

Численное исследование влияния конечной толщины образца на лазерной абляции материалов

И.В. Амирханов¹, И. Сархадов¹, З. К. Тухлиев¹, Х. Гафуров²

¹Лаборатория информационных технологий, Объединенный Институт Ядерных Исследований, ул. Жоллио-Кюри 6, Дубна, Московская область, Россия, 141980

²Худжандский государственный университет имени академика Бободжана Гафурова, Худжанд, Таджикистан

*E-mail: ibrohim@jinr.ru



Аннотация

В предыдущих работах были проведены численное моделирование лазерной абляции материалов, возникающей под действием ультракоротких лазерных импульсов в полуограниченных образцах. Тепловой механизм лазерной абляции описывались в рамках одномерного нестационарного уравнения теплопроводности в системе координат, связанной с движущимся фронтом испарения. Действие лазера было учтено через функции источника в уравнении теплопроводности, задавая координатную и временную зависимости источника лазера. Были получены зависимости максимума температуры на поверхности образца и толщины слоя абляции от дозы излучения падающего лазерного импульса. Полученные результаты согласовались с результатами работ других авторов. В настоящей работе проведено аналогичное численное исследование в образцах конечной толщины. При этом абляция материала происходит не только с первой границей образца на которую падает лазерный импульс, но и со второй границей образца. Уравнение теплопроводности и граничные условия составлены с учетом этих эффектов. Приведены численные результаты моделирования в зависимости от толщины образца, толщины слоя абляции от дозы излучения падающего лазерного импульса.

Введение

В последние годы импульсная лазерная абляция [1-3] (любой процесс лазерно-стимулированного удаления вещества, включая эмиссию электронов) различных материалов привлекает все больший интерес с точки зрения фундаментальных исследований процессов в веществе в экстремальных условиях сверхбыстрого подвода энергии: речь идет о построении новой физической теории, описывающей сильно нелинейные эффекты.

Для детального анализа процессов в эксперименте требуется измерять различные характеристики процессов абляции с пико- и фемтосекундным временным разрешением, что само по себе является достаточно сложной задачей. Поэтому задача математического моделирования физических явлений в этой области становится чрезвычайно актуальной.

Процесс испарения математически описывают в рамках краевой задачи теплопроводности для конденсированной среды в системе координат, связанной с подвижной межфазной границей твердое тело-пар или расплав-пар, на которой происходит испарение. Если не учитывать боковой отвод энергии лазерного излучения за счет теплопроводности, что справедливо при жестком условии $v_0 \gg \sqrt{a_T \tau}$, где τ – продолжительность воздействия лазерного луча на материал, a_T – температуропроводность, v_0 – радиус пятна нагрева, то задача о движении границы испарения может быть рассмотрена в рамках одномерной модели [3].

Основные уравнения

Численное моделирование лазерной абляции материалов в образцах конечных размеров проведено на основе уравнения теплопроводности, с учетом перемещения обеих границ из-за испарения:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + A(x, t), h_1(t) < x < d - h_2(t) \quad (1)$$

$$T(x, 0) = T_0; 0 \leq x \leq d; \quad (2)$$

$$\lambda \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=h_1(t)} = L_{ev} \rho v_1 p h; \quad (3)$$

$$-\lambda \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=d-h_2(t)} = L_{ev} \rho v_2 p h; h_\alpha(t) = \int_0^t v_{\alpha p h}(t) dt; \quad (4)$$

где $c(T)$, $\lambda(T)$, $\rho(T)$ – соответственно удельная теплоемкость, теплопроводность и плотность материала при температуре $T(z, t)$, $h_1(t)$, $h_2(t)$ – соответственно глубины кратера на левой и правой поверхностях образца в момент времени t , d – начальная толщина образца $v_1 p h$, $v_2 p h$ – скорости перемещения границ из-за испарения, L_{ev} – удельная теплота сублимации. Зависимости $v_{ph}(T)$ и функция источника для разных моделей берутся по разному. В нашей работе зависимость $v_{ph}(T)$, $A(z, t)$ берем как в работе [2].

$$A(x, t) = I_0 A_s \alpha e^{-\alpha(x-h_1(t))} e^{-\alpha_g h_1(t)} e^{-t/t_1} / t_1, A_s = 1 - R(T_s). \quad (5)$$

Здесь I_0 – интенсивности лазера, $R(T_s)$ – коэффициент отражения лазера от поверхности образца, α , α_g – соответственно коэффициенты поглощения лазерного импульса в материале образца и в паре, доза облучения $\Phi = I_0 t_1$ ($t_1 = 6.13$ нс, $\alpha_g = 0.45\alpha$).

