатов моделирования с экспериментом.

Метод исследования

В экспериментальной части проведены измерения диаметра пучка падающего излучения. Определена функция зависимости мощности излучения от поперечной координаты. Выполнены измерения мощности падающего, прошедшего и отраженного от образцов излучений, а также температуры образцов с использованием тепловизора.

Обработка результатов эксперимента и моделирование включали в себя: аппроксимацию экспериментальной зависимости мощности излучения от поперечной координаты при помощи функции Гаусса; расчет стандартных отклонений; расчет коэффициента отражения и поглощения исследуемых образцов при помощи обработки данных о мощности падающего, прошедшего и отраженного излучения; численное моделирование процесса электромагнитного нагрева исследуемых образцов.

Исследуемые образцы. Исследование выполнено на четырех образцах: монокристаллический германий (Ge)¹, выращенный методом Чохральского (направление роста вдоль оси C_3); монокристаллический кремний (Si)²; монокристаллический арсенид галлия

¹ [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://www.tydexoptics.com/ru/materials/for_transmission_optics/germanium/ (дата обращения: 28.09.2022).

² [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://www.tydexoptics.com/ru/materials/for_transmission_optics/silicon/ (дата обращения: 28.09.2022).

(GaAs)¹, выращенный методом Чохральского (направление роста вдоль оси C_3) и ситалл СТ-50-12. При помощи микрометра (Micron 414780, класс точности — 1, погрешность 0,5 мкм) проведены измерения толщины l_s и диаметра d_s образцов. Геометрические параметры образцов представлены в табл. 1.

Характеристики излучения. Образцы прошли облучение непрерывным лазерным излучением (тип лазера — диодный, одномодовый, максимальная мощность 2 Вт) на длине волны 980 нм. Измерение значения мощности излучения в зависимости от поперечной координаты проведено при помощи метода ножа Фуко³. В результате получены зависимости после дифференцирования по x -координате (точки на рис. 1) и аппроксимации при помощи функции нормального распределения (сплошная линия на рис. 1). Значение стандартного отклонения σ рассчитано в программе OriginPro. Производная мощности излучения P по поперечной координате имеет вид:

$$\frac{dP_{in}(x)}{dx} = (P_{in}/(\omega_{st}\sqrt{\pi/2})) \cdot e^{-2(x/\omega_{st})^2},$$

где P_{in} — интегральная величина мощности; x — поперечная координата; ω_{st} — удвоенное стандартное отклонение.

Максимальное значение функции $\frac{dP_{in}(x)}{dx} P_{max}$ составляло 30,9 мВт/мм, значение P_{in} — $49,3 \pm 2,3$ мВт, значение стандартного отклонения $\sigma = \frac{\omega_{st}}{2} = 0,64$ мм.

Ширина пучка рассчитана как расстояние между точками (пунктирная линия на рис. 1), соответствующими значению мощности, равной:

$$\frac{\max\left(\frac{dP_{in}(x)}{dx}\right)}{e^2} = 4,2 \frac{\text{мВт}}{\text{мм}}.$$

Таким образом, ширина пучка составила 2,5 мм.

Измерение мощности падающего, прошедшего через образец и отраженного от образца излучения. Измерения выполнены фотодетектором (VLP-2000, предел измерений 2 Вт, погрешность измерений 0,06 Вт (3 %)). На рис. 2, *a* изображена схема эксперимента по измерению мощности прошедшего через образец излучения при нормальном падении излучения на образец. На рис. 2, *b* показана схема измерения мощности отраженного от образца излучения при падении пучка на образец под углом $\alpha = 45^\circ$. Угол падения регулировался при помощи механического ротатора производства ком-

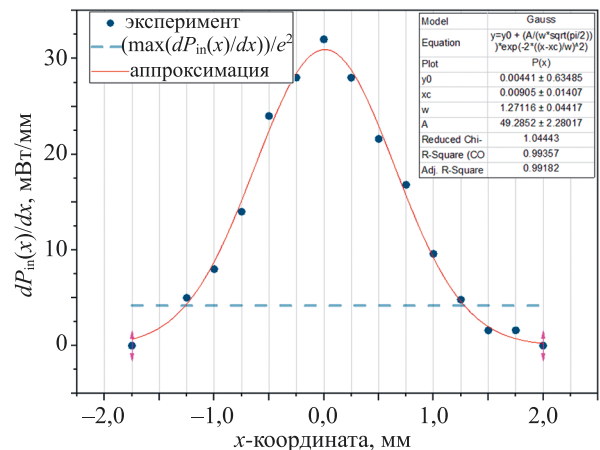


Рис. 1. Аппроксимация функции производной падающей мощности излучения по поперечной координате при помощи функции нормального распределения

Fig. 1. Approximation of the incident radiation power derivative with respect to the transverse coordinate using a normal distribution function

