

行政院國家科學委員會專題研究計畫 成果報告

應用逆算法計算掃描熱顯微鏡微熱加工之熱通量和熔化深度

計畫類別：個別型計畫

計畫編號：NSC94-2212-E-168-004-

執行期間：94年08月01日至95年07月31日

執行單位：崑山科技大學機械工程系

計畫主持人：張文進

計畫參與人員：徐榮昌，郭怡芳和羅千翔

報告類型：精簡報告

處理方式：本計畫涉及專利或其他智慧財產權，1年後可公開查詢

中 華 民 國 95 年 9 月 4 日

行政院國家科學委員會專題研究計畫成果報告

應用逆算法計算掃描熱顯微鏡微熱加工之熱通量和熔化深度

Inverse calculation of heat flux and melting depth during
microthermal machining by scanning thermal microscope

計畫編號：94-2212-E-168 -004

執行期限：94 年 8 月 1 日至 95 年 7 月 31 日

主持人：張文進

崑山科技大學 機械系(所)

計畫參與人員：徐榮昌，郭怡芳和羅千翔 崑山科技大學 機械系(所)

一、中文摘要

本計劃的目的在利用逆算法計算由原子力顯微鏡修改而成的掃描熱顯微鏡微熱加工時之熱通量和熔化深度。當探針加工試件時，探針會感測到試件表面與探針間熱流變化訊息，並產生熱能熔化加工件，以得到奈米級熱加工；加工期間，由於流向材料表面之熱通量和工件之熔化深度無法準確控制，故加工品質往往不佳；因此本計劃提出逆算法來解決此一問題。首先將加熱後之旋臂探針視為一維逆向熱傳導問題，藉助於探針固定端之溫度量測來計算所產生的熱通量；此熱通量流經工件表面，並將工件分為液態和固態兩層，然後亦視此雙層材料為另一逆向熱傳導問題，藉以求得固液兩相之界面。本研究之程序為：首先建立探針和加工材料兩者不同的逆算熱傳問題之數學模式，接著以共軛梯度法分別來處理此逆算問題；該法之處理過程包含：直接問題、靈敏性問題、伴隨問題、梯度方程式和收斂條件。本計劃之結果將有助於提升奈米級超精密加工技術並改善其產品品質。

關鍵詞：逆算熱傳導問題，掃描熱顯微鏡，微熱加工，固液界面，熱通量。

Abstract

The aim of the project is to calculate the heat flux and the melting depth during microthermal machining using a scanning thermal microscope (SThM), based on a

modified atomic force microscope (AFM). When the probe is scanned across the specimen surface, the thermal energy melted the surface and to make a nano-scale hot processing. However, the bad quality for the specimen is often yielded. Because the heat flux flown on the surface and the melting depth are difficult to accurately control during processing. Therefore, this project presents an inverse method for improving the problems. The heated cantilever probe with an unknown heat flux is considered as a one-dimensional inverse heat conduction problem firstly. The heat flux can be determined by using the available temperature measurements. The estimated heat flux flows into the specimen surface and then it is melted and divided into two layers of the solid and the liquid states. Then the two-layer materials are also regarded as an inverse heat conduction problem for determining the interface between the solid and the liquid. The procedures for the study are to establish the mathematical models of inverse heat conduction problems for the probe and the material firstly. Next, the conjugate gradient method is applied to treat the inverse problems; the method includes the following processes: the direct problem, the sensitivity problem, the adjoint problem, the gradient equation and the convergent condition. It is believed that the study can contribute to upgrade the technique for ultraprecision processing and to improve the quality for the products.

Keywords: Inverse heat conduction problem; Scanning thermal microscope; Solid-liquid interface; Heat flux.