Для удобства численного моделирования в настоящей задаче, лучше перейти к задаче с фиксированными границами путем преобразования координат. При следующем преобразовании координат

$$z = \frac{x - h_1(t)}{D}, D = d - h_1(t) - h_2(t)$$

границы $x = h_1(t)$ и $x = d - h_2(t)$ переходят в $z = 0$ и $z = 1$.

Задача (1)-(5) при этой переменной принимает следующий вид:

$$\rho c \left[\frac{\partial T}{\partial t} - \frac{v_1 p h (1-z)}{D} - \frac{z v_2 p h}{D} \frac{\partial T}{\partial z} \right] = \frac{1}{D^2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) + A(z, t), 0 < z < 1; \quad (6)$$

$$A(z, t) = I_0 A_s \alpha e^{-\alpha z D} e^{-\alpha_g h_1(t)} e^{-t/t_1} / t_1.$$

$$T(z, 0) = T_0; 0 \leq z \leq 1; \quad (7)$$

$$\lambda \frac{\partial T(z, t)}{\partial z} \Big|_{z=0} = D L_{ev} \rho v_1 p h(T(0, t)); -\lambda \frac{\partial T(z, t)}{\partial z} \Big|_{z=1} = D L_{ev} \rho v_2 p h(T(1, t)). \quad (8)$$

При численном моделировании постановку задачи удобно изложить в безразмерных переменных. В данной системе уравнений переходим в безразмерные переменные и величины по формулам:

$$\bar{T} = \frac{T}{T_0}; \bar{\lambda}(\bar{T}) = \frac{\lambda(T)}{\lambda(T_0)}; C(\bar{T}) = \rho(T)c(T); \bar{C}(\bar{T}) = \frac{C(T)}{C(T_0)};$$

$$\bar{D} = \frac{D}{d}; \bar{t} = \frac{t}{t_0}; \bar{\xi}_\alpha = \frac{\xi_\alpha}{d}; \bar{v}_{\alpha p h} = \frac{v_{\alpha p h} t_0}{d}; \alpha = 1, 2;$$

$$k_0 = \frac{\lambda(T_0) t_0}{C(T_0) d^2}; A_1 = \frac{\rho d^2 L_{ev}}{\lambda(T_0) T_0 t_0}; \bar{A}(z, \bar{t}) = \frac{A(z, t) t_0}{C(T_0) T_0}.$$

$$\bar{C}(\bar{T}) \left[\frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{t}} - \frac{\bar{v}_1 p h (1-z)}{\bar{D}} - \frac{z \bar{v}_2 p h}{\bar{D}} \frac{\partial \bar{T}}{\partial z} \right] = k_0 \frac{1}{\bar{D}^2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\bar{\lambda}(\bar{T}) \frac{\partial \bar{T}}{\partial z} \right) + \bar{A}(z, \bar{t}), 0 < z < 1; \quad (9)$$

$$A(z, \bar{t}) = A_0 e^{-\alpha z \bar{D}} e^{-\alpha_g h_1(\bar{t})} e^{-\bar{t}/\bar{t}_1} / \bar{t}_1, A_0 = \frac{I_0 \alpha t_0}{T_0 C(T_0)},$$

$$\bar{T}(z, 0) = 1; 0 \leq z \leq 1; \quad (10)$$

$$\bar{\lambda}(\bar{T}) \frac{\partial \bar{T}(z, \bar{t})}{\partial z} \Big|_{z=0} = A_1 \bar{D} \bar{v}_1 p h(\bar{T}(0, \bar{t})); -\bar{\lambda}(\bar{T}) \frac{\partial \bar{T}(z, \bar{t})}{\partial z} \Big|_{z=1} = A_1 \bar{D} \bar{v}_2 p h(\bar{T}(1, \bar{t})). \quad (11)$$

