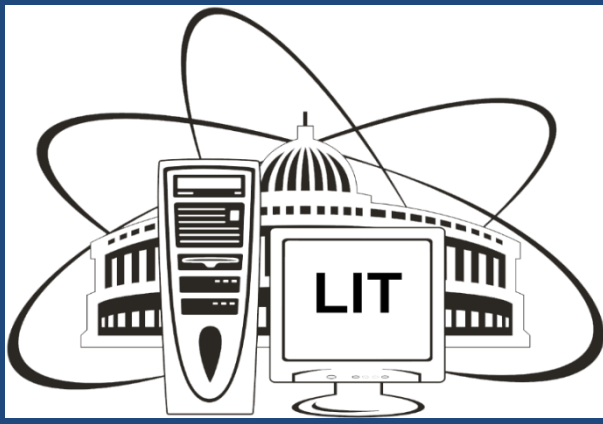




Численное моделирование стационарных волн лазерной абляции материалов в полу-ограниченных образцах непрерывным аналогом метода Ньютона

И .Сархадов¹, З. А. Шарипов¹, З. К. Тухлиев¹, А. С. Халиль², Х. Гафуров²,

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

²Государственный университет, Дубна, Инженерно-физический институт

³Худжандский государственный университет имени академика Бободжана Гафурова, Худжанд, Таджикистан

*E-mail: ibrohim@jinr.ru

Аннотация

В настоящей работе проведено численное исследование при непрерывном воздействии лазера постоянной интенсивности на образец. При этом нестационарное решение уравнения теплопроводности после некоторого времени переходит к его стационарному решению даже при учете температурной зависимости теплофизических параметров материала образца. При данном подходе выявляется динамика перехода нестационарного решения лазерного абляции материалов к его стационарному решению. Приведены сравнительный анализ полученных численных результатов при учете и не учете температурной зависимости теплофизических параметров материала. Результаты качественно совпадают, но количественно сильно отличаются. Профили температуры образца при не учете искомой зависимости почти в два раза имеют большей величины чем при учете ее.

Введение

В последние годы импульсная лазерная абляция различных материалов привлекает все больший интерес как с точки зрения фундаментальных исследований процессов в веществе в экстремальных условиях сверхбыстрого подвода энергии (развитие неравновесной термодинамики, изучение критических явлений в сверхбыстрых процессах, лабораторное моделирование процессов в звездных атмосферах при вспышках новых и сверхновых звезд) так и с целью применения в различных технологиях, таких как синтез новых наноматериалов, напыление тонких пленок сложных соединений, обработка и очистка поверхностей, хранение информации и многих других [1].

Тепловые процессы при импульсной лазерной абляции материалов происходят при очень коротких временных масштабах. Детальный анализ этих процессов провести в натуральных экспериментах в этих масштабах времени очень трудно и сложно. Поэтому математическое моделирование и численное моделирование процесса становится актуальной и важной задачей, которая позволяет лучше понять взаимодействие лазера с мишенью и может быть использована для прогнозирования условий абляции.

Молекулярная динамика (МД) является достаточно эффективным методом для описания динамики сверхбыстрых тепловых процессов при абляции [2]. Методы МД успешно описывают механизмы плавления и испарения в условиях перегрева как в основной массе мишени [3], так и для системы со свободной поверхностью [4], при описании распространения волн давления, генерируемых лазерным облучением [5], а также различных динамик процесса лазерной абляции [6].

Основные уравнения

Численное моделирование лазерной абляции материалов в общем случае проводится на основе уравнения теплопроводности, написанном в движущейся системе координат, связанным с фронтом испарения с начальными и граничными условиями:

$$C(T) \frac{\partial T}{\partial t} = C(T) v_{\varphi} \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right) + A(z, t), \quad 0 < z < z_{\max}, \quad (1)$$

$$T(z, 0) = T_0, \quad 0 \leq z \leq z_{\max}, \quad \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=0} = v_{\varphi} L_{ev} \rho, \quad T(z_{\max}, t) = T_0, \quad (2)$$

$$C(T) = c(T) \rho(T), \quad A(z, t) = f_1(z) f_2(t), \quad f_1(z) = A_z \alpha e^{-\alpha z} e^{-\alpha z^2}, \quad h(t) = \int_0^t v_{\varphi}(t) dt, \quad (3)$$

$$T_z = T(0, t), \quad A_z = 1 - R(T_z), \quad f_2(t) = I_0 f(t), \quad \Phi = \int_0^{\infty} f_2(t) dt, \quad f(t) = (t/t_1) \exp(-t/t_1), \quad (4)$$