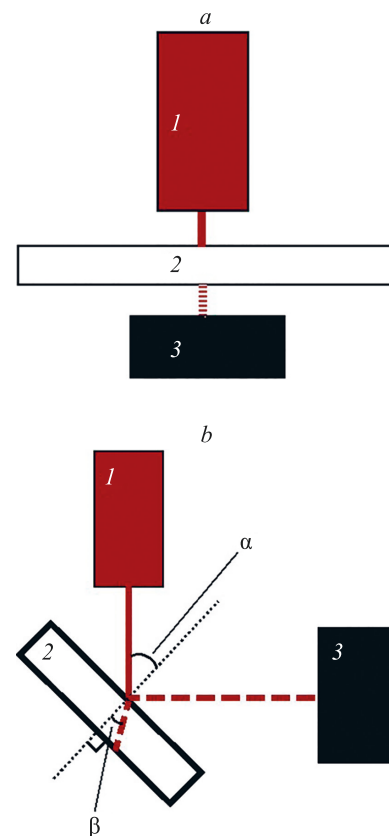


Рис. 2. Схема эксперимента. Измерение мощности прошедшего излучения нормально к плоскости образца (*a*) и отраженного излучения под углом $\alpha = 45^\circ$ (*b*).

β — угол преломления; 1 — источник излучения; 2 — образец; 3 — детектор, измеряющий мощность излучения

Fig. 2. The scheme of the experiment. Measurement of the transmitted radiation power normal to the sample plane (*a*); measurement of the reflected radiation power at an incident angle $\alpha = 45^\circ$ (*b*).

β — refraction angle, 1 — radiation source, 2 — sample, 3 — detector measuring radiation power

¹ [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://www.tydexoptics.com/ru/materials/for_transmission_optics/gaas/ (дата обращения: 28.09.2022).

² [Электронный ресурс]. Режим доступа: http://speckip.ru/product/podlozhka_sitallovaya_st_50_1_1_0_6.html (дата обращения: 28.09.2022).

³ [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://cyberleninka.ru/article/n/sovremennyy-kolichestvennyy-tenevoy-metod-s-primeneniem-sredstv-kompyuternyh-tehnologiy/viewer> (дата обращения: 28.09.2022).

Таблица 1. Геометрические параметры образцов. Результаты измерения мощности падающего, прошедшего и отраженного излучения

Table 1. Geometric parameters of the samples. The results of the measurement of incident, transmitted, and reflected radiation power

Параметр		Материал			
		Ge	Si	Ситалл СТ-50-1	GaAs
Диаметр образца d_s , мм		17,0	15,5	55,0	25,4
Толщина образца i_s , мм		0,90	0,40	0,53	1,95
Мощность излучения, мВт	падающего P_{in}	54	250	250	665
	прошедшего P_{tr}	0,01	1,60	8,40	237
	отраженного P_{refl}	18,8	81,0	26,4	274,0

пании Standa LLC. Результаты измерений представлены в табл. 1.

Обработка результатов измерения и расчет коэффициентов отражения и поглощения исследуемых образцов

Воспользуемся математической моделью для взаимодействия электромагнитного излучения с ТЕ-поляризацией с материалом [7]. Зная мощности падающего P_{in} , прошедшего P_{tr} и отраженного P_{refl} излучений выполним расчет коэффициентов пропускания T и отражения R :

$$T = \frac{P_{tr}}{P_{in}}, \quad (1)$$

$$R = \frac{P_{refl}}{P_{in}}. \quad (2)$$

Рассчитаем амплитудный коэффициент отражения ρ на границе раздела «воздух–образец»:

$$\rho = \sqrt{R}. \quad (3)$$

Используя закон Френеля:

$$\rho = \frac{\cos \alpha - n_s \cos \beta}{\cos \alpha + n_s \cos \beta}, \quad (4)$$

и выражение для угла преломления, полученного из закона Снеллиуса

$$\beta = \arcsin\left(\frac{\sin \alpha}{n_s}\right), \quad (5)$$

можно выразить показатель преломления в материале n_s через ρ

$$n_s = \frac{1 + \rho}{1 - \rho}, \quad (6)$$

где α и β — углы падения и преломления излучения; показатель преломления воздуха равен 1.

Рассчитаем коэффициент экстинкции k_s по формуле:

$$k_s = \frac{c}{\omega l_s} \left\{ \ln \left[\frac{4n_s}{(n_s + 1)^2} \right] - \ln |\hat{H}_T| \right\}, \quad (7)$$

где $|\hat{H}_T| = \sqrt{T}$ — передаточная функция; ω — угловая частота; c — скорость света.

Коэффициент поглощения α_s :

$$\alpha_s = \frac{4\pi k_s}{\lambda}, \quad (8)$$

где λ — длина волны.

Расчет оптических свойств образцов с учетом эффекта Фабри–Перо. Для образца GaAs значение показателя преломления, рассчитанное по формуле (6) составило 4,2, в то время как в работе [8] — 3,52 (табл. 2). Разница значений может быть объяснена повторным отражением излучения на границе раздела сред «образец–воздух», обусловленным низким коэффициентом поглощением арсенида галлия. Для получения более точного результата необходимо использовать модель с учетом эффекта Фабри–Перо [7], описывающую отражение и пропускание на границе раздела сред «образец–воздух». В этом случае также используются формулы (1), (2) и (4)–(6), при условии, что формула (3) заменяется более сложной моделью.