Обсуждение численных результатов

В работе [2] решение задачи (1)-(4) проводилось методом моментов для материала полиимида. В нашей работе данная задача решалась с применением конечно-разностного метода явной схемы. Временную форму источника $f(t)$, температурную зависимость скорости перемещения границы из-за испарения $v_s(T)$, удельную теплоемкость $c(T)$ и теплопроводность $\lambda(T)$ взяты для материала полиимида, как и в работе [2]:

$$f(t) = \frac{t}{t_1} \exp\left(-\frac{t}{t_1}\right); t_1 = 6, 13 \text{ ns}, c(T) = 2550 - 1590 \cdot \exp\left[\frac{300 - T}{460}\right] \frac{J}{kgK},$$

$$\lambda(T) = 0, 155 \cdot (T/300)^{0,28} \frac{W}{mK}, v = v_0 e^{-T_a/T_s}, v_0 = 3 \cdot 10^4 \text{ m/s}; T_a = 15700 \text{ K}.$$

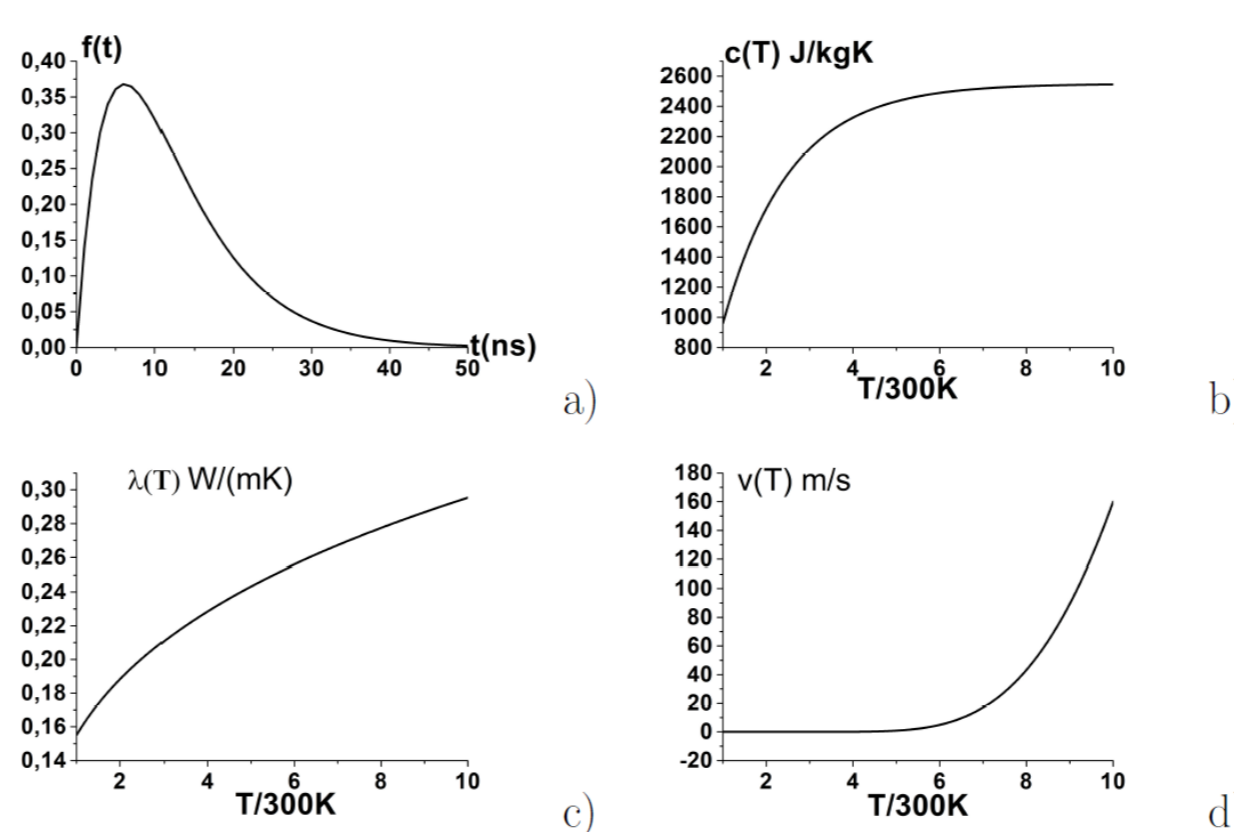


Рис.1. Временная форма источника $f(t)$, температурная зависимость удельной теплоемкости $c(T)$, коэффициента теплопроводности $\lambda(T)$ и скорости перемещения границы $v(T)$ из-за испарения.

