

文章编号: 1003-1480 (2023) 01-0032-05

Al/CuO 含能薄膜换能芯片薄膜反应的模拟分析

杨 晓¹, 刘凤丽¹, 刘双杰², 王洪星², 郝永平²

(1.沈阳理工大学 机械工程学院, 辽宁 沈阳, 110158; 2.沈阳理工大学 装备工程学院, 辽宁 沈阳, 110158)

摘 要: 为了探究含能薄膜在换能元火工品点火过程中的点燃机制, 建立 Al/CuO 含能薄膜换能芯片结构的傅里叶传热模型, 利用 COMSOL 仿真软件对不同电压或电容条件下含能薄膜换能芯片的点火过程进行数值模拟, 对比分析电容或电压对含能薄膜温升曲线的影响。仿真结果表明: 提高电压或电容使得含能薄膜温升曲线峰值增高或延长, 两者都能扩大薄膜反应区域; 电容与电压增大或减小均影响半导体桥对含能薄膜的传热效率, 导致含能薄膜的温升曲线相对于半导体桥具有滞后性与相似性。

关键词: 含能薄膜; 换能芯片; 传热模型; 薄膜反应

中图分类号: TJ45*6 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3969/j.issn.1003-1480.2023.01.007

Simulation Analysis of Thin Film Reaction for Al/CuO Energetic Thin Film Energy Conversion Chip

YANG Xiao¹, LIU Feng-li¹, LIU Shuang-jie², WANG Hong-xing², HAO Yong-ping²

(1.College of Mechanics Engineering,Shenyang Ligong University, Shenyang, 110158; 2.College of Equipment Engineering,Shenyang Ligong University, Shenyang, 110158)

Abstract: In order to explore the ignition mechanism of energetic thin film in the ignition process of energy conversion element initiating explosive devices, the Fourier heat transfer model of Al/CuO energetic thin film energy conversion chip structure was established. The ignition process of energetic thin film energy conversion chip under different voltage or capacitance conditions was numerically simulated by COMSOL simulation software, and the influence of capacitance or voltage on the temperature rise curve of energetic thin film was compared and analyzed. The simulation results show that increasing the voltage or capacitance can increase or prolong the peak value of the temperature rise curve of the energetic thin film, and both of them can enlarge the area of the thin film reaction; When the capacitance and voltage increase or decrease, the heat transfer efficiency of the semiconductor bridge to the energetic thin film is affected, resulting in the hysteresis and similarity of the temperature rise curve of the energetic thin film relative to the semiconductor bridge.

Key words: Energetic thin film; Energy conversion chip; Heat transfer model; Thin film reaction

火工品的换能元是一种将电能转换为热能的能量转换器件^[1], 半导体换能元指利用 MEMS 技术制备的以半导体桥作为能量转换部件的换能元。研究者发现通过在半导体桥上集成含能薄膜能够提升换能元的能量输出^[2], 说明含能薄膜换能元具有很大的应用潜力, 因此, 对含能薄膜换能元的点火过程进行研究具

有一定意义和价值。

目前国内外学者对于换能元的发火机理研究已有较多成果。贾昕^[3]研究发现含能复合薄膜对半导体桥的电爆过程没有明显影响。李慧等^[4]利用 Multi physics 仿真软件对 2 种不同桥区体积的半导体换能元进行电爆特性研究, 结果表明桥区体积更大的换能

收稿日期: 2022-07-18

作者简介: 杨晓 (1998-), 男, 在读硕士研究生, 从事精密仪器与测量研究。

基金项目: 2022 年度教育厅基本科研项目 (LJKMZ20220601)。

元安全性更好, 较小桥区体积的换能元更容易发火。杨贵丽^[5]针对恒流激励下半导体桥火工品的电爆特性规律进行研究, 建立了一种基于傅里叶传热原理的稳态模型, 得到了换能元塞子表面换热下临界爆发电流与半导体桥电阻的函数关系。王大奎等^[6]通过 COMSOL 软件设计了一种类似换能元结构的引信开关, 对开关的电爆特性进行了仿真分析。Andrea Nicollet 等^[7]制备了不同周期薄膜的含能薄膜换能元, 研究含能薄膜的点火特性, 结果表明含能薄膜小部分表面达到反应温度后可持续反应。

含能薄膜换能元通过半导体桥的焦耳热效应或在极短时间内半导体桥区产生大量热能, 再通过等离子体冷凝或是进行热传导, 将热量传递到含能薄膜^[2-3]。点火过程一般分为半导体桥区升温、熔化、汽化电离以及等离子体加热 4 个阶段^[8-9]。本研究利用 COMSOL 仿真软件对不同电压或电容条件下含能薄膜换能芯片的点火过程进行数值模拟, 对比分析电容或电压对含能薄膜温升曲线的影响。