Пусть τ — комплексный амплитудный коэффициент пропускания на границе раздела «воздух–образец», τ' и ρ' — комплексные амплитудные коэффициенты пропускания и отражения на границе раздела «образец–воздух». Эти коэффициенты можно выразить через комплексный показатель преломления материала образца $\hat{n}_s$ и углы α и β :

$$\rho' = \frac{\hat{n}_s \cos \beta - \cos \alpha}{\hat{n}_s \cos \beta + \cos \alpha},$$

$$\tau = \frac{2 \cos \alpha}{\cos \alpha + \hat{n}_s \cos \beta},$$

$$\tau' = \frac{2 \hat{n}_s \cos \beta}{\hat{n}_s \cos \beta + \cos \alpha},$$

$$\hat{n}_s = n_s - jk_s.$$

Выражение для модуля передаточной функции прошедшего излучения $|\hat{H}_T|$ будет иметь вид:

$$|\hat{H}_T| = \frac{|\hat{E}_{tr}|}{|\hat{E}_{in}|} = \sqrt{T} = \left| \frac{4 \hat{n}_s}{(\hat{n}_s + 1)^2} \exp \left\{ -\frac{\omega l_s}{c} (k_s + j[n_s - 1]) \right\} \widehat{FP} \right|, \quad (9)$$

где $|\hat{E}_{tr}|$ и $|\hat{E}_{in}|$ — модули амплитуды напряженности электрического поля прошедшего и падающего излучений.

Эффект Фабри–Перо:

$$\widehat{FP} = \left\{ 1 - \rho'^2 \exp \left[-2j\hat{n}_s \frac{\omega l_\beta}{c} \right] \right\}^{-1}, \quad (10)$$

где $l_\beta = l_s / \cos \beta$ — расстояние, пройденное волной в образце.

Подставляя (10) в (9) получим:

$$|\hat{H}_T| = \left| \frac{\frac{4\hat{n}_s}{(\hat{n}_s + 1)^2} \exp \left[-\frac{\omega l_s}{c} (k_s + j[n_s - 1]) \right]}{1 - \rho'^2 \exp \left[-2j\hat{n}_s \frac{\omega l_\beta}{c} \right]} \right|.$$

Модуль передаточной функции отраженного излучения $|\hat{H}_R|$ может быть представлен в виде отношения модуля амплитуды напряженности электрического поля отраженного излучения $|\hat{E}_{\text{refl}}|$ к $|\hat{E}_{\text{in}}|$:

$$|\hat{H}_R| = \frac{|\hat{E}_{\text{refl}}|}{|\hat{E}_{\text{in}}|} = \sqrt{R}.$$

При этом выражение для $|\hat{E}_{\text{refl}}|$ будет иметь вид:

$$|\hat{E}_{\text{refl}}| = |\rho| |\hat{E}_{\text{in}}| + \tau \tau' \rho' \exp \left[-2j\hat{n}_s \frac{\omega l_\beta}{c} \right] \widehat{FP} |\hat{E}_{\text{in}}|. \quad (11)$$

Разделим левую и правую часть уравнения (11) на $|\hat{E}_{\text{in}}|$:

$$\frac{|\hat{E}_{\text{refl}}|}{|\hat{E}_{\text{in}}|} = \left| \frac{\rho |\hat{E}_{\text{in}}|}{|\hat{E}_{\text{in}}|} + \frac{\tau \tau' \rho' \exp \left[-2j\hat{n}_s \frac{\omega l_\beta}{c} \right] \widehat{FP} |\hat{E}_{\text{in}}|}{|\hat{E}_{\text{in}}|} \right|. \quad (12)$$

Упрощая и подставляя в (12) выражение (10), получим:

$$|\hat{H}_R| = \left| \rho + \frac{\tau \tau' \rho' \exp \left[-2j\hat{n}_s \frac{\omega l_\beta}{c} \right]}{1 - \rho'^2 \exp \left[-2j\hat{n}_s \frac{\omega l_\beta}{c} \right]} \right|.$$

Расчет значений коэффициентов n_s и k_s проведен путем оптимизации функций $|\hat{H}_T|$ и $|\hat{H}_R|$ в среде MATLAB при помощи поиска минимума значения функции.

Сравним значения n_s и k_s для образцов германия, кремния и ситалла с данными, полученными в работах

[8–11]. Результаты расчетов совпали с данными других исследователей (табл. 2). Коэффициент поглощения в образцах рассчитывался по формуле (8).