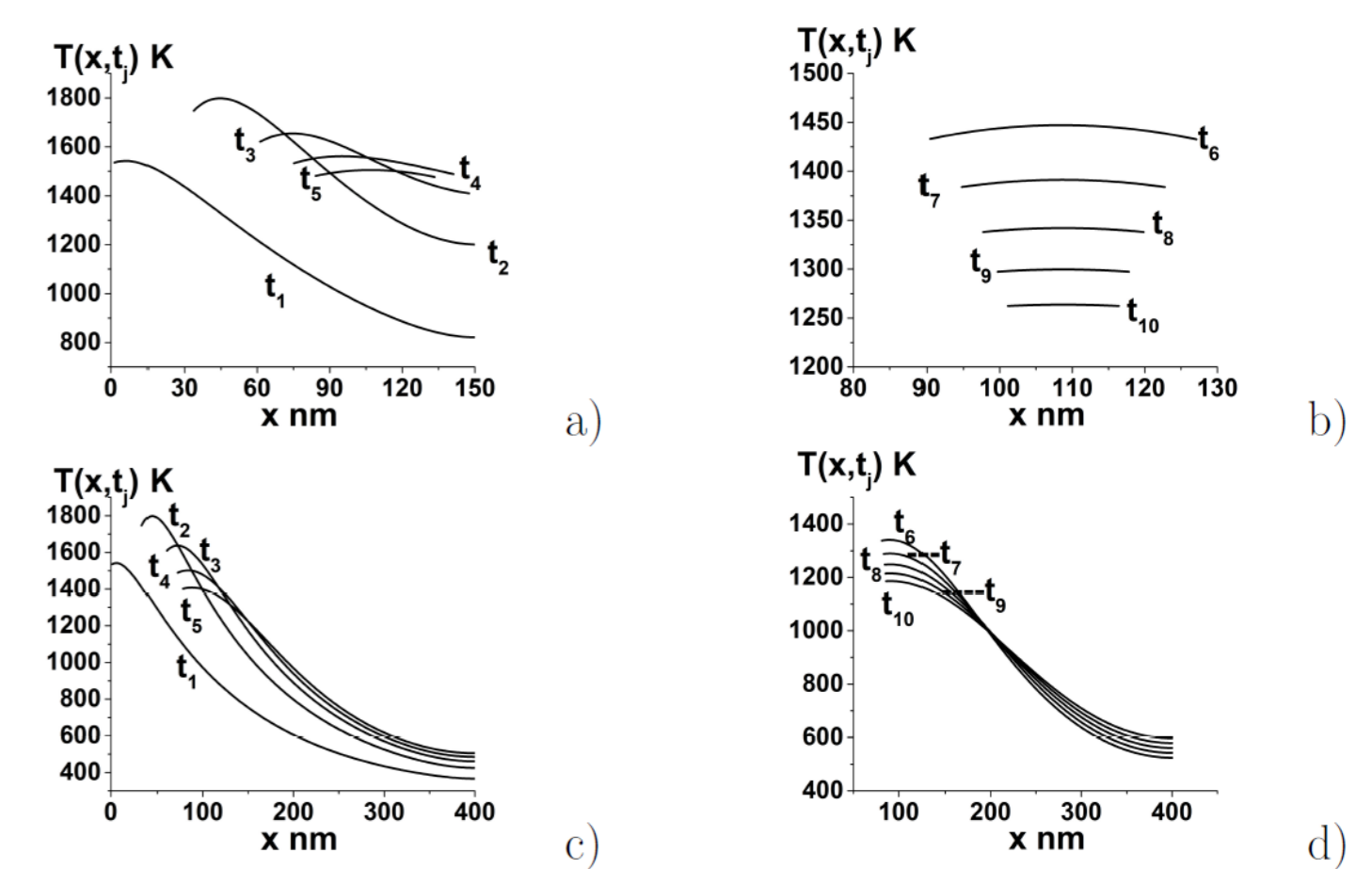


Рис.2. Динамики профилей температур при временах $t_i = i \cdot 10$ нс для образцов с толщинами $d_1 = 150 \text{ nm}$ (a,b) и $d_2 = 400 \text{ nm}$ (c,d)