二、緣由與目的

由於資訊產業持續蓬勃的發展，使得數據、文字或影音等資料的大量儲存變得非常重要；而奈米科技的發展，對於資料儲存技術亦產生重大的影響，如何製造出原子級的資料儲存方式，已成為研究者共同的目標，目前大多以 AFM 懸臂探針做為讀寫或儲存資料之工具，其中最著名者為 1986 年諾貝爾物理獎得主之一的 Binnig 和他的研究群 [1-2]，最近研發的奈米硬碟 (nanodrive) 即是以 AFM 懸臂探針針尖加熱後在 PMMA 聚合物上作重複讀寫的動作，但目前此一技術還在起步階段，尚有很大的發展空間。研究微/奈米結構之熱物理性質一般常使用之儀器為原子力顯微鏡懸臂探針增加熱阻調節薄膜或熱電偶而成的掃描熱顯微鏡 (Scanning Thermal Microscope, SThM)。掃描熱顯微鏡可同時得到奈米級之表面形貌和熱影像解析度。此一微熱加工技術，可應用於極大容量或極高密度記憶體之資料儲存。掃描熱顯微鏡除了可得到奈米級表面形貌解析度外亦可獲得奈米級材料表面熱影像解析度。近幾年，由於奈米科技逐漸應用在各個產業中，而材料之熱物理性質，如導熱性、溫度、熱流量等會影響這些材料之力學、光電等性質，因此掃描熱顯微鏡為奈米級材料熱物理性質之重要工具。不過這方面之研究仍不多；1997 年，Lou 等人 [3] 研究掃描熱顯微鏡之探針與試件間之熱傳機制，並探討在不同工作環境中所量測熱影像之差異；1998 年，Fiege 等人 [4] 利用掃描熱顯微鏡研究電路之失效分析；2000 年，Gorbunov 等人 [5] 研究不同聚合物之熔點和玻璃轉換點；2001 年 Gomes 等人 [6] 探討探針和試件間之熱阻抗；Tsukruk 等人 [7] 以掃描熱顯微鏡研究多種聚合物之熱物理性質；近一年來，絕大部分的學者還是利用掃描熱顯微鏡研究不同材料之熱物理性質為主 [8-10]；最近，Fang 和 Chang [11] 首先提出利用掃描熱顯微鏡做微熱奈米加工。

在微熱加工期間，當較高溫度之探針將熱量傳遞至試件時，熱探針尖流至試件之熱通量會隨著探針與試件間之溫度差和其間之熱阻抗而改變，導致試件溫度不易有

效控制；而且當熱通量流過試件表面時會導致試件熔化，此熔化深度亦無法掌握，因而往往影響加工品質。本計畫提出利用逆算法來控制熱通量和預測加工熔化深度，以提升掃描熱顯微鏡微熱奈米加工之品質。

本計畫首次提出利用逆算法計算由原子力顯微鏡修改而成的掃描熱顯微鏡微熱加工時之熱通量和熔化深度；其目的在建立高解析度顯微鏡加工之量測系統，提升加工品質，增廣掃描熱顯微鏡在奈米科技上之應用；利用原子力顯微鏡探針針尖沉積一組金鎳熱電偶而成的掃描熱顯微鏡來做奈米加工，並改進加工時熱通量和加工熔化深度不易控制所遭遇的問題，因此擬利用逆算法來有效預測，以提升微熱奈米加工品質。本計畫以共軛梯度法 (Conjugated gradient method) 來處理逆算問題，早期 Alifanov [12-13] 以共軛梯度法分析線性和非線性之熱傳問題，由於共軛梯度法是依上一次迭代所得之遞減方向值作為下一次之搜尋方向，故可快速且精確的得到預測值。因此，後來許多研究者常利用此一方法來處理逆算問題，例如 Ozisik 等人 [14-16]，Huang 等人 [17-19] 和 Chang 等人 [20-22] 即以此種方法做了許多逆算工程問題之研究。

三、結果與討論

本計畫利用逆算法預測掃描熱顯微鏡 (SThM) 懸臂探針微熱奈米加工時之熱通量和熔化深度，如圖一所示。當較高溫度之探針將熱量傳遞至試件時，熱探針尖流至試件之熱通量 q 會隨著探針與試件間之溫度差和熱阻抗而改變，因此假設 q 為時間的函數。當熱通量流過試件表面時會導致試件熔化，因而產生微熱加工；通常熱通量 $q(t)$ 和熔化深度 $Z(t)$ 不易量測得知，因此本計畫利用逆算法來預測這兩個影響加工品質的重要參數。並將加工系統分為探針和試件兩部分，分別寫出其逆算法之熱傳方程式：包含：直接問題、靈敏性問題、伴隨問題、梯度方程式和收斂條件。直接問題 (Direct problem)

探針部分:

$$\frac{\partial^2 T_p(x,t)}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha_p} \frac{\partial T_p(x,t)}{\partial t}, 0 \leq x \leq L \quad (1a)$$

$$\frac{\partial T_p(x,t)}{\partial x} = 0, \quad x = 0 \quad (1b)$$

$$k_p \frac{\partial T_p(x,t)}{\partial x} = q(t), \quad x = L \quad (1c)$$

$$T_p(x,t) = T_{p0}, \quad t = 0 \quad (1d)$$

試件部分

$$\frac{\partial^2 T_l(z,t)}{\partial z^2} = \frac{1}{\alpha_l} \frac{\partial T_l(z,t)}{\partial t}, 0 \leq z \leq Z(t) \quad (2a)$$