Численное моделирование электромагнитного нагрева образцов

Стационарная модель нагрева исследуемых образцов при взаимодействии с электромагнитным излучением создана при помощи метода конечных элементов [12] в программе COMSOL Multiphysics. Для моделирования применен модуль теплопередачи в твердом теле¹. Непосредственное моделирование электромагнитного излучения не проводилось, так как такая задача требует разбития модели на конечные элементы с размером не менее 100–200 нм (10–20 % от длины волны), что приводит к крайне низкой производительности расчета и невозможности его проведения. Вместо этого применено соответствующее тепловое граничное условие в модуле теплопередачи в твердом теле — объемный источник теплоты Q_{in} . Функция Q_{in} включала как оптические свойства материала, так и параметры пучка. Это позволило провести достоверное 3D-моделирование со средним временем расчета порядка нескольких секунд. Модель была разбита на конечные элементы в форме тетраэдров, с более мелким разбиением в центре образца.

Теплофизические свойства материалов Ge, Si, GaAs взяты из встроенной библиотеки COMSOL, свойства ситалла СТ-50-1 были взяты из [13] и представлены в табл. 3. Коэффициент теплоотдачи α_{TO} , характеризующий процесс конвективного теплообмена, рассчитан с применением теории подобия [14].

Начальная температура всех элементов считалась равной комнатной и составляла 24°C. При этом уравнение теплового баланса имеет вид

$$\rho C_p \frac{dT}{dt} + \nabla \mathbf{q} = Q_{\text{in}},$$

где ρ — плотность; C_p — удельная теплоемкость при постоянном давлении; T — абсолютная температура;

¹ Heat Transfer Module User's Guide [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://doc.comsol.com/5.4/doc/com.comsol.help.heat/HeatTransferModuleUsersGuide.pdf> (дата обращения: 28.09.2022).

Таблица 2. Оптические свойства образцов
Table 2. Optical properties of the samples

Параметр		Материал			
		Ge	Si	Ситалл СТ-50-1	GaAs
Коэффициент отражения R		0,39	0,32	0,11	0,38
Коэффициент пропускания T		0,00	0,01	0,03	0,37
Показатель преломления n_s	расчет	4,31	3,64	1,96	3,50
	данные работ [8–10]	4,38 [9]	3,58 [10]	—	3,52 [8]
Коэффициент экстинкции $k_s \cdot 10^2$	расчет	20,30	0,08	0,05	1,50
	данные работ [9, 10, 11]	23,20 [9]	0,08 [10]	—	1,55 [11]
Коэффициент поглощения $\alpha_s, \text{м}^{-1}$		$264 \cdot 10^3$	108,3	59,8	21,0

Таблица 3. Теплофизические свойства материалов и параметры теплообмена
Table 3. Thermophysical properties of the samples and the parameters of heat and mass transfer

Параметр	Материал			
	Ge	Si	Ситалл СТ-50-1	GaAs
Плотность ρ , кг/м ³	5320	2330	2460	5320
Теплоемкость C_p , Дж/(кг·К)	320	703	920	327
Коэффициент теплопроводности $\lambda_{\text{тепл}}$, Вт/(м·К)	61,0	162,0	1,2	51,8
Коэффициент теплоотдачи $\alpha_{\text{ТО}}$, Вт/(м ² ·К)	5,2	5,3	3,9	4,7

Q_{in} — объемный источник тепла; $\nabla \mathbf{q}$ — дивергенция вектора плотности теплового потока.

Рассчитаем вектор плотности теплового потока по закону Фурье:

$$\mathbf{q} = -\lambda_{\text{тепл}} \nabla T,$$

где $\lambda_{\text{тепл}}$ — коэффициент теплопроводности; ∇T — градиент температуры.

Функция Q_{in} включает в себя функцию нормального распределения по координатам x и y , позволяющую учитывать форму пучка, и затухание электромагнитного излучения в материале за счет поглощения вдоль z -координаты [15]. Принимая значения стандартных отклонений σ_x и σ_y , равными друг другу и σ , и принимая за начало координат центр образца с координатами (0,0,0), выражение будет иметь вид:

$$Q_{\text{in}}(x, y, z) = Q_0(1 - R) \frac{\alpha_s}{\pi \sigma^2} e^{-0,5 \left[\frac{x^2 + y^2}{\sigma^2} \right]} e^{-\alpha_s z}.$$

При моделировании учтем конвективный и лучистый теплообмен¹:

$$-\mathbf{nq}_{\text{конв}} = \alpha_{\text{ТО}}(T_{\text{окр}} - T),$$

¹ Heat Transfer Module User's Guide [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://doc.comsol.com/5.4/doc/com.comsol.help.heat/HeatTransferModuleUsersGuide.pdf> (дата обращения: 28.09.2022).

$$-\mathbf{nq}_{\text{луч}} = \varepsilon \sigma_{\text{СБ}}(T_{\text{окр}}^4 - T^4),$$

где $\mathbf{n}$ — вектор нормали; ε — степень черноты тела; $\sigma_{\text{СБ}}$ — постоянная Стефана–Больцмана; $\mathbf{q}_{\text{конв}}$ и $\mathbf{q}_{\text{луч}}$ — вектора плотности теплового потока (конвективного и лучистого соответственно); $T_{\text{окр}}$ — температура окружающей среды, равная 24°C.