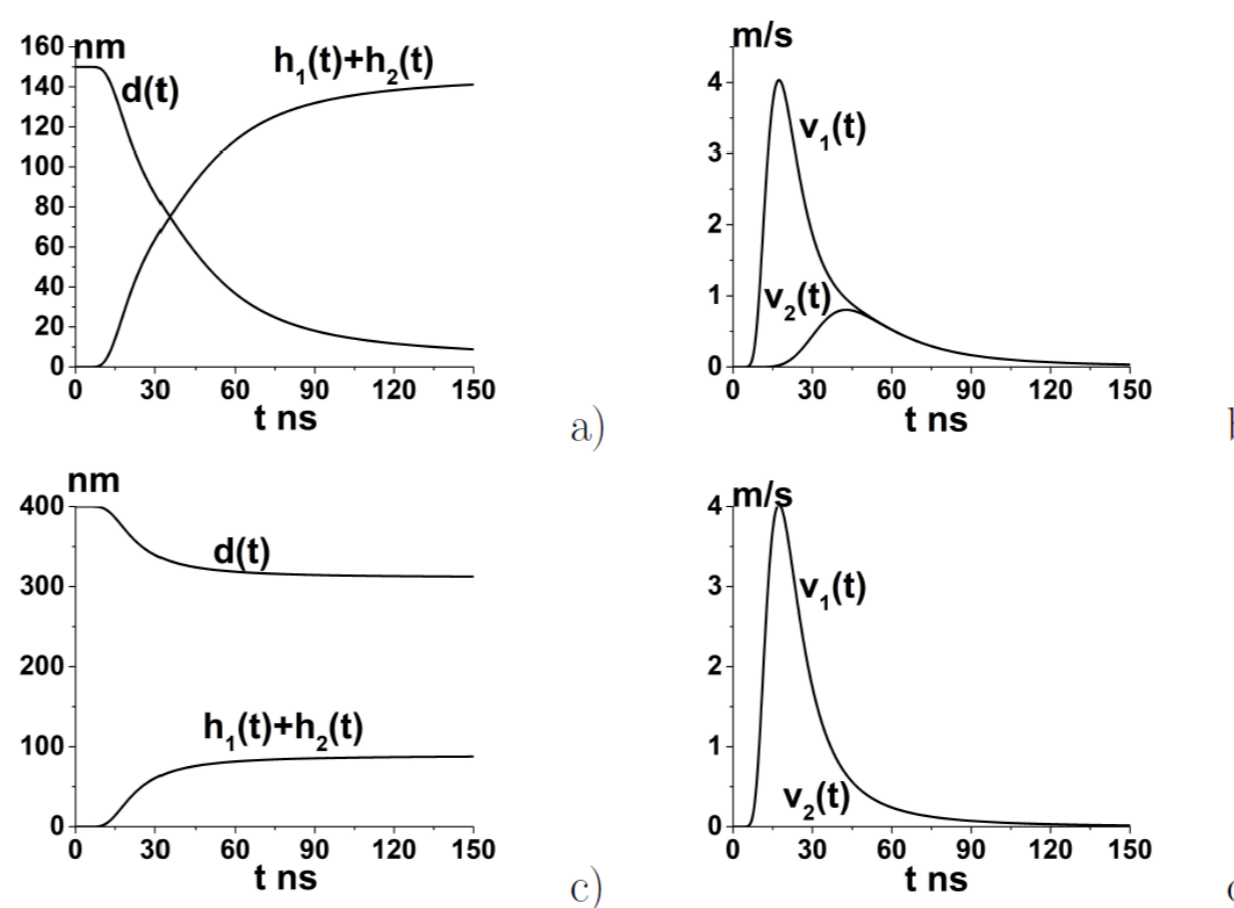


Рис.3. Динамики толщины образца и суммарной толщины смещений первой и второй границ, для образцов с толщинами $d_1 = 150 \text{ nm}$ (a,b) и $d_2 = 400 \text{ nm}$ (c,d)