где $c(T)$, $\lambda(T)$, $\rho(T)$ - соответственно удельная теплоемкость, теплопроводность и плотность материала при температуре $T(z, t)$, $h(t)$ - толщина слоя абляции материала образца в момент времени t , $z_{\max}$ - максимальное расстояние, v_{φ} - скорость абляции, L_{ev} - удельная теплота сублимации, $A(z, t)$ - функция источника, I_0 - интенсивность лазера, $R(T_z)$ - коэффициент отражения лазера от поверхности образца, α , α_g - соответственно коэффициенты поглощения лазерного импульса в материале образца и в паре, Φ - доза облучения.

Здесь функция источника имеет факторизованный вид, когда на материал действует не лазерный импульс, а импульсный пучок заряженных частиц.

В общем случае теплоемкость, теплопроводность, плотность материала зависят от температуры.

Начальные и граничные условия (2) учитывают расходы тепла на испарение материала образца на первой границе и что в начале образец находился при комнатной температуре и во второй границе тепловые процессы отсутствуют.

Заключение

В работе приведены результаты численного моделирования лазерной абляции материалов при разных выборах временной формы интенсивности источника.

При короткодействующих источниках лазера приведены динамики толщины абляции от флюенса энергии импульса.

При предположении постоянной интенсивности источника лазерного излучения и пренебрежения затухания его в толщине абляции материала, численным моделированием получены стационарные волновые решения с учетом и без учета температурной зависимости тепло-физических параметров материала, которые качественно совпадают, но количественно сильно отличаются. Эти стационарные решения получаются при больших временах ($t=100$ нс), когда нестационарные решения переходят к стационарным решениям.

При получении стационарных волн лазерной абляции материалов можно поступить и другим способом. Предполагая упрощающие предположения, получим нелинейные краевые задачи для температуры образца, которые решаются численно применяя, например, непрерывный аналог метода Ньютона. Однако при этом динамика перехода от нестационарных решений к стационарному остаются в тени. Но этот недостаток не умаляет получение стационарных волн лазерной абляции материалов таким подходом.

Численное моделирование искомой полученной задачи является предметом наших дальнейших работ.

Полученные результаты

Численное моделирование проведено конечно-разностным методом явной схемы [11], для материала полиимида, у которого температурные зависимости теплофизических параметров имеет вид [2]:

$$c(T) = 2550 - 1590 \cdot \exp\left(\frac{300 - T}{460}\right) \frac{Дж}{кгК}, \quad \lambda(T) = 0,155 \cdot (T/300)^{0,28} \frac{Вт}{мК},$$

$$v_{\varphi} = v_0 \exp(-T_a / T_s), \quad T_a = 1,57 \cdot 10^4 \text{ К}, \quad v_0 = 3 \cdot 10^4 \frac{м}{с}, \quad t_1 = 6,13 \text{ нс}.$$

В дальнейшем численное моделирование проведем с учетом и без учета температурной зависимости теплофизических параметров материала образца (теплофизические параметры берутся при комнатной температуре).

На рисунке (1) приведены графики $f(t)$, $c(T)$, $\lambda(T)$, $v_{\varphi}(T_z)$.