Результаты и обсуждения

Для всех исследуемых образцов выполним измерения температурного поля при поглощении падающего излучения. Измерения проведем при помощи тепловизора Testo 881 с температурной чувствительностью до 50 мК. Результаты расчета поля температуры в образцах и экспериментальные термограммы представлены на рис. 3. На экспериментальных термограммах (рис. 3, а, с, е, к) представлено поле температур в образце и локальные значения в точках М1, М2 и М3. Рассчитанное поле температуры (рис. 3, б, д, ф, л) в образцах представлено для стороны образца, обратной облучаемой стороне (с этой же стороны снимались термограммы).

Проведем анализ изменения температуры относительно ее начального значения (24°C), полученной при расчете $\Delta T_{\text{расч}}$, и в результате эксперимента $\Delta T_{\text{эксп}}$. Для метода СТО интерес представляет температура в области облучения пучком, т. е. в центре образца (точка М3

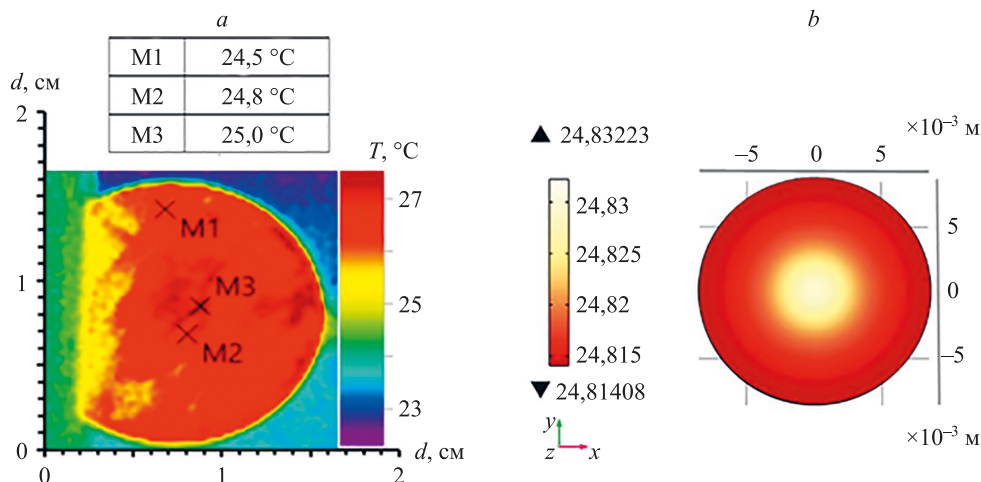


Рис. 3. Экспериментальные термограммы и расчеты полей температур образцов: Ge (а, б); Si (с, д); ситалла СТ-50-1 (е, ф) и GaAs (к, л)

Fig. 3. Experimental temperature patterns and calculation of the samples temperature fields: Ge (а, б); Si (с, д); sital CT-50-1 (е, ф) and GaAs (к, л)

