

图5 电子应变效应较大时的电场作用

图3表示不加电场时,不同样品中各深度声激发源信号的分布情况。不加电场时,参量 S 大小的材料信号较大,信号中主要是等离子体在表面和近表面的复合所产生的热波。对于1的样品,相对于热波波长而言,等离子体的复合发生在距样品表面极近的区域(相当于在表面复合形成表面热源)。其行为与参量 S 大的样品相似。此时,光声信号确如文献[3]所认为的那样,不易区分材料的电参量差异。当样品中存在电场时(如图4所示),等离子体所引起的Joule热增强声信号的激发。输出信号反映了样品内等离子体波的强度、传播方式等情况,而这些又与样品的电参量有关。样品电参量的差异通过电场效应而得以放大,从而使光声检测对材料的电参量差异变得灵敏。另外,由于电场效应,光声层析深度不仅与不加电场时相异,而且在不同参量的样品间,其层析深度也不同。

3.3 电子应变效应与电场效应

由式(5)可知,半导体的电子应变效应与热弹效应是两种相位几乎相反的声波来源。当调制频率较高或体内等离子体密度较大(即 S 小的样品)时,电子应

变效应的作用会大于热弹效应,甚至会使信号反相^[8]。图5表示当电子应变效应较大时的电场作用。曲线1和2表示未加电场时的情形,其中曲线1仅考虑热弹效应而未考虑电子应变效应,曲线2和3考虑热弹效应和电子应变效应。因电场效应与电子应变效应一样均与等离子体密度有关,故电场效应增大了热弹效应,并改变了光声信号的大小与相位。

4 结论

电场是通过等离子体波在场中传播所产生的Joule热而影响半导体的光声效应。电场既能改变光声信号的大小,也会影响光声层析的深度。电场效应使得光声信号与材料参量的关系变得更为密切,材料参量的差异通过等离子体波反映在Joule热中,增大样品中的电场强度可使这些差异得到放大。因此,采用在半导体样品中施加电场的方法(如在集成电路器件的光声显微成像中,对器件施加偏压)。能使光声检测更为灵敏地反映样品的性质。

参考文献

- 1 S. Y. Zhang, L. Chen. Photoacoustic and thermal wave phenomena in semiconductors. edited by A. Mandelis, Elsevier, New York, 1987; 27
- 2 Y. C. Shen, S. Y. Zhang. IEEE Trans. on UFFC, 1992; 39: 227
- 3 M. Liu, M. B. Suddendorf, M. G. Sonekh, S. J. Sheard. Semicond. Sci. Technol., 1993; 8: 1639
- 4 J. W. Fang, Y. C. Shen, Y. S. Lu, J. C. Cheng, S. Y. Zhang. Acoustical Imaging. Vol. 20, edited by Y. Wei and B. Gu, (Plenum, New York, 1992) 321
- 5 J. W. Fang, S. Y. Zhang, J. C. Cheng, J. de. Phys. IV, 1994; C7 ~ 199
- 6 J. Opsal, A. Rosencwaig. Appl. Phys. Lett., 1985; 47: 498
- 7 Y. S. Lu, S. Y. Zhang, J. C. Cheng. J. Appl. Phys., 1990; 66: 1066
- 8 G. S. Kino, R. G. Stean. Appl. Phys. Lett., 1985; 47: 1048

一种热导率深度剖面重构的算法

徐明华 程建春 张淑仪

(南京大学声学研究所 近代声学国家重点实验室 南京·210093)

1 引言

在无损检测中,不均匀固体的深度剖面分析一直是人们十分关心的问题。近来, Mandelis等^[1]提出一种数值算法,利用自适应的方法来进行频域内热波反演。后来,程等^[2]又提出一种算法,利用脉冲谱和伪逆技术来解决其热导率连续变化的光不透明固体样品热导率重构问题,并且针对一维模型,以表面

的温度值为假定的测量数据,进行了数值模拟。其结果表明,该算法只对无误差的数据是很有效的。

本文一方面改进程提出的算法,利用正则法代替伪逆技术,使之对有误差的数据有效。另一方面,在光热实验中,测得的是与样品表面温度场有关的物理量。所以,本文根据调制光反射技术的实验系统,推导了以样品表面的调制光反射信号为假定测