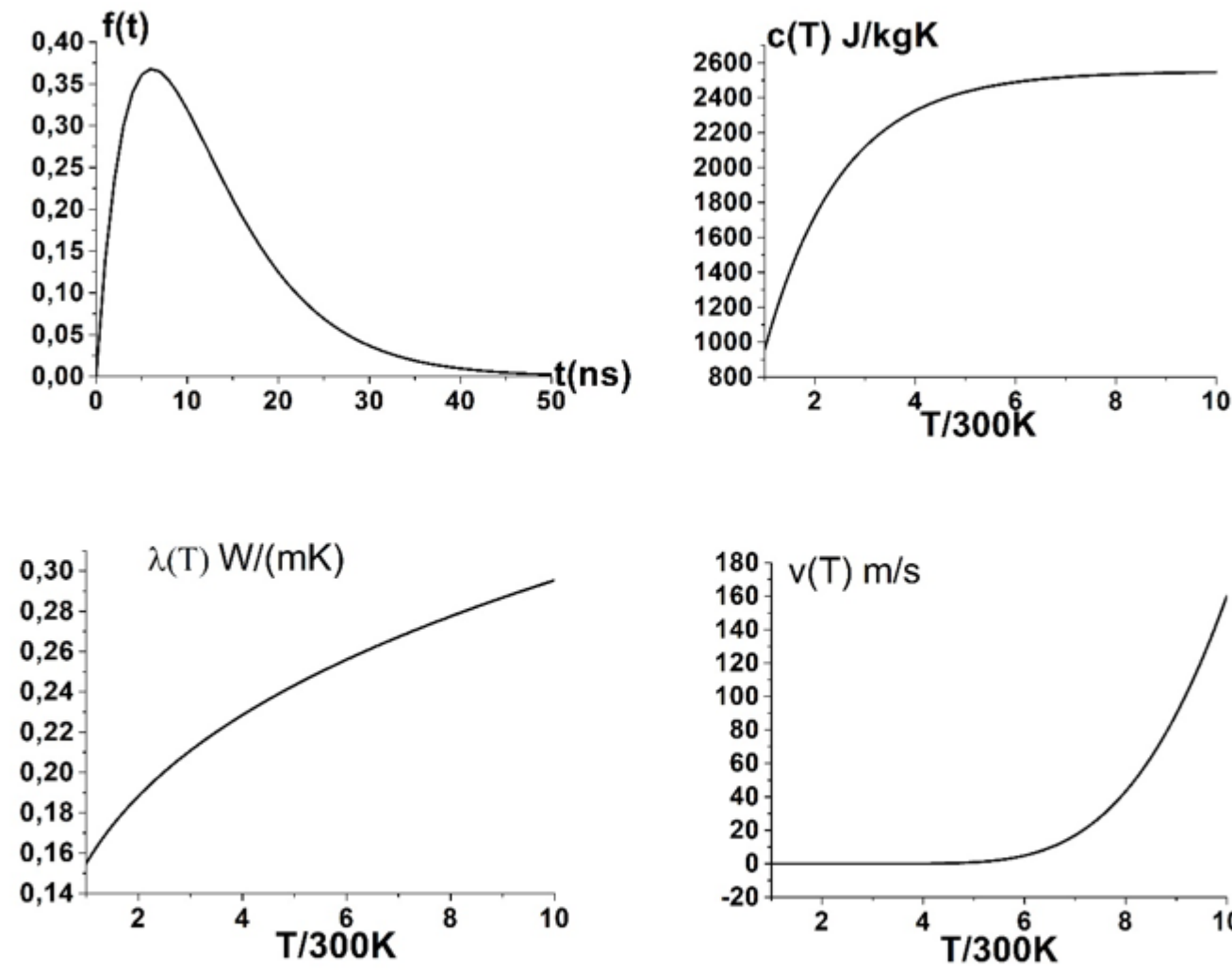


Рис.1. Временная форма источника $f(t)$, температурная зависимость удельной теплоемкости $c(T)$, коэффициента теплопроводности $\lambda(T)$ и скорости абляции материала образца $v_{\varphi}(T_z)$.

