

P11-2024-62

И. Сархадов *, З. А. Шарипов, З. К. Тухлиев,
А. С. Халиль ¹, Х. Гафуров ²

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
СТАЦИОНАРНЫХ ВОЛН ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИИ
МАТЕРИАЛОВ В ПОЛУОГРАНИЧЕННЫХ ОБРАЗЦАХ

Направлено в журнал «Поверхность. Рентгеновские, синхротронные
и нейтронные исследования»

¹ Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия

² Худжандский государственный университет им. академика Бободжана Гафурова, Худжанд, Таджикистан

* E-mail: ibrohim@jinr.ru

Численное моделирование стационарных волн лазерной абляции материалов в полуограниченных образцах

Ранее были проведены численные моделирования лазерной абляции материалов, возникающей под действием ультракоротких лазерных импульсов в полуограниченных образцах, в рамках уравнения теплопроводности.

В настоящее время проведено аналогичное 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.

Выявляется динамика перехода нестационарного решения лазерной абляции материалов к его стационарному решению.

Проведен сравнительный анализ полученных численных результатов с учетом и без учета температурной зависимости теплофизических параметров материала. Результаты качественно совпадают, но количественно сильно различаются.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий им. М. Г. Мещерякова ОИЯИ.

Numerical Simulation of Stationary Waves of Laser Ablation of Materials in Semi-Bounded Samples

Previously, numerical modeling of laser ablation of materials occurring under the action of ultrashort laser pulses in semi-bounded samples was carried out in the framework of the heat conduction equation.

In this paper, a similar numerical study was carried out with continuous action of a constant-intensity laser on the sample. In this case, the nonstationary solution of the heat conduction equation after some time passes to its stationary solution even when taking into account the temperature dependence of the thermal-physical parameters of the sample material.

With this approach, the dynamics of the transition of the nonstationary solution of laser ablation of materials to its stationary solution is revealed.

A comparative analysis of the numerical results obtained with and without taking into account the temperature dependence of the thermal-physical parameters of the material is given. The results are qualitatively the same, but quantitatively they are very different.

The investigation has been performed at the Meshcheryakov Laboratory of Information Technologies, JINR.

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 [1–3].

Тепловые процессы при импульсной лазерной абляции материалов происходят при очень коротких временных масштабах. Провести детальный анализ этих процессов в натуральных экспериментах в таких масштабах времени очень сложно. Поэтому математическое 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 [4]. Методы МД успешно описывают механизмы плавления и испарения в условиях перегрева как в основной массе мишени [5], так и в системе со свободной поверхностью [6], при описании распространения волн давления, генерируемых лазерным облучением [7, 8], а также различных динамик процесса лазерной абляции [9].

Поскольку электронная и решеточная подсистемы в процессе абляции находятся в сильно неравновесных термодинамических состояниях и для моделирования новых условий, возникающих при использовании коротких и ультракоротких импульсов, используется двухтемпературный режим, данная модель позволяет связать электронную и решеточную температуры, что считается необходимым для описания таких короткопериодных явлений. Модель состоит в основном из трех этапов, а именно: возбуждение электронов лазерным облучением, связь между электронной и решеточной подсистемами в системе связанных тепловых уравнений и абляция материала мишени. Это наталкивает на то, что моделирование лазерной абляции материалов можно провести не только в рамках простой модели уравнения теплопроводности, но и в рамках модели термического пика.

В данном исследовании рассматриваются непрерывные методы и несколько модификаций уравнений теплопроводности, при этом процесс испарения математически описывается в рамках краевой задачи теплопроводности для конденсированной среды в системе координат, связанной с движущейся границей раздела твердое тело – пар или расплав – пар, на которой происходит испарение. Задачу о движении границы твердое тело – пар можно рассмотреть в рамках одномерной модели [3], опустив боковой унос энергии лазерного излучения за счет теплопроводности, ко-

торая справедлива при строгом условии $r_0 \gg \sqrt{a_T \tau}$, где τ — длительность воздействия лазерного луча на материал, a_T — теплопроводность, r_0 — радиус пятна перегрева.

1. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

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

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

$$T(z, 0) = T_0, \quad 0 \leq z \leq z_{\max},$$

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

$$C(T) = c(T) \rho(T), \quad A(z, t) = f_1(z) f_2(t),$$

$$f_1(z) = A_s \alpha e^{-\alpha z} e^{-\alpha_g z}, \quad h(t) = \int_0^t v_\varphi(t) dt, \quad (3)$$

$$T_s = T(0, t), \quad A_s = 1 - R(T_s), \quad f_2(t) = I_0 f(t),$$

$$\Phi = \int_0^\infty f_2(t) dt, \quad f(t) = (t/t_1) \exp(-t/t_1), \quad (4)$$

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; $R(T_s)$ — 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, как и в работе [11], 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 то, что в начале образец находился при комнатной температуре и на второй границе тепловые процессы отсутствуют.

2. ОБСУЖДЕНИЕ ЧИСЛЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

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

$$c(T) = 2550 - 1590 \cdot \exp\left(\frac{300 - T}{460}\right) \frac{\text{Дж}}{\text{кг} \cdot \text{К}},$$

$$\lambda(T) = 0,155 \cdot (T/300)^{0,28} \frac{\text{Вт}}{\text{м} \cdot \text{К}},$$

$$v_\varphi = v_0 \exp(-T_a/T_s), \quad T_a = 1,57 \cdot 10^4 \text{ К},$$

$$v_0 = 3 \cdot 10^4 \frac{\text{м}}{\text{с}}, \quad t_1 = 6,13 \text{ нс}.$$

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

На рис. 1 приведены графики $f(t)$, $c(T)$, $\lambda(T)$, $v_\varphi(T)$.

На рис. 2 показаны профили температуры при разных временах, динамика перемещения границы из-за абляции, ее скорость и темпера-

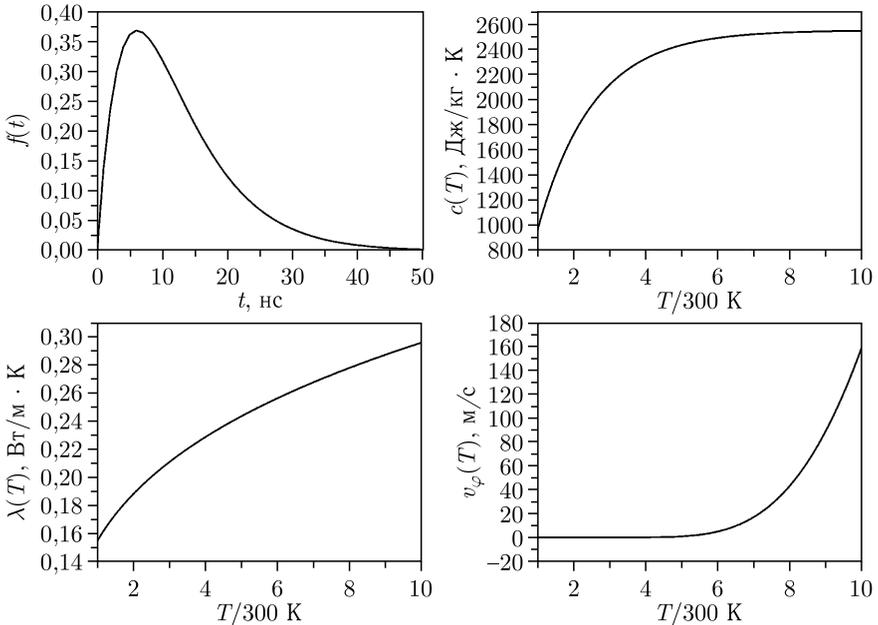


Рис. 1. Временная форма источника $f(t)$, температурная зависимость удельной теплоемкости $c(T)$, коэффициент теплопроводности $\lambda(T)$ и скорость абляции материала образца $v_\varphi(T)$

