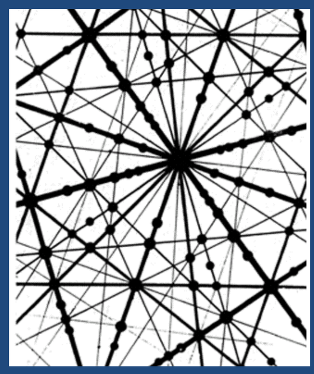
Моделирование тепловых процессов, возникающих в материалах под действием лазерных импульсов в рамках гиперболической модели термического пика

И.В. Амирханов, И. Сархадов, З. К. Тухлиев

[1]*Лаборатория информационных технологий, Объединенный Институт Ядерных Исследований,*
ул. Жолио-Кюри 6, Дубна, Московская область, Россия, 141980

**E-mail: ibrohim@jinr.ru*



Аннотация

Одной из широко принимаемых моделей для описания процессов, протекающих при взаимодействии заряженных частиц с материалами, является модели термического пика (МТП), базирующаяся на системе двух связанных уравнений теплопроводностей для электронного газа и кристаллической решетки (система параболических уравнений). В работе предложена модификация МТП, базирующаяся на системе двух связанных гиперболических уравнений теплопроводности. Действие лазера в электронном газе, учтено через функцию источника, которую выбрали в виде двойного фемтосекундного лазерного импульса. В гиперболическом уравнении в отличие от параболического, присутствует дополнительные параметры, которые характеризует времена релаксации потока тепла в электронном газе и кристаллической решетки. Кроме этого, в источнике гиперболического уравнения присутствует дополнительные слагаемые–производные от плотности мощности источника параболического уравнения и от разности температур электронного газа и кристаллической решетки. Это означает, что на температуру образца оказывает влияние не только плотность мощности источника, но и скорости его изменения. Кроме этого, на температуру образца также влияет скорости изменения разности температур электронного газа и кристаллической решетки. Проведено численное исследование решений параболического и гиперболического уравнений модели термического пика при одинаковых физических параметрах и проведен сравнительный анализ полученных результатов.

Введение

Исследование взаимодействия фемтосекундных лазерных импульсов с веществом является важным в связи с многими фундаментальными проблемами (физика неравновесных процессов, генерация ударных волн, лазерное ускорение ионов, модификации свойств облучаемого материала и т.д.) [1-3].

В настоящее время, возрастает необходимость в создании и совершенствовании достоверных физических моделей, способных описывать различные процессы в веществе. При этом компьютерное моделирование занимает сейчас одно из главных мест в исследовании таких задач. Существуют два подхода исследования и создания физических моделей–атомический и континуальный.

Атомистические подходы (метод молекулярной динамики), которые позволяют естественным образом учитывать атомарную структуру кристаллической решетки, влияние примесей, наличие дислокаций, кинетику фазовых переходов и т.д. Континуальный подход (решение уравнений механики сплошных сред) - это параболическое и гиперболическое уравнения теплопроводности, двухтемпературная модель теплопроводности, двухтепературная гидродинамическая модель и т.д. [2].

Для описания динамики быстропротекающих процессов, возникающих в веществе под воздействием лазерного импульса можно использовать метод молекулярной динамики (МД) [4]. МД довольно эффективна для микроскопического анализа механизмов плавления и испарения [5,6]. Возникновение и распространение волн давления, сгенерированных лазерным излучением [7,8], а также динамики лазерной абляции [9] хорошо моделируются с помощью МД.

В работе проведено численное исследование физических процессов, возникающих при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов в рамках параболического и гиперболического уравнений теплопроводности (МТП) и проведен сравнительный анализ полученных результатов.

Постановка задачи

При моделировании тепловых процессов, возникающих в материалах под воздействием фемтосекундных лазерных импульсов, следуя работе [1], модифицируем МТП:

$$C_e\frac{\partial T_e}{\partial t}=-\frac{\partial q_e}{\partial x}-\gamma(T_e-T_i)+A_e(x,t);\ q_e+\tau_e\frac{\partial q_e}{\partial t}=-\lambda_e\frac{\partial T_e}{\partial x}\qquad(1)$$

$$C_i\frac{\partial T_i}{\partial t}=-\frac{\partial q_i}{\partial x}+\gamma(T_e-T_i)+A_i(x,t);\ q_i+\tau_i\frac{\partial q_i}{\partial t}=-\lambda_i\frac{\partial T_i}{\partial x}\qquad(2)$$

Здесь T_e, T_i–температурные поля электронного газа и кристаллической решетки облучаемого образца, C_e, C_i, λ_e, λ_i–соответственно удельные теплоемкости и коэффициенты теплопроводности электронного газа и кристаллической решетки, γ–коэффициент электрон-фононного взаимодействия электронной подсистемы с решеткой; $A(x,t)$–функция источника, которая определяет плотность мощности тепловыделения в точке с координатой x в момент времени t, τ_e, τ_i–характерные времена релаксации потоков энергии в электронном газе и кристаллической решетки.