1 含能薄膜换能芯片模型建立

1.1 物理结构

Al/CuO 含能薄膜换能芯片的物理模型如图 1 所示, 含能芯片固定在陶瓷塞上, 单晶硅衬底热氧化生成一层 SiO₂ 绝缘层将其与多晶硅等导电部分隔开。

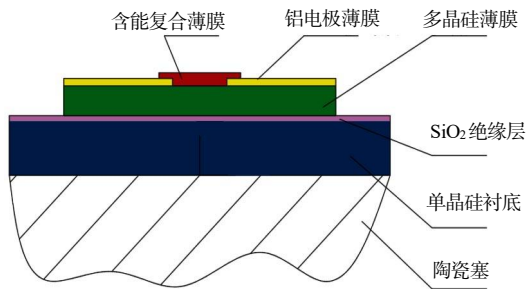


图 1 Al/CuO 含能薄膜换能芯片结构

Fig.1 Structure of Al/CuO energetic thin film energy conversion chip

含能薄膜换能元的点火过程基本由换能芯片完成, 陶瓷塞与换能芯片之间存在着热传导过程。由于换能芯片结构没有陶瓷塞部分, 在模型建立过程中通过计算研究陶瓷塞与换能芯片之间存在的热传导的

影响。

1.2 传热理论分析

如图 1 模型所示, 陶瓷塞与换能芯片的单晶硅衬底进行热传导换热^[10], 此外, 换能芯片表面以及换能元陶瓷塞表面与空气进行对流换热。基于傅里叶传热方程与牛顿冷却定律, 杨贵丽建立了一种换能元陶瓷塞的稳态换热方程^[5], 根据原式建立方程:

$$\begin{cases} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(\lambda_s r^2 \frac{dT}{dr} \right) = 0 \\ r = r_1, -\lambda_s A \frac{dT}{dr} = I^2 R \\ r = r_2, -\lambda_s \frac{dT}{dr} = h_s (T - T_f) \end{cases} \quad (1)$$

式(1)中: λ_s 为陶瓷塞导热系数; h_s 为陶瓷塞的表面传热系数; A 为衬底的等效表面积; r_1 为单晶硅衬底底部面积的等效半径; r_2 为陶瓷塞表面面积的等效半径, 等效半径根据球体模型等效面积公式 $A=4\pi r^2$ 得出; T 为陶瓷塞微单元体温度; T_f 为环境温度。

由式(1)得到单晶硅衬底底部表面换热系数:

$$h_e = \frac{\lambda_c}{r_1^2} \left(\left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} \right) + \frac{\lambda_c}{h_s r_2^2} \right)^{-1} \quad (2)$$

由式(2)可知, 对于陶瓷塞表面换热系数为 35 W/(m² · K), 等效半径为 2.1 mm, 衬底等效半径为 0.35 mm 的衬底, 换热系数取 1 256 W/(m² · K)。

1.3 仿真模型建立

含能薄膜换能元的点火能量主要作用在多晶硅薄膜层构成的半导体桥上, 利用 COMSOL 有限元分析软件建立含能薄膜换能芯片仿真分析的传热模型, 如图 2 所示。

该模型单晶硅厚度为 400 μm, 生长有 1 μm 的 SiO₂ 绝缘薄膜层, 多晶硅薄膜层厚 2 μm, 铝电极薄膜层厚 2 μm。多晶硅半导体桥为 90° V 字形结构, 能够减小发火电压阈值^[11], 整体尺寸为 100 μm(L) × 380 μm(W) × 2 μm(d), 桥区电阻为 1.02 Ω。因为含能薄膜存在自蔓反应^[7], 仿真模型中 Al/CuO 含能薄膜厚度按 1:2 比例交替共 4 层, 总厚度为 300 nm。利用 COSMOL 电磁热耦合物理场进行仿真分析时, 采用电容放电向含能薄膜换能芯片供电。单晶硅与二氧化

硅在 COMSOL 材料库中分别选用 Silicon 和 Quartz。单晶硅与多晶硅作为半导体, 导电率并非确定值, 在一个较广范围内变化。多晶硅电导率根据 COMSOL 结构模型计算得出, 所得电导率经过微元模型计算为 $1.09\Omega^{[12]}$, 与物理模型基本一致。固态时模型材料参数如表 1 所示。