2 理 论

为简单起见,我们考虑的固体样品只在深度方向的热导率是不均匀的,且样品的密度和比热假设已知。另外,在调制光反射实验中须考虑样品对光的吸收情况,不外乎 2 种:光吸的和光透的,后者要使反演可行必须在样品表面蒸(或涂)上一层足够厚的光吸收物质来吸收泵浦光,同时要注意样品表面对探测光的反射不能太小。所以,一般引入一个如图 1 所示的 3 层模型。最上面是光吸收层,中间是我们要反演的热导率不均匀层,下面是基底层。光吸收系数为 α 的表面层吸收了高斯半径为 b 、功率为 P_a 的泵浦光,在内部形成的热源分布 $Q_i(r, z, t)$ 为

$$Q_i(r, z, t) = \frac{P_a}{2} e^{-\alpha r^2/2} e^{-i(\omega t + L)} + i \quad (1)$$

由于泵浦光束和探测光束均是高斯光束,这里采用柱坐标。利用 Hankel 变换,温度的变化量可写成如下积分形式

$$T(r, z, t) = \frac{P_a}{2} \int_0^L \bar{T}(z, t) e^{-r^2/4} J_0(r) dr \quad (2)$$

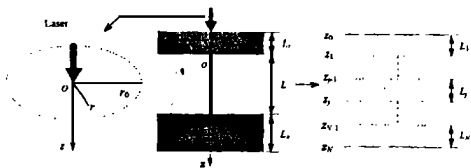


图 1 样品剖面示意图

三层的热波方程分别如下所示:

$$\frac{\partial^2 \bar{T}_i(z, t)}{\partial z^2} - \frac{\partial^2 \bar{T}_i(z, t)}{\partial t^2} = -\bar{Q}_i(z, t) \quad (-L_a < z < 0) \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} [k_s(z) \frac{\partial \bar{T}_s(z, t)}{\partial z}] - k_s(z) \frac{\partial^2 \bar{T}_s(z, t)}{\partial z^2} = 0 \quad (0 < z < L) \quad (4)$$

$$\frac{\partial^2 \bar{T}_b(z, t)}{\partial z^2} - \frac{\partial^2 \bar{T}_b(z, t)}{\partial t^2} = 0 \quad (L < z < L + L_b), \quad \text{其中}$$

$\bar{Q}_i(z, t) = (\alpha/k_i) e^{-i(\omega t + L)} + i$, $\alpha_i = \alpha + i \omega c_i/k_i$, $\alpha_b = \alpha + i \omega c_b/k_b$, $\alpha_s(z) = \alpha + i \omega c_s(z)/k_s(z)$ \bar{T}_q, k_q, ρ_q 和 c_q ($q = t, s$ 和 b 代表吸收层、样品和基底层) 分别是样品的温度、热导率、密度和比热。忽略样品表面空气的影响,在 $z = -L_a$ 和 $z = L + L_b$ 热流为零;同时,方程(3~5)必须满足边界 $z = 0$ 和 L 上温度和热流的连续。根据文献[3],如果用一束高斯半径为 b 、功率为 P_b 的探测光来检测,得到的调制光反

射信号可写为如下形式

$$S(\omega) = \frac{P_a P_b}{2} \bar{T}_i(-L_a, \omega) e^{-(\alpha^2 + \omega^2)^{1/4} L} \quad (6)$$

这里 $S(\omega)$ 是一个比例常数,它和样品表面的光反射有关。根据脉冲谱方法^[4],首先对未知的热导率剖面 $k_s(z)$ 作一个猜测 $k_0(z)$,然后构造如下的迭代过程

$$\begin{aligned} k_{k+1}(z) &= k_k(z) + \delta k_k(z) \\ \bar{T}_{k+1}(z, \omega) &= \bar{T}_k(z, \omega) + \delta \bar{T}_k(z, \omega) \\ S_{k+1}(\omega) &= S_k(\omega) + \delta S_k(\omega), \quad k = 0, 1, \dots \end{aligned} \quad (7)$$