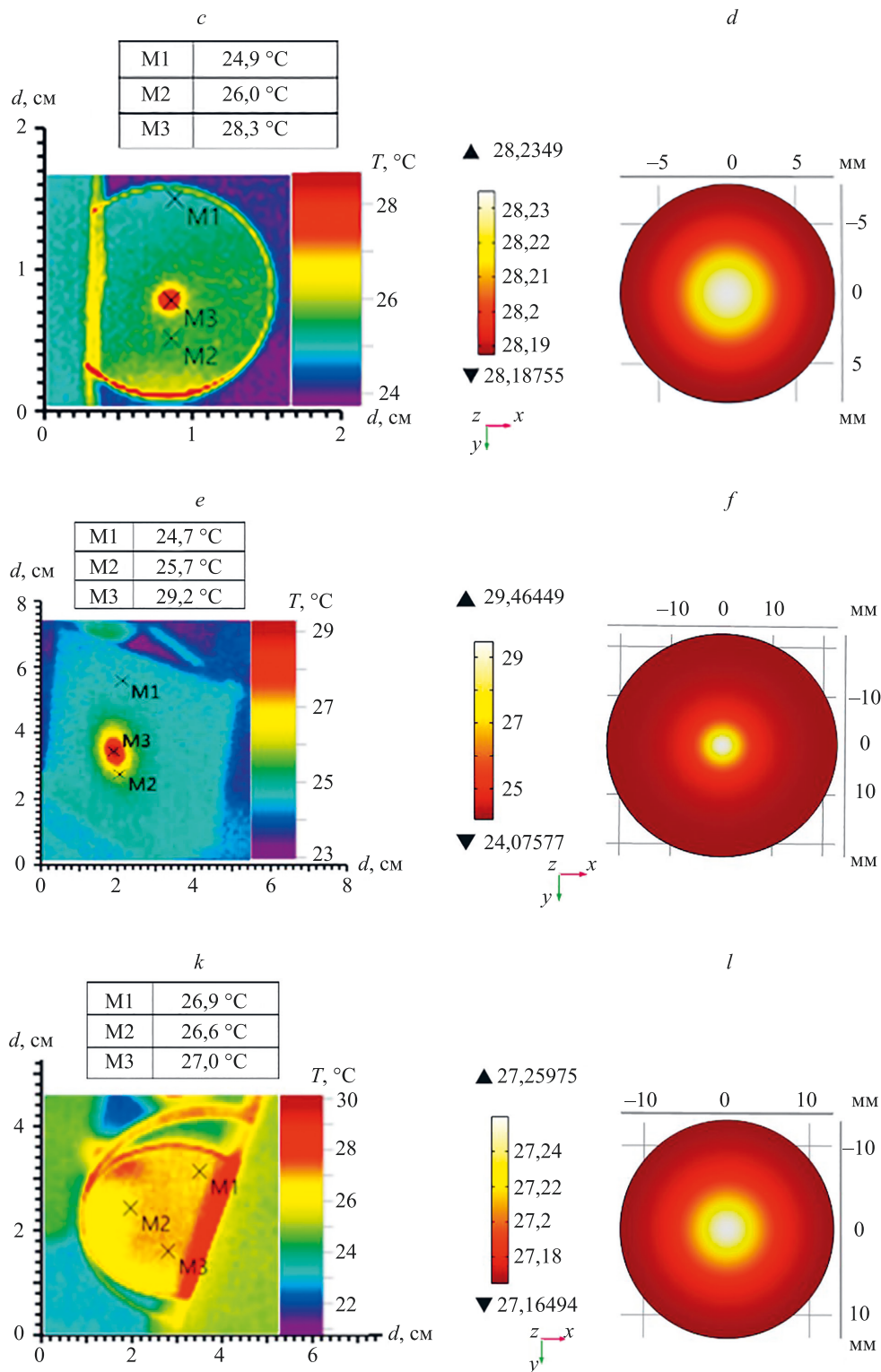


Рис. 3. Экспериментальные термограммы и расчеты полей температур образцов: Ge (a, b); Si (c, d); ситалл CT-50-1 (e, f) и GaAs (k, l)

Fig. 3. Experimental temperature patterns and calculation of the samples temperature fields: Ge (a, b); Si (c, d); sitall CT-50-1 (e, f), and GaAs (k, l)

на экспериментальных термограммах). В таком случае отклонение данных расчета от экспериментальных данных составит:

$$\delta = (|\Delta T_{\text{расч}} - \Delta T_{\text{экс}}| / \Delta T_{\text{экс}}) \cdot 100\%.$$

Получим значения величины δ для образцов: 3,7 % (Ge), 1,6 % (Si), 5 % (ситалл CT-50-1) и 8,3 % (GaAs).

Закключение

На основе предложенной методики создана численная модель нагрева материалов при поглощении электромагнитного излучения. Сравнение результатов расчета температуры в образцах и экспериментальных измерений показало, что расхождение данных не превышает 9 %. Полученный результат говорит об адекватности выбранной модели. Представленная модель может быть использована для калибровки установки стационарного термоотражения с применением эталонного образца, например сапфира, а также на изученных тонкопленочных образцах (например, на тонких плен-

ках кремния) и таких низкоразмерных объектах, как графен. В дальнейшем предложенный метод и установка могут применяться для исследования теплопроводности тонких пленок новых материалов.

Предложена методика расчета коэффициента поглощения, которая важна для точной оценки количества поглощенной образцом мощности излучения. Это необходимо для определения фактического теплового потока при расчете теплопроводности. Показано, что для образцов с высоким поглощением, таких как германий, достаточно простой модели. Для образцов с низким поглощением, таких как арсенид галлия, необходима модель, учитывающая эффект Фабри–Перо.