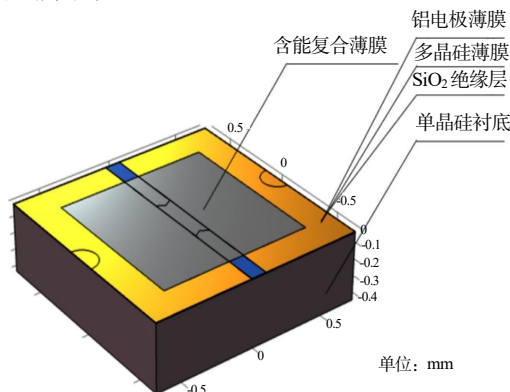


图2 含能薄膜芯片传热模型

Fig.2 Heat transfer model of energetic thin film chip

表1 固态材料参数取值^[13-14]

Tab.1 The value of solid material parameters

物性参数	密度/ ($\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$)	比热容/ ($\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$)	导热系数/ ($\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$)	电导率/ ($\text{S} \cdot \text{m}^{-1}$)
多晶硅	2.3	787	60	1.40×10^5
CuO	6.30	800	26	1.40×10^{-2}
Al	2.70	897	237	3.51×10^7
单晶硅	2.33	700	130	2.52×10^4
SiO ₂	2.60	880	3	1.00×10^{-12}

点火过程中半导体桥会在极短时间内到达汽化点, 然后以等离子态存在。整个点火过程, 多晶硅经过了固态、液态、气态以及等离子态等形态, 普通方法难以进行建模分析^[15]。为了简要模拟物质升温中经历不同物质形态, 假设点火过程中多晶硅、Al 以及 CuO 在不同物质状态下的比热容分别为常数^[6]。查阅材料不同形态的比热容^[6,16-17], 如图 3 所示。

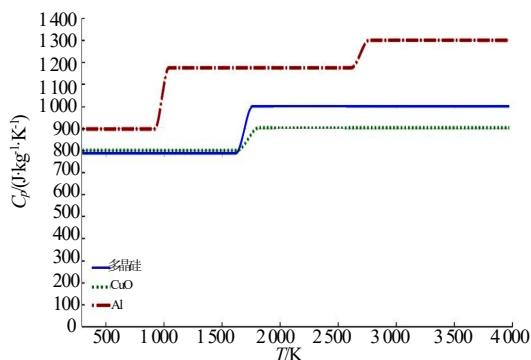


图3 材料不同形态的比热容

Fig.3 Specific heat capacity of different forms of materials

2 模拟仿真与分析

2.1 薄膜反应阈值分析

在仿真环境中设置不同电压与电容梯度放电条件, 研究含能薄膜的能量输出情况。一般认为薄膜表面温度到达 1 150 K 足够使得薄膜完全反应^[3,6], 在仿真中利用 COMSOL 筛选出含能薄膜达到 1 150 K 的区域。发火电压设置为 5~15V, 间隔取 2.5 V, 电容设置为 47, 100, 220 μF 3 种。时间长度设置为 200 μs , 步长设置为 2 μs 。记录含能薄膜区域温度峰值, 结果如表 2 所示。

表2 Al/CuO 含能薄膜温度峰值 (°C)

Tab.2 Peak temperature of Al/CuO energetic thin film

发火电压/V	电容/ μF		
	47	100	220
15.0	1 072	1 674.3	2 265.8
12.5	744.3	1 120.5	1 591.9
10.0	397.9	661	969.5
7.5	203	341.9	508.2
5.0	91.6	144.9	214.4

含能薄膜温度峰值达到 877°C 时说明含能薄膜有部分区域已经完全反应^[7]。

由表 2 可见, 含能薄膜温度峰值随着电压或电容条件改变发生显著变化, 提高电容或电压都能显著提高薄膜温度峰值。

2.2 薄膜反应分析对比

不同电容、电压下 Al/CuO 含能薄膜达到温度峰值时的表面温度分布如图 4 所示。图 4 (a) ~ (b) 中半导体桥表面上方的 Al/CuO 含能薄膜基本均达到完全反应温度, 图 4 (a) 中一部分桥区外部分的 Al/CuO 含能薄膜也达到了完全反应温度, 基于自蔓反应现象, 可以认为该薄膜部分是 Al/CuO 含能薄膜的最小反应区域。图 4 (c) 虽然温度峰值达到了反应温度阈值, 但是含能薄膜的完全反应区域很小, 说明薄膜反应效果不理想。