把方程(7)代入(3~5)和边界条件,忽略 δk_k 和 $\delta \bar{T}_k$ 的高阶小量,得到一组形式上和(3~5)一样的求 $\bar{T}_k(z, \omega)$ 的方程,和一个第一类 Fredholm 积分方程来求解 $k_k(z)$,

$$S_k(\omega) = \int_0^L k_k(x) M_k(x, \omega) dx \quad (8)$$

其中 $M_k(x, \omega) = \frac{P_a P_b}{2} \int_0^L \frac{2}{e^{-i\omega t} + e^{-i\omega t}} g(0, \omega) \cdot \{ [\frac{\partial \bar{T}_k(x, \omega)}{\partial x}]^2 + [\bar{T}_k(x, \omega)]^2 \} e^{-(\alpha^2 + \omega^2)^{1/4} x} dx$

$$g(0, \omega) = \frac{\partial \bar{T}_k(0, \omega)}{\partial z} / (\alpha - i\omega)$$

下面的问题是如何从方程(8)求出修正量 $\delta k_k(z)$ 。

(1) 我们把不均匀层分成 N 层(如图 1 所示),第 j 层的热波方程(忽略下标 k) 为

$$\frac{\partial^2 \bar{T}_j(z, \omega)}{\partial z^2} - \frac{\partial^2 \bar{T}_j(z, \omega)}{\partial t^2} = 0, \quad (z_{j-1} < z < z_j) \quad (10)$$

其中 $\alpha_j^2 = \alpha^2 + i \omega c_j/k_j$

(2) 在数值计算中 $S(\omega)$ 是如下形式的复数: $S(\omega) = A(\omega) e^{i\phi(\omega)}$, $A(\omega)$ 和 $\phi(\omega)$ 分别是其幅度和相位。相应地在光热实验中,可通过改变调制频率得到一组调制光反射信号 $S_r(\omega)$ 的幅度 $A_r(\omega)$ 和相位 $\phi_r(\omega)$, $\{ \phi_i \}$ ($i = 1, 2, \dots, M$)。在计算中,可取如下近似,

$$S_k(\omega) = S_k(\omega) - S_r(\omega) \quad (11)$$

如果实验中只测得其相位信号 $\phi_r(\omega)$, 那么用如下近似来代替(11)式,

$$S_k(\omega) = A_k(\omega) [e^{i\phi_k(\omega)} - e^{i\phi_r(\omega)}] \quad (12)$$

这样方程(8)离散为如下形式

$$\sum_{j=1}^N \bar{f}_j f_j = q_j \quad (13)$$

其中 $f_j = k(z_j)$, $\bar{f}_j = \int_{z_{j-1}}^{z_j} M_k(x, \omega) dx$, $q_j = S_k(\omega)$, ($i = 1, 2, \dots, M, j = 1, 2, \dots, N$)。方程(13)求 f_j 是一个典型的离散数据形式的逆问题。实际测量的数据总带有一定的误差,故方程(13)总是不适定的,即使

其右边带有很小的误差,都可能得到一个面目全非和没有物理意义的结果。故我们采用正则法来解决这个问题,引入加 Tikhonov 窗函数的正则解 f_j [5]

$$f_j = \sum_{n=1}^N \left[\frac{2}{n} + \epsilon \right]^{-1} \sum_{m=1}^M W_{nm} Q_{m, n}^* u_{jn} \quad (14)$$

$j = 1, 2, \dots, N$

这里 W_{nm} 为正值权重矩阵 W 的元数, ϵ 是决定窗函数的正则参数, $*$ 表示复数共轭。由奇异值理论 [5], 矩阵 $\{ij\}$ 可被分解成三角关系 $\{u_{nm}, v_{nm}\}$,

$$\sum_{k=1}^N ik u_{kj} = i v_{ij}, \quad \sum_{k=1}^M kj^* k_j = i u_{ij} \quad (15)$$

此逆问题归结为如何选择正则参数 ϵ 。我们定义一种选择准则: 如果 f_j 是解(14)当正则参数取值为 ϵ 的正则解, 由此得到热导率分布 $k_k(z)$, 然后计算此热导率分布下的调制光反射信号 S_k , 定义如下误差函数

$$\text{error}(\epsilon) = \sum_{i=1}^M |k(i) - r(i)|^2 / \sum_{i=1}^M |r(i)|^2 \quad (16)$$