Литература

1. Маскаева Л.Н., Федорова Е.А., Марков В.Ф. Технология тонких пленок и покрытий: учебное пособие. Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2019. 236 с.
2. Parker W.J., Jenkins R.J., Butler C.P., Abbott G.L. Flash method of determining thermal diffusivity, heat capacity, and thermal conductivity // *Journal of Applied Physics*. 1961. V. 32. N 9. P. 1679–1684. <https://doi.org/10.1063/1.1728417>
3. Paddock C.A., Eesley G.L. Transient thermorefectance from thin metal films // *Journal of Applied Physics*. 1986. V. 60. N 1. P. 285–290. <https://doi.org/10.1063/1.337642>
4. Schmidt J., Cheaito R., Chiesa M. A frequency-domain thermorefectance method for the characterization of thermal properties // *Review of Scientific Instruments*. 2009. V. 80. N 9. P. 094901. <https://doi.org/10.1063/1.3212673>
5. Braun J.L., Olson D.H., Gaskins J.T., Hopkins P.E. A steady-state thermorefectance method to measure thermal conductivity // *Review of Scientific Instruments*. 2019. V. 90. N 2. P. 024905. <https://doi.org/10.1063/1.5056182>
6. Zhao D., Qian X., Gu X., Jajja S.A., Yang R. Measurement techniques for thermal conductivity and interfacial thermal conductance of bulk and thin film materials // *Journal of Electronic Packaging*. 2016. V. 138. N 4. P. 040802. <https://doi.org/10.1115/1.4034605>
7. Naftaly M. *Terahertz Metrology*. Artech House, 2015. 378 p.
8. Skauli T., Kuo P.S., Vodopyanov K.L., Pinguet T.J., Levi O., Eyres L.A., Harris J.S., Fejer M.M., Gerard B., Becouarn L., Lallier E. Improved dispersion relations for GaAs and applications to nonlinear optics // *Journal of Applied Physics*. 2003. V. 94. N 10. P. 6447–6455. <https://doi.org/10.1063/1.1621740>
9. Amotchkina T., Trubetskov M., Hahner D., Pervak V. Characterization of e-beam evaporated Ge, YbF₃, ZnS, and LaF₃ thin films for laser-oriented coatings // *Applied Optics*. 2020. V. 59. N 5. P. A40–A47. <https://doi.org/10.1364/AO.59.000A40>
10. Green M.A. Self-consistent optical parameters of intrinsic silicon at 300 K including temperature coefficients // *Solar Energy Materials and Solar Cells*. 2008. V. 92. N 11. P. 1305–1310. <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2008.06.009>
11. Adachi S. Optical dispersion relations for GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, InSb, Al_xGa_{1-x}As, and In_{1-x}Ga_xAsy P_{1-y} // *Journal of Applied Physics*. 1989. V. 66. N 12. P. 6030–6040. <https://doi.org/10.1063/1.343580>
12. Reddy J.N. *Introduction to the Finite Element Method*. 4th ed. New York: McGraw-Hill, 2019.
13. Егоров В.Н., Кондратенков В.И., Килессо В.С. Теплофизические свойства некоторых стекол и ситаллов // *Теплофизика высоких температур*. 1972. Т. 10. № 5. С. 1122–1123.
14. Москаленко Л.В., Стреляев Д.В. *Теплофизика: учебное пособие*. М.: МГТУ ГА, 2014. 100 с.
15. Yang S.T., Matthews M.J., Elhadj S., Cooke D., Guss G.M., Draggoo V.G., Wegner P.J. Comparing the use of mid-infrared versus far-infrared lasers for mitigating damage growth on fused silica // *Applied Optics*. 2010. V. 49. N 14. P. 2606–2616. <https://doi.org/10.1364/AO.49.002606>

References

1. Maskaeva L.N., Fedorova E.A., Markov V.F. *Technology of Thin Films and Coatings*. Yekaterinburg, Izatelstvo Uralskogo Universiteta, 2019, 236 p. (in Russian)
2. Parker W.J., Jenkins R.J., Butler C.P., Abbott G.L. Flash method of determining thermal diffusivity, heat capacity, and thermal conductivity. *Journal of Applied Physics*, 1961, vol. 32, no. 9, pp. 1679–1684. <https://doi.org/10.1063/1.1728417>
3. Paddock C.A., Eesley G.L. Transient thermorefectance from thin metal films. *Journal of Applied Physics*, 1986, vol. 60, no. 1, pp. 285–290. <https://doi.org/10.1063/1.337642>
4. Schmidt J., Cheaito R., Chiesa M. A frequency-domain thermorefectance method for the characterization of thermal properties. *Review of Scientific Instruments*, 2009, vol. 80, no. 9, pp. 094901. <https://doi.org/10.1063/1.3212673>
5. Braun J.L., Olson D.H., Gaskins J.T., Hopkins P.E. A steady-state thermorefectance method to measure thermal conductivity. *Review of Scientific Instruments*, 2019, vol. 90, no. 2, pp. 024905. <https://doi.org/10.1063/1.5056182>
6. Zhao D., Qian X., Gu X., Jajja S.A., Yang R. Measurement techniques for thermal conductivity and interfacial thermal conductance of bulk and thin film materials. *Journal of Electronic Packaging*, 2016, vol. 138, no. 4, pp. 040802. <https://doi.org/10.1115/1.4034605>
7. Naftaly M. *Terahertz Metrology*. Artech House, 2015, 378 p.
8. Skauli T., Kuo P.S., Vodopyanov K.L., Pinguet T.J., Levi O., Eyres L.A., Harris J.S., Fejer M.M., Gerard B., Becouarn L., Lallier E. Improved dispersion relations for GaAs and applications to nonlinear optics. *Journal of Applied Physics*, 2003, vol. 94, no. 10, pp. 6447–6455. <https://doi.org/10.1063/1.1621740>
9. Amotchkina T., Trubetskov M., Hahner D., Pervak V. Characterization of e-beam evaporated Ge, YbF₃, ZnS, and LaF₃ thin films for laser-oriented coatings. *Applied Optics*, 2020, vol. 59, no. 5, pp. A40–A47. <https://doi.org/10.1364/AO.59.000A40>
10. Green M.A. Self-consistent optical parameters of intrinsic silicon at 300 K including temperature coefficients. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2008, vol. 92, no. 11, pp. 1305–1310. <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2008.06.009>
11. Adachi S. Optical dispersion relations for GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, InSb, Al_xGa_{1-x}As, and In_{1-x}Ga_xAsy P_{1-y}. *Journal of Applied Physics*, 1989, vol. 66, no. 12, pp. 6030–6040. <https://doi.org/10.1063/1.343580>
12. Reddy J.N. *Introduction to the Finite Element Method*. 4th ed. New York, McGraw-Hill, 2019.
13. Egorov V.N., Kondratenkov V.I., Kileso V.S. Thermophysical Properties of Some Glasses and Glass-Ceramics. *Teplofizika vysokikh temperatur*, 1972, vol. 10, no. 5, pp. 1122–1123.
14. Moskalenko L.V., Streljaev D.V. *Thermophysics*. Moscow, MSTUCA, 2014, 100 p. (in Russian)
15. Yang S.T., Matthews M.J., Elhadj S., Cooke D., Guss G.M., Draggoo V.G., Wegner P.J. Comparing the use of mid-infrared versus far-infrared lasers for mitigating damage growth on fused silica. *Applied Optics*, 2010, vol. 49, no. 14, pp. 2606–2616. <https://doi.org/10.1364/AO.49.002606>