对比图 4 (a) ~ (c), 图 4 (a) 中含能薄膜反应区域最大, 最有利于含能薄膜对能量输出的贡献。图 4 (b) ~ (c) 中含能薄膜的温度峰值虽然也达到了完全反应温度, 但是随着电压与电容减小, 薄膜反应区域显著缩小。

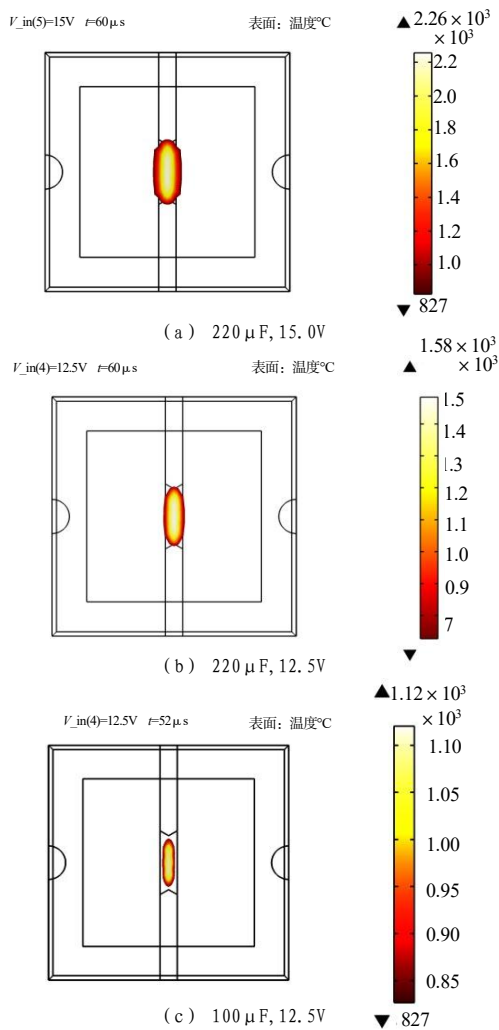


图4 不同电容电压时 Al/CuO 含能薄膜反应情况

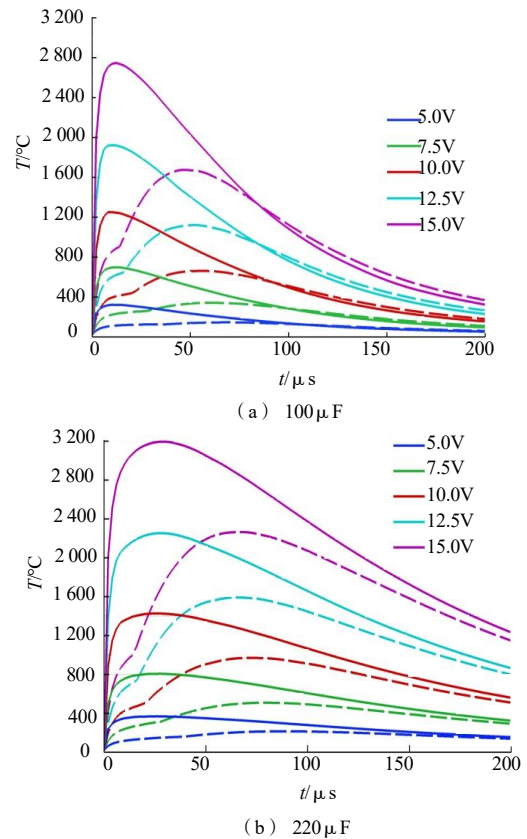
Fig.4 Reaction of Al/CuO energetic thin film under different capacitance and voltage conditions

2.3 点火过程模拟分析

在低电压点火时通常选取 100 μ F 的电容作激励源。选取电容大小为 100 μ F 与 220 μ F，在芯片两端施加不同电压，得到含能薄膜区域与半导体桥区域温升曲线，如图 5 所示。

由图 5 可以发现电压能够显著影响半导体桥与含能薄膜的温度峰值高度，电容在较小提升两者温度峰值情况下能够显著影响半导体桥与含能薄膜的温度峰值持续时间，两者都能增大含能薄膜的温度峰值。整个点火过程中，含能薄膜的温度峰值相对半导体桥具有滞后性，在半导体桥迅速达到温度峰值后，含能薄膜经过约几十 μ s 才到达温度峰值。对比不同电容组下含能薄膜与半导体桥之间的温升曲线，发现两者具

有相似性。分析认为，含能薄膜的激发热源主要来自半导体桥电爆传导热量，两者之间存在传热过程，电压增大时提高了半导体桥的温度峰值，所以提高了半导体桥对含能薄膜的传热效率；电容增大时延缓了半导体桥温度峰值下降时间，有利于含能薄膜在较长时间保持较高的传热效率，而当电容减小时半导体桥温度峰值下降都很快，对含能薄膜的传热效率也迅速减小，所以含能薄膜的温升曲线与半导体桥的温升曲线斜度相似。