$$\frac{\partial^2 T_s(z,t)}{\partial z^2} = \frac{1}{\alpha_s} \frac{\partial T_s(z,t)}{\partial t}, Z(t) \leq z \leq \infty \quad (2b)$$

$$T_l(z,t) = T_s(z,t) = T_m, \quad z = Z(t) \quad (2c)$$

$$k_l \frac{\partial T_l(z,t)}{\partial z} = k_s \frac{\partial T_s(z,t)}{\partial z} - \rho_s \Gamma \frac{dZ(t)}{dt}, \quad z = Z(t) \quad (2d)$$

$$-k_l \frac{\partial T_l(z,t)}{\partial z} = q(t), \quad z = 0 \quad (2e)$$

$$T_s(z,t) = T_{s0}, \quad z \rightarrow \infty \quad (2f)$$

$$T_s(z,t) = T_{s0}, \quad t = 0 \quad (2g)$$

$$Z(t) = 0, \quad t = 0 \quad (2h)$$

式中 T 為溫度，而其下標 l 和 s 分別代表液相和固相試件， p 則為探針； Γ ， ρ ， k 和 α 分別代表熔化潛熱，密度，導熱性和熱擴散性； T_{p0} 和 T_{s0} 分別表示探針和固相試件之初始溫度； T_m 為固液界面溫亦是試件之熔點；當熱通量 $q(t)$ 和熔化深度 $Z(t)$ 已知時，則(1)(2)兩式可利用 Duhamel's 理論求得探針和試件兩部分之溫度分佈。

靈敏度問題(Sensitivity problem)

$$\frac{\partial^2 \Delta T_p(x,t)}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha_p} \frac{\partial \Delta T_p(x,t)}{\partial t}, 0 \leq x \leq L \quad (3a)$$

$$\frac{\partial \Delta T_p(x,t)}{\partial x} = 0, \quad x = 0 \quad (3b)$$

$$k_p \frac{\partial \Delta T_p(x,t)}{\partial x} = q(t), \quad x = L \quad (3c)$$

$$\Delta T_p(x,t) = 0, \quad t = 0 \quad (3d)$$

試件部分

$$\frac{\partial^2 \Delta T_l(z,t)}{\partial z^2} = \frac{1}{\alpha_l} \frac{\partial \Delta T_l(z,t)}{\partial t}, 0 \leq z \leq Z(t) \quad (4a)$$

$$\frac{\partial^2 \Delta T_s(z,t)}{\partial z^2} = \frac{1}{\alpha_s} \frac{\partial \Delta T_s(z,t)}{\partial t}, Z(t) \leq z \leq \infty \quad (4b)$$

$$\Delta T_l(z,t) = \Delta T_s(z,t) = \Delta T_m, \quad z = Z(t) \quad (4c)$$

$$k_l \frac{\partial \Delta T_l(z,t)}{\partial z} = k_s \frac{\partial \Delta T_s(z,t)}{\partial z} - \rho_s \Gamma \frac{dZ(t)}{dt}, \quad z = Z(t) \quad (4d)$$

$$-k_l \frac{\partial \Delta T_l(z,t)}{\partial z} = \Delta q(t), \quad z = 0 \quad (4e)$$

$$\Delta T_s(z,t) = 0, \quad z \rightarrow \infty \quad (4f)$$

$$\Delta T_s(z,t) = 0, \quad t = 0 \quad (4g)$$

$$Z(t) = 0, \quad t = 0 \quad (4h)$$

伴隨問題(adjoint problem)和梯度方程式 (gradient equation)

探針部分:

$$\frac{\partial^2 \lambda_p(x,t)}{\partial x^2} + \frac{1}{\alpha_p} \frac{\partial \lambda_p(x,t)}{\partial t} = 0 \quad (5a)$$

$$\frac{\partial \lambda_p(x,t)}{\partial x} = 0 \quad (5b)$$

$$k_p \frac{\partial \lambda_p(0,t)}{\partial x} = 2[T_p(0,t) - T_p^*(0,t)] \quad (5c)$$

$$\lambda_p(x, t_f) = 0 \quad (5d)$$

試件部分:

$$\frac{\partial^2 \lambda_l(z,t)}{\partial z^2} + \frac{1}{\alpha_l} \frac{\partial \lambda_l(z,t)}{\partial t} = 0 \quad (6a)$$

$$\frac{\partial^2 \lambda_s(z,t)}{\partial z^2} + \frac{1}{\alpha_s} \frac{\partial \lambda_s(z,t)}{\partial t} \quad (6b)$$

$$+ 2[T_s(d,t) - T_s^*(d,t)] \delta(z-d) = 0$$

$$\lambda_l(Z,t) = \lambda_s(Z,t) = \lambda(Z,t)$$

(6c)

$$k_l \frac{\partial \lambda_l(Z,t)}{\partial z} = k_s \frac{\partial \lambda_s(Z,t)}{\partial z}$$