Авторы

Тукмакова Анастасия Сергеевна — кандидат технических наук, старший научный сотрудник, ООО «Тидекс», Санкт-Петербург, 194292, Российская Федерация; доцент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, [sc 57103805600](https://orcid.org/0000-0002-9123-8983), <https://orcid.org/0000-0002-9123-8983>, astukmakova@itmo.ru

Демченко Пётр Сергеевич — научный сотрудник, ООО «Тидекс», Санкт-Петербург, 194292, Российская Федерация; аспирант, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, [sc 57194214776](https://orcid.org/0000-0003-4948-2023), <https://orcid.org/0000-0003-4948-2023>, petr.s.demchenko@gmail.com

Тхоржевский Иван Леонидович — научный сотрудник, ООО «Тидекс», Санкт-Петербург, 194292, Российская Федерация; аспирант, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, [sc 57216155194](https://orcid.org/0000-0002-9781-0610), <https://orcid.org/0000-0002-9781-0610>, iltkhorzhevskiy@itmo.ru

Новотельнова Анна Владимировна — кандидат технических наук, доцент, доцент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, [sc 56436689700](https://orcid.org/0000-0003-0073-2415), <https://orcid.org/0000-0003-0073-2415>, novotelnova@yandex.ru

Ходзицкий Михаил Константинович — кандидат физико-математических наук, начальник сектора, ООО «Тидекс», Санкт-Петербург, 194292, Российская Федерация, [sc 16444444600](https://orcid.org/0000-0001-7261-8350), <https://orcid.org/0000-0001-7261-8350>, khodzitskiy@yandex.ru

Authors

Anastasiia S. Tukmakova — PhD, Senior Researcher, OOO Tidex, Saint Petersburg, 194292, Russian Federation; Associate Professor, ITMO University, 197101, Russian Federation, [sc 57103805600](https://orcid.org/0000-0002-9123-8983), <https://orcid.org/0000-0002-9123-8983>, astukmakova@itmo.ru

Petr S. Demchenko — Scientific Researcher, OOO Tidex, Saint Petersburg, 194292, Russian Federation; PhD Student, ITMO University, 197101, Russian Federation, [sc 57194214776](https://orcid.org/0000-0003-4948-2023), <https://orcid.org/0000-0003-4948-2023>, petr.s.demchenko@gmail.com

Ivan L. Tkhorzhevskiy — Scientific Researcher, OOO Tidex, Saint Petersburg, 194292, Russian Federation; PhD Student, ITMO University, 197101, Russian Federation, [sc 57216155194](https://orcid.org/0000-0002-9781-0610), <https://orcid.org/0000-0002-9781-0610>, iltkhorzhevskiy@itmo.ru

Anna V. Novotelnova — PhD, Associate Professor, Associate Professor, ITMO University, 197101, Russian Federation, [sc 56436689700](https://orcid.org/0000-0003-0073-2415), <https://orcid.org/0000-0003-0073-2415>, novotelnova@yandex.ru

Mikhail K. Khodzitskiy — PhD (Physics & Mathematics), Head of Research Department, OOO Tidex, Saint Petersburg, 194292, Russian Federation, [sc 16444444600](https://orcid.org/0000-0001-7261-8350), <https://orcid.org/0000-0001-7261-8350>, khodzitskiy@yandex.ru

Статья поступила в редакцию 29.07.2022

Одобрена после рецензирования 06.10.2022

Принята к печати 27.11.2022

Received 29.07.2022

Approved after reviewing 06.10.2022

Accepted 27.11.2022



Работа доступна по лицензии
Creative Commons
«Attribution-NonCommercial»