При $\tau_e=\tau_i=0$ данная модель переходит в МТП. Полагая теплоемкости и теплопроводности электронного газа и кристаллической решетки не зависящими от температуры, т.е. как константы, после исключения потоков искомая система уравнений (1)-(2) принимает следующий вид:

$$C_e\Big(\frac{\partial T_e}{\partial t}+\tau_e\frac{\partial^2 T_e}{\partial t^2}\Big)=\lambda_e\frac{\partial^2 T_e}{\partial x^2}-\gamma(T_e-T_i)-\gamma\tau_e\frac{\partial}{\partial t}(T_e-T_i)+A_e(x,t)+\tau_e\frac{\partial A_e(x,t)}{\partial t}\qquad(3)$$

$$C_i\Big(\frac{\partial T_i}{\partial t}+\tau_i\frac{\partial^2 T_i}{\partial t^2}\Big)=\lambda_i\frac{\partial^2 T_i}{\partial x^2}+\gamma(T_e-T_i)+\gamma\tau_i\frac{\partial}{\partial t}(T_e-T_i)+A_i(x,t)+\tau_i\frac{\partial A_i(x,t)}{\partial t}\qquad(4)$$

Слагаемые $\tau_\alpha\partial A_\alpha(x,t)/\partial t$, $\gamma\tau_\alpha\partial(T_e-T_i)/\partial t$, $\alpha=e,i$ означают, что на температурные поля оказывают влияния не только источники, но и влияют скорость изменения источника и скорость обмена энергией электрон-фононного взаимодействия электронной подсистемы с решеткой.

Уравнение (3)-(4) решим со следующими начальными и граничными условиями:

$$T_\alpha(x,0)=T_0;\ \frac{\partial T_\alpha(x,t)}{\partial t}\Big|_{t=0}=0;\ \frac{\partial T_\alpha(x,t)}{\partial x}\Big|_{x=0}=0;\ T_\alpha(x_{max},t)=T_0,\ \alpha=e,i.\qquad(5)$$

Функции источников выбираем в факторизованном виде:

$$A_\alpha(x,t)=I_0[1-R(T_s)]f_1(x)f_2(t)p_\alpha,\ \alpha=e,i;\ T_s=T_i(0,t),\ p_i=1-p_e.$$

Здесь $f_1(x)$, $f_2(t)$–соответственно пространственная и временная формы источника, I_0–интенсивность источника, $R(T_s)$–коэффициент отражения лазерного импульса от поверхности материала, p_e, p_i–соответственно доли потери энергии лазера в электронном газе и кристаллической решетке.

В данной работе функции $f_1(x)$ и $f_2(t)$ выбраны как в работе [1]:

$$f_1(x)=\frac{exp(-x/L_p)}{L_p},\ f_2(t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\Big(exp\Big[-\frac{(t-t_0)^2}{2\sigma_t^2}\Big]+exp\Big[-\frac{(t-t_0-\tau_d)^2}{2\sigma_t^2}\Big]\Big).$$

Здесь L_p–глубина проникновения лазера в вещество, t_0–момент времени, когда первый импульс источника принимает максимальное значение, τ_D–сдвиг по времени второго импульса источника по отношению первого импульса. Доза излучения $\Phi=I_0\int_0^\infty f_2(t)dt=2I_0\sigma_t$.

Численный эксперимент и обсуждение его результатов

Численный эксперимент проведены для материала никеля, облучаемого лазером двойного импульса со следующими параметрами:

$$\lambda_i=91\ \frac{\text{Вт}}{\text{Км}},\ \rho_i=4560\ \frac{\text{кг}}{\text{м}^3},\ c_i=500\ \frac{\text{Дж}}{\text{кгК}},\ x_{max}=3\cdot10^{-7}\ \text{м},\ T_0=300\ \text{К},$$

$$R(T_s)=0,\ C_i=\rho_i c_i=2,28\cdot10^6\ \frac{\text{Дж}}{\text{Км}^3},\ \lambda_e=200\ \frac{\text{Вт}}{\text{Км}},\ C_e=27330\ \frac{\text{Дж}}{\text{Км}^3},\ L_p=3\cdot10^{-8}\ \text{с}$$

$$\gamma=2.733\cdot10^{18}\ \frac{\text{Дж}}{\text{Км}^3},\ \Phi=4\cdot10^4\ \frac{\text{Дж}}{\text{м}^2},\ \sigma_t=5\cdot10^{-16}\ \text{с},\ t_0=3\cdot10^{-15}\ \text{с},\ \Delta x=3\cdot10^{-8}\ \text{м},$$

$$\Delta t=10^{-14}\ \text{с},\ \tau_d=4\cdot10^{-15}\text{с},\ \tau_e=10^{-14}\ \text{с},\ \tau_i=10^{-12}\ \text{с},\ p_i=0.$$