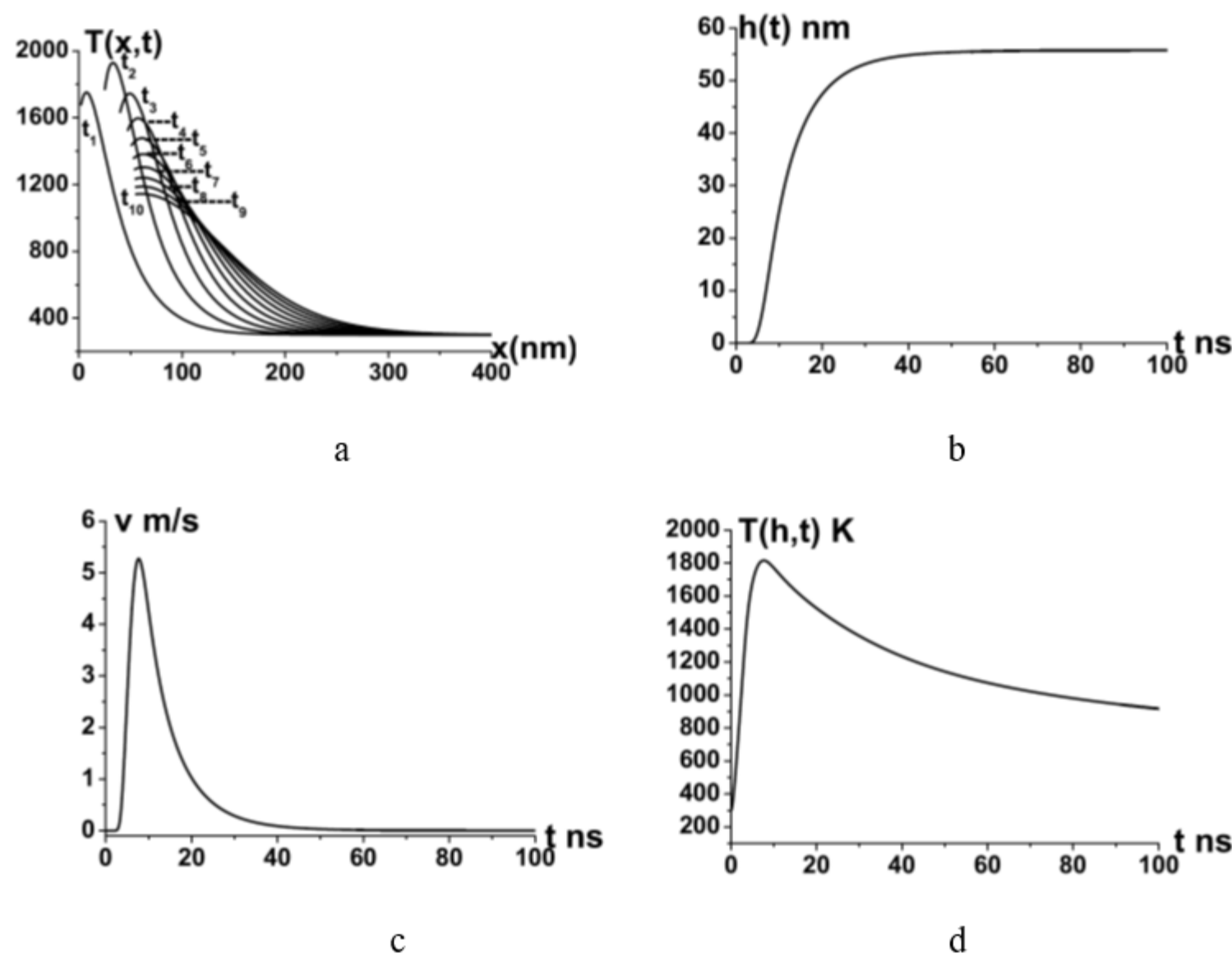


Рис.2. Профили температуры образца полиимида при разных временах: $t_j = j \cdot 5 \text{ нс}$; $j = 1, 2, 3, 9, 10$ (рис.2а). Динамики перемещения его границы из-за абляции (рис.2б), скорости абляции (рис.2с) и его температуры на границе (рис.2д), при воздействии флюенса энергии $\Phi = 10^3 \text{ Дж/м}^2$.

Литература

- Л.А. Захаров, Н.М. Булгакова. Численное моделирование лазерной абляции металлов и полимеров при воздействии импульсами инфракрасного излучения: влияние начальной температуры образца. ISSN 1818-7994. Вестник НГУ. Серия: Физика. 2010 г., Том 5, выпуск 1, стр. 39-47
- Allen M. P., Tildesley D. J. Computer Simulation of Liquids. Walton Street, Oxford OX2 6DP: Clarendon Press, 1991. ISBN: 0198553757
- Jin Z. H., Gumbsch P., Lu K., Ma E. Melting Mechanisms at the Limit of Superheating // Physical Review Letters. 2001. Vol. 87, no. 5. P. 055703. B. Batgerel, S. Dimova, I. Puzynin et al. Modeling Thermal Effects in Metals Irradiated by Copper Nanoclusters //EPJ Web Conf., –173. –2018. –06001.
- Abraham F. F., Broughton J. Q. Pulsed melting of silicon (111) and (100) surfaces simulated by molecular dynamics // Physical Review Letters. 1986.
- Zhigilei V., Garrison B. J. Pressure Waves in Microscopic Simulations of Laser Ablation // Materials Research Society Proceedings. Vol. 538. Cambridge University Press, 1998. P. 491–496.
- Etcheverry J. I., Mesaros M. Molecular dynamics simulation of the production of acoustic waves by pulsed laser irradiation // Physical Review B. 1999. Vol. 60, no. 13. P. 9430–9434.
- Zhigilei L. V., Garrison B. J. Microscopic mechanisms of laser ablation of organic solids in the thermal and stress confinement irradiation regimes // Journal of Applied Physics. 2000. Vol. 88, no. 3. P. 1281–1298.