(6d)

$$k_l \frac{\partial \lambda_l(0,t)}{\partial z} = 2[T_l(0,t) - T_l^*(0,t)] \quad (6e)$$

$$\lambda_s(\infty, t) = 0 \quad (6f)$$

$$\lambda_l(z, t_f) = 0 \quad (6g)$$

$$\lambda_s(z, t_f) = 0 \quad (6h)$$

式中 λ 為伴隨函數； $T_p^*(0,t)$ 為探針在 $x=0$ 之量測溫度； $T_l^*(0,t)$ 和 $T_s^*(d,t)$ 分別為試

件在液相 $z=0$ 和固相 $z=d$ 之量測溫度； t_f 為量測終了之時間。

未知函數 $q(t)$ 和 $Z(t)$ 決定，是基於下列函數之最小值得到的：

$$J(q(t)) = \int_0^{t_f} [T_p(0,t) - T_p^*(0,t)]^2 dt \quad (7a)$$

$$J(Z(t)) = \int_0^{t_f} \left\{ \begin{aligned} & [T_l(0,t) - T_l^*(0,t)]^2 \\ & + [T_s(d,t) - T_s^*(d,t)]^2 \end{aligned} \right\} dt \quad (7b)$$

梯度方程式 (gradient equation) 分別為：

$$J'_q(t) = -\frac{\lambda_p(L,t)}{k_p} \quad (8a)$$

$$J'_Z(t) = -\lambda(Z,t) \frac{\rho_s \Gamma}{\Delta Z} \frac{d(\Delta Z)}{dt} \quad (8b)$$

收斂條件 (converge condition)

$$J(q^{K+1}) \leq \varepsilon_1 \quad (9a)$$

$$J(Z^{K+1}) \leq \varepsilon_2 \quad (9b)$$

式中 ε_1 和 ε_2 為給定之微小值。

前進步距

求解未知函數 $q(t)$ 和 $Z(t)$ 是基於函數 $J(q)$ 和 $J(Z)$ 之最小化，其迭代規則為

$$q^{K+1} = q^K - \beta_q^K P_q^K, K = 0, 1, 2, \dots \quad (10a)$$

$$Z^{K+1} = Z^K - \beta_Z^K P_Z^K, K = 0, 1, 2, \dots \quad (10b)$$

式中

β^K : 第 K 次迭代的前進步距 (search step size)

P^K : 第 K 次迭代的方向值

而且

$$P_q^K = J'_q{}^K + \gamma_q^K P_q^{K-1}, K = 1, 2, 3, \dots \quad (11a)$$

$$P_Z^K = J'_Z{}^K + \gamma_Z^K P_Z^{K-1}, K = 1, 2, 3, \dots \quad (11b)$$

式中 γ^K 為第 K 次之共軛係數 (conjugate coefficient)，其由下式決定：

$$\gamma_q^K = \frac{\int_0^{t_f} [J'_q{}^K(t)]^2 dt}{\int_0^{t_f} [J'_q{}^{K-1}(t)]^2 dt}, \quad \text{with } \gamma_q^0 = 0 \quad (12a)$$

$$\gamma_Z^K = \frac{\int_0^{t_f} [J'_Z{}^K(t)]^2 dt}{\int_0^{t_f} [J'_Z{}^{K-1}(t)]^2 dt}, \quad \text{with } \gamma_Z^0 = 0$$

(12b)

第 K 次迭代的前進步距 β^K 由下式決定：

$$\beta_q^K = \frac{\int_0^{t_f} \Delta T_p(P_q^K) [T_p(q^K) - T_p^*] dt}{\int_0^{t_f} [\Delta T_p(P_q^K)]^2 dt} \quad (13a)$$

$$\beta_Z^K = \frac{\int_0^{t_f} \left\{ \Delta T_l(P_Z^K) [T_l(Z^K) - T_l^*] + \Delta T_s(P_Z^K) [T_s(Z^K) - T_s^*] \right\} dt}{\int_0^{t_f} \left\{ [\Delta T_l(P_Z^K)]^2 + [\Delta T_s(P_Z^K)]^2 \right\} dt} \quad (13b)$$