При этих параметрах безразмерные константы k_e, k_i, γ_e, γ_i, A_{0e}, A_{0i}, β, $\bar\tau_e$, $\bar\tau_i$ принимают значения: $k_e\simeq4.437\cdot10^{-4}$; $k_i\simeq8.13\cdot10^{-2}$; $\gamma_e=1$; $\gamma_i\simeq1.199\cdot10^{-2}$; $A_{0e}\simeq1626214.579$; $A_{0i}\simeq19493.1774$; $\beta=1$; $\bar\tau_e=1$; $\bar\tau_i=100$.

На рис. 1-3 приведены численные результаты для температур электронного газа и кристаллической решетки в рамках МТП, и для температуры кристаллической решетки в рамках уравнения теплопроводности.

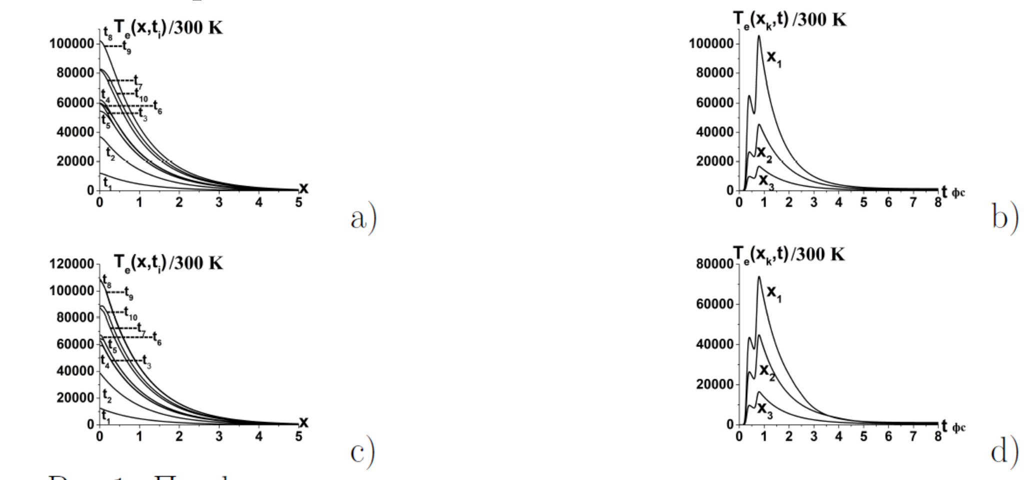


Рис.1. Профили температуры электронного газа в разных моментах времени $T_e(x,t_j)$, $j=1,2,\cdots,10$, $t_1=2.5$ фс, $t_2=3$ фс, $t_3=3.5$ фс, $t_4=4.5$ фс, $t_5=5.5$ фс, $t_6=6.5$ фс, $t_7=7$ фс, $t_8=7.5$ фс, $t_9=8.5$ фс, $t_{10}=10$ фс, и динамика искомых температур на разных глубинах образца ($T_e(x_k,t)$, k=1,2,3. $x_1=1.5\ nm$, $x_2=3\ nm$, $x_3=6\ nm$), полученные в рамках МТП (a,b) и гиперболической МТП (c,d)