3 数值模拟

下面就经离子注入的硅样品进行数值分析。由于热波的相位信号比幅度信号的空间分辨率更高, 故我们只利用调制光反射相位信号进行反演。

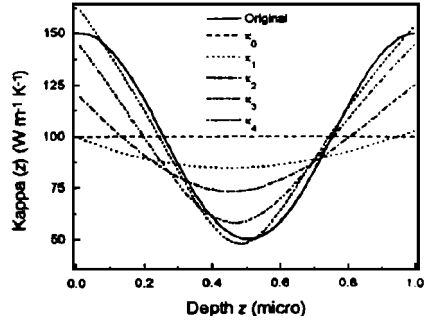
硅片经离子注入后, 其晶格会被破坏, 导致其热导率的变化, 相对来说, 其密度和比热的变化就可以忽略。对于泵浦光是波长较短的 Ar^+ 离子激光, 而探测光是波长较长的 He-Ne 激光, 为了提高样品表面对泵浦光的吸收和对探测光的反射, 在注入硅表面又镀(例离子溅射)上一层 20nm 的金膜, 足以吸收进入金膜的入射光。(金的光吸收系数 $1 \times 10^8 \text{m}^{-1}$) 数值计算的参数 [6] 如表 1。

表 1

	密度 ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$)	比热 ($\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$)	热导率 ($\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$)	厚度
金膜	19.3×10^3	1.306×10^2	3.11×10^2	20nm
离子注入层	2.42×10^3	7.367×10^2		1 m
硅基底	2.42×10^3	7.367×10^2	1.50×10^2	0.5mm

根据热波波长与检测空间分辨率的关系, 我们选取光调制频段: 10kHz ~ 10MHz。取 $M = N = 80$ 。我们分析了如下函数形式的热导率剖面: $k_s(z) = 100 + 50 \cos(2z/L)$ 。计算结果如图 2~3。图 2 演示了整个反演迭代过程, 可见经过 4 次迭代, 重构曲线与原始值已基本一致, 说明 $k_k(z)$ 能较快地收敛于 $k_s(z)$ 。在实际条件下, 测量时总受到噪声影响, 因此我们假设

测量的调制光反射相位信号带有如下形式的噪声: $r^*(z) = r(z)(1 + \epsilon \times RND)$, 其中 RND 是幅值为 1 的白噪声, ϵ 是相对噪声强度 < 1 。我们选取 5% 的噪声, 并对此进行了反演, 其结果如图 3 所示。可见, 我们的算法对噪声有很好的抑制作用。



实线: 原始值, 虚线: 重构值

图 2 热导率剖面的重构过程

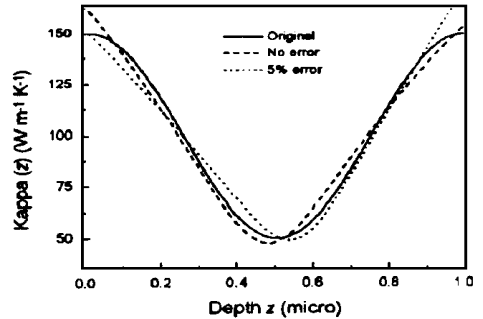


图 3 加 5% 噪声和不加噪声的反演

结果与原始值的比较

4 结论

我们提出的热导率剖面重构算法, 结合调制光反射的实验技术, 可以对热导率一维连续变化的样品作剖面分析。

参考文献

- 1 Madelis A, Peralta S B, Theon J. J. Appl. Phys., 1991; 70(3): 1761 ~ 1770
- 3 Velinov T, Burov G, Bransalov K, Rogier J P, Mansanares A. Journal de Physique IV, 1994; 4(C7): 19 ~ 22
- 4 黄光远, 刘小军. 数学物理反问题, 山东科学技术出版社, 1993
- 5 Bertero M, Mol C De, Pikes E R. Inverse Problem, 1988; 4: 573 ~ 594
- 6 [日] 饭田修一等汇编, 张质贤等译, 物理学常用数表, 科学出版社, 1979