利用上述逆算理論推導以及配合溫度量測 (圖二為加工工件 PMMA 溫度分佈圖，圖三為其加工熔化深度影像圖) 可求得掃描熱顯微鏡微熱加工之熱通量和熔化深度。

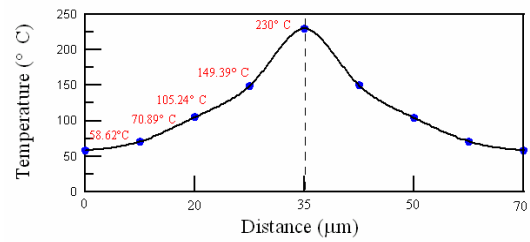
四、計畫成果自評

本計畫經過一年來有關人員的努力，已獲得預期的成果，該研究部分成果已於今年 (2006) 八月為國際著名物理期刊 Journal of Applied Physics 所接受，即將刊出；另外部分成果也已投至國際著名熱學期刊 International Journal of Heat and Mass Transfer，目前正在審核中。

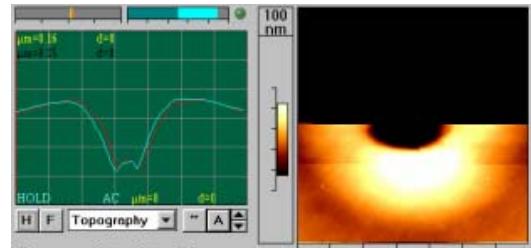
參考文獻

- [1] G. Binnig et al., IEEE Transactions on Nanotechnology, 1,39 (2002).
- [2] P. Vettiger and G. Binnig, Scientific American 288, 46 (2003).
- [3] K. Lou, Z. Shi, J. Varesi and A. Majumdar, J. Vac. Sci. Technol. B 15(2), 349 (1997).
- [4] G. B. M. Fiege et al., Microelectron. Reliab. 39, 937 (1999).
- [5] V. V. Gorbunov, N. Fuchigami, V. V. Tsukruk, High Perform. Polym. 12, 603 (2000).
- [6] S. Gomes et al., Int. J. Therm. Sci. 40, 949 (2001).
- [7] V. V. Tsukruk, V. V. Gorbunov and N. Fuchigami, Thermochim. Acta 395, 151 (2003).
- [8] F. A. Guo, N. Trannoy and J. Lu, Mater. Sci. Eng. A369, 36(2004).

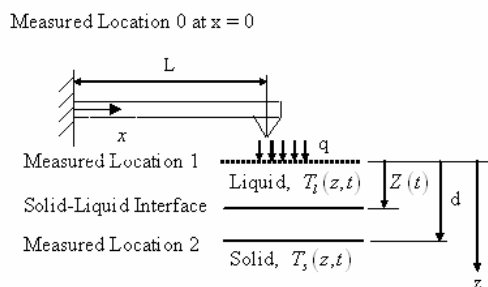
- [9]F. A. Guo, K. Y. Zhu, N. Trannoy and J. Lu, *Thermochim. Acta* 419, 239(2004).
- [10]F. Depasse, Ph. Grossel and N. Trannoy, *Superlattice. Microst.* 35, 269(2004).
- [11]T.H. Fang and W.J. Chang, *Appl. Surf. Sci.* 240, 312(2005).
- [12]O.M. Alifanov, *J. Eng. Phys.* 25, 471 (1974).
- [13]O.M. Alifanov, *Inverse Heat Transfer Problem*, Springer-Verlag, New York (1994).
- [14]G.P. Flach and M.N. Ozisik, *Numer. Heat Tran. B* 24, 455 (1993).
- [15]H.R.B. Orlande and M.N. Ozisik, *J. Thermophys. Heat Tran.* 17(2) 319 (1993).
- [16]F.B. Liu and M.N. Ozisik, *J. Franklin I.* 333(4), 583 (1996).
- [17]C.H. Huang and C.W. Chen, *Int. J. Numer. Meth. Eng.* 42, 943 (1998).
- [18]C.H. Huang and S.P. Wang, *Int. J. Heat Mass Tran.* 42, 3387 (1999).
- [19]C.H. Huang and C.Y. Yeh, *Int. J. Heat Mass Tran.* 45, 4643 (2002).
- [20]W.J. Chang and C.I. Weng, *Int. J. Heat Mass Tran.* 42, 2661 (1999).
- [21]W.J. Chang, T. H. Fang, and C. I. Weng, *Nanotechnology* 15, 427 (2004).
- [22]Y.C. Yang, S. S. Chu, and W.J. Chang, *J. Appl. Phys.* 95(9), 5159 (2004).



圖二. 加工工件 PMMA 溫度分佈圖



圖三. PMMA 工件加工熔化深度影像圖



圖一. 逆算法計算掃描熱顯微鏡微熱加工之熱通量和熔化深度示意圖