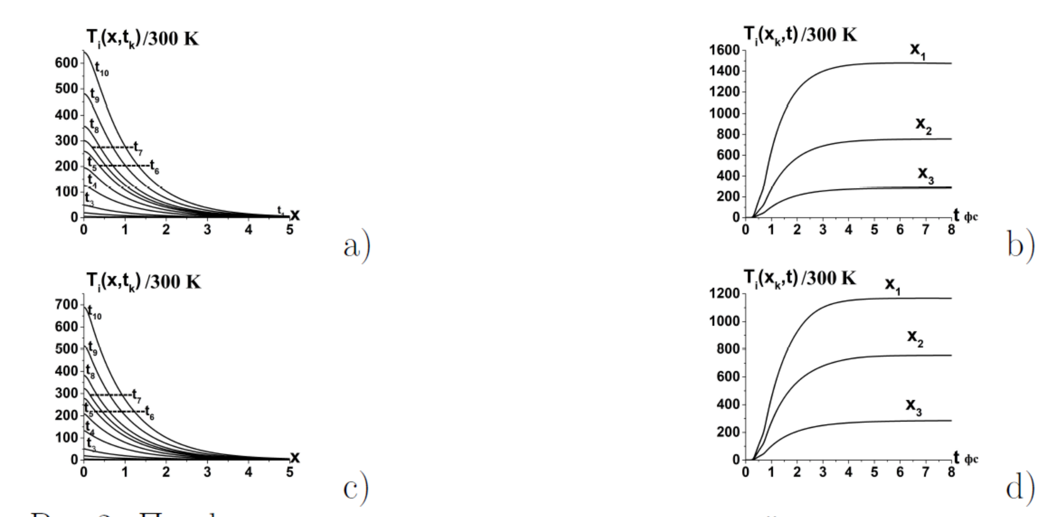


Рис.2. Профили температуры кристаллической решетки в разных моментах времени $T_i(x,t_j)$, $j=1,2,\cdots,10$, $t_1=2.5$ фс, $t_2=3$ фс, $t_3=3.5$ фс, $t_4=4.5$ фс, $t_5=5.5$ фс, $t_6=6.5$ фс, $t_7=7$ фс, $t_8=7.5$ фс, $t_9=8.5$ фс, $t_{10}=10$ фс, и динамика искомых температур на разных глубинах образца ($T_{e,i}(x_k,t)$, k=1,2,3. $x_1=1.5\ nm$, $x_2=3\ nm$, $x_3=6\ nm$), полученные в рамках МТП (a,b) и гиперболической МТП (c,d)

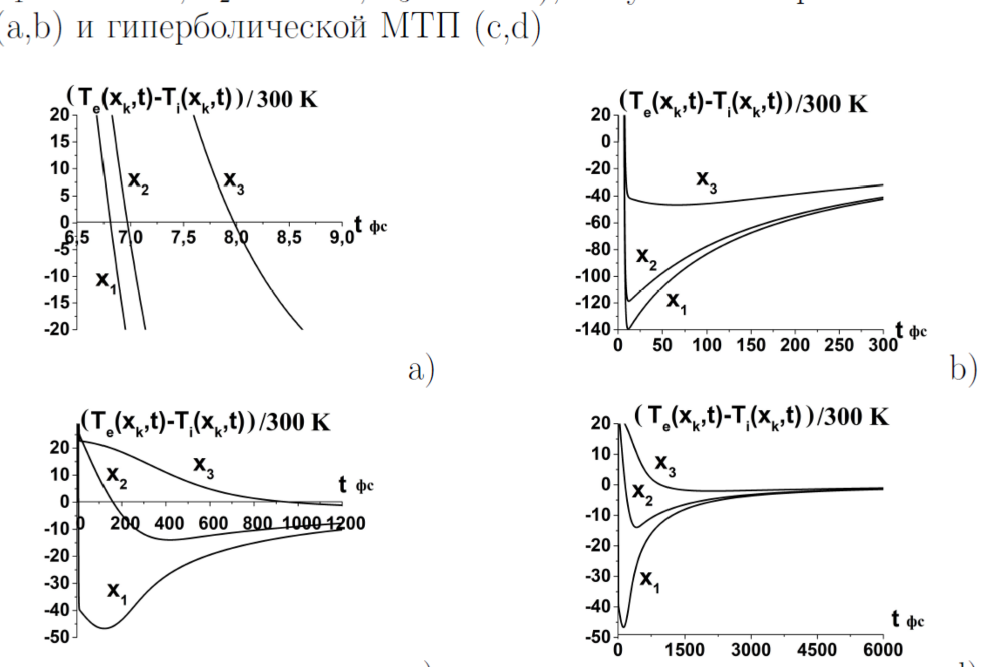


Рис.3. Динамика разности температур электронного газа и кристаллической решетки на разных глубинах образца ($T_e(x_k,t)-T_i(x_k,t)$, k=1,2,3. $x_1=0.3\ nm$, $x_2=0.6\ nm$, $x_3=1.5\ nm$), полученной в рамках МТП (a,b) и гиперболической МТП (c,d).

Заключение

В обеих моделях температура электронного газа вблизи поверхности образца в начале превышает температуру кристаллической решетки, но наступает момент времени, когда, температура кристаллической решетки будет превышать температуру электронного газа, а потом эта разность стремиться к нулю, т.е. обе температуры стремятся к начальной температуре образца. Поведения профилей температуры электронного газа и кристаллической решетки и их динамики на разных глубинах в обеих моделях сильно отличаются.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и МОКНСМ в рамках научного проекта № 20-51-44001.

Литература

1. Анисимов С.И., Лукьянчук Б.С. Избранные задачи теории лазерной абляции. УФН, 2002г., т. 172, №3, стр. 301-333.
2. Вейко В.П., Либенсон М.Н. Взаимодействие лазерного излучения с веществом. Силовая оптика. /Под ре. В.И. Конова. -- М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. --312с. -- ISNB 978-5-9221-0934-5.
3. И. Сархадов, И.В. Амирханов, Н.Р. Саркер Численное моделирование тепловых процессов, возникающих в материалах при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов в рамках гиперболической модели термического пика./Труды XI Всероссийской конференций ИТТММ-2021, Москва, РУДН, 19-23 апреля.