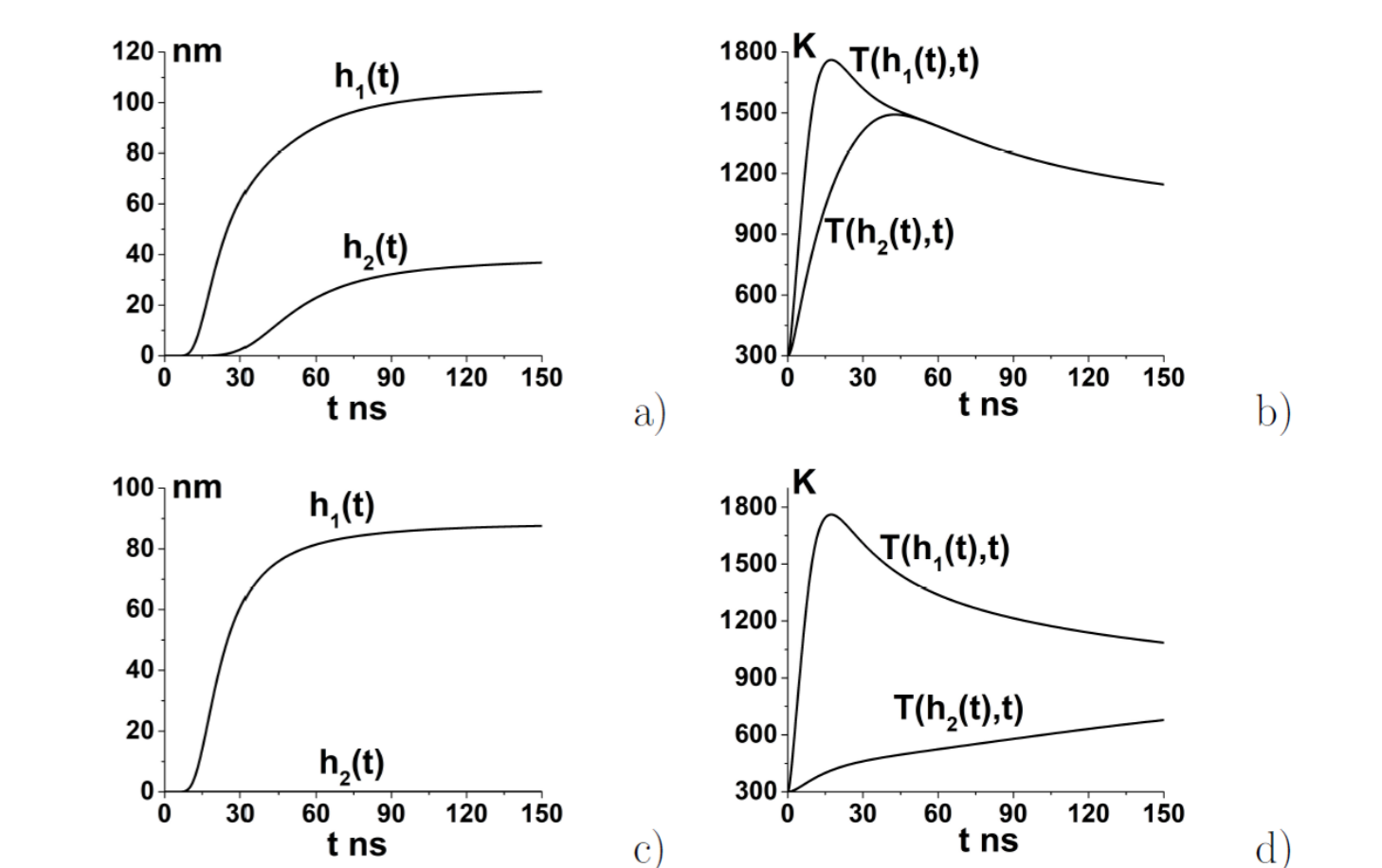


Рис.4. Динамики толщины слоев испарений и температур в первой и второй границах, для образцов с толщинами $d_1 = 150 \text{ nm}$ (a,b) и $d_2 = 400 \text{ nm}$ (c,d).

Заключение

В работе [4] численное моделирование лазерной абляции материалов было проведено для полуограниченных образцов. В настоящей работе предложена аналогичная постановка задачи для образцов конечной толщины. Планируется численным моделированием выявить влияния конечной толщины образца на его абляцию.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов № 19-01-00645а и № 20-51-44001 мон-га.

Литература

1. Фокин В.Б. Континуально-атоматическая модель и ее применение для численного расчета воздействия одиночного и двойного фемтосекундного лазерного импульса на металлы. Диссертация кандидата физико-математических наук, Москва-2017г.
2. Анисимов С.И., Лукьянчук Б.С. Избранные задачи теории лазерной абляции. УФН, 2002г., т. 172, №3, стр. 301-333.
3. Вейко В.П., Либенсон М.Н. Взаимодействие лазерного излучения с веществом. Силовая оптика. /Под ре. В.И. Конова. -- М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. --312с. -- ISBN 978-5-9221-0934-5.
4. Амирханов И.В., Саркер Н.Р., Сархадов И. Численное моделирование лазерной абляции материалов. Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science., ISSN:2658-4670, Изд.Российский университет дружбы народов. Vol. 28, N4, 2020y., ps. 398-405.