注：实线为半导体桥区温升曲线，虚线为含能薄膜温升曲线

图5 不同电容下 Al/CuO 含能薄膜换能芯片温升过程

Fig.5 Temperature rise process of Al/CuO energetic thin film energy conversion chip at different capacitances

3 结论

本文建立了一种 Al/CuO 含能薄膜换能芯片的傅里叶传热模型，利用 COMSOL 仿真分析软件对比分析了不同电压与电容大小条件下，含能薄膜换能芯片的含能薄膜反应区域与电压或电容之间的关系，并且研究了含能薄膜换能芯片点火过程中传热过程对含

能薄膜反应区域的影响。结果表明:

(1) 电压能够显著影响半导体桥与含能薄膜的温度峰值高度, 电容在较小提升两者温度峰值情况下能够显著影响半导体桥与含能薄膜的温度峰值持续时间, 两者都能增大含能薄膜的温度峰值。

(2) 半导体桥与含能薄膜之间存在传热过程, 电压改变半导体桥的温度峰值, 影响了半导体桥对短时的含能薄膜的传热效率, 电容改变半导体桥温度峰值下降时间, 影响含能薄膜在较长时间的传热效率。所以半导体桥与含能薄膜的温升曲线存在滞后与相似现象。提高电压或增大电容都有助于扩大薄膜反应区域。

参考文献:

- [1] 褚恩义, 张方, 张蕊, 等. 第四代火工品部分概念初步探讨[J]. 火工品, 2018(1): 1-5.
- [2] 史安然, 鲍立荣, 张伟, 等. 纳米 Al/CuO 含能复合薄膜的反应性研究进展[J]. 含能材料, 2022, 30(3): 262-275.
- [3] 贾昕. Al/CuO 复合半导体桥设计及发火性能[D]. 南京: 南京理工大学, 2014.
- [4] 李慧, 白颖伟, 任伟, 等. 火工品换能元直流激励下温度响应特性仿真研究[J]. 兵工学报, 2016, 37(supply.2): 138-143.
- [5] 杨贵丽, 焦清介, 沈瑞琪. 微型半导体桥临界爆发及发火电流特性研究[J]. 南京理工大学学报, 2012, 36(3): 476-481.
- [6] 王大奎, 姜文忠, 冯恒振. 一种引用固态安全开关设计及模拟分析[J]. 测试技术学报, 2021, 35(2): 134-138.
- [7] Andrea N, Guillaume L, Andres B, et al. Investigation of Al/CuO multilayered thermite ignition[J]. Journal of Applied Physics, 2017(121): 034 503.
- [8] 官震, 朱朋, 叶迎华, 等. Al/MoO₃ 薄膜厚度对含能半导体桥发火特性的影响[J]. 爆破器材, 2017, 46(4): 1-6.
- [9] 朱朋. 基于含能复合薄膜的非线性电爆换能元技术研究[D]. 南京: 南京理工大学, 2014.
- [10] 陶文铨, 杨世铭, 等. 传热学[M]. 北京: 高等教育出版社, 2019.
- [11] 张彬, 任伟, 褚恩义, 等. 不同桥形微结构换能元的仿真设计与实验研究[J]. 含能材料, 2018, 26(12): 1 056-1 060.
- [12] 褚恩义, 刘卫, 薛艳, 等. 微桥膜换能元结构设计及电阻计算方法[J]. 火工品, 2017(6): 1-5.
- [13] 陈浩, 王新杰, 王昊, 等. V 型电热驱动器理论模型及动态特性[J]. 上海交通大学学报, 2021, 55(10): 1 263-1 271.
- [14] 刘运斌. Al/CuO 含能桥性能及在 B/KNO₃ 点火药中的应用[D]. 沈阳: 沈阳理工大学, 2018.
- [15] 刘明芳, 张小兵. 半导体桥点火模型的建立及数值模拟[J]. 火炸药学报, 2008, 31(5): 87-90.
- [16] 赵凯峰, 程广贵, 张忠强, 等. 熔融硅在水平管道凝固过程的数值分析[J]. 热加工工艺, 2017, 46(9): 93-96.
- [17] J. Leitner, D Sedmidubsky, B. Dousova, et al. Heat capacity of CuO in the temperature range of 298.15-1 300K[J]. Thermo-chimica Acta, 2000(348): 49-51.