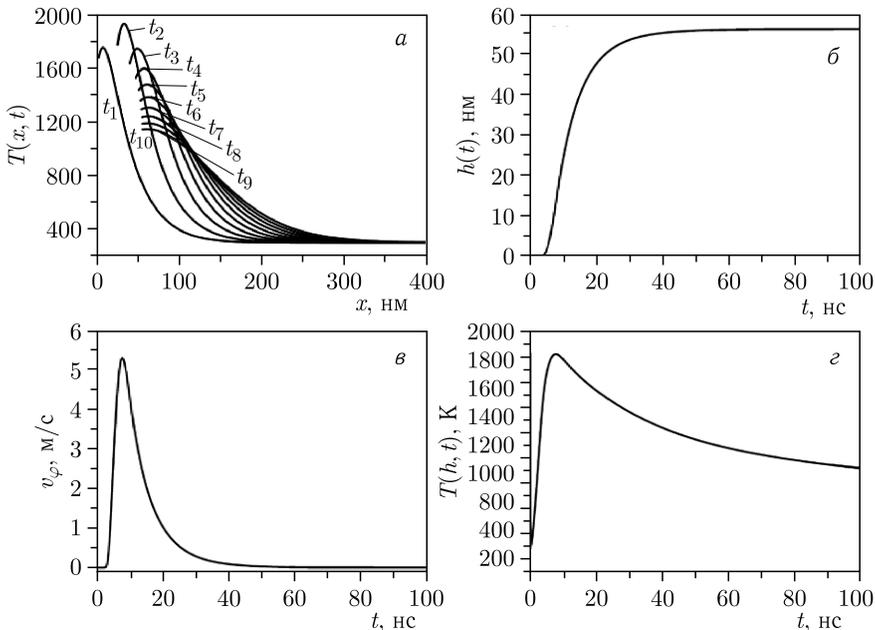


Рис. 2. Профили температуры образца полиимида при разных временах: $t_j = j \cdot 5$ нс; $j = 1, 2, \dots, 9, 10$ (а). Динамика перемещения его границы из-за абляции (б), скорость абляции (в) и температура на границе (г) при воздействии флюенса энергии $\Phi = 10^3$ Дж/м²

тура образца на границе $x = h(t)$ при воздействии флюенса энергии $\Phi = 10^3$ Дж/м² на образцы полиимида.

На рис. 3 приведены зависимости максимума температуры на поверхности образца $T_{\max}(h, t)$ и глубины кратера $h(t)$ от дозы излучения Φ для четырех вариантов значений параметров A_s и α : 1) $A_s = 0,93$; $\alpha = 4,25 \times 10^7$ м⁻¹; 2) $A_s = 0,88$; $\alpha = 3,1 \cdot 10^7$ м⁻¹; 3) $A_s = 0,89$; $\alpha = 10^7$ м⁻¹;

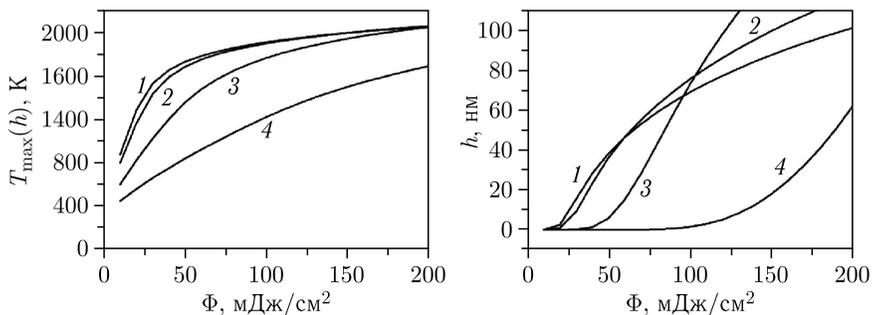


Рис. 3. Зависимости максимума температуры на поверхности образца $T_{\max}(h, t)$ и глубины абляции $h(t)$ от дозы облучения Φ для четырех вариантов значений A_s, α

4) $A_s = 0,9$; $\alpha = 0,32 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$. Интенсивность источника I_0 при этом меняется от $4 \cdot 10^6$ до $3 \cdot 10^7 \text{ Вт/см}^2$.

Полученные результаты согласуются с результатами работы [2].

Все эти результаты получены, когда временные формы источника $f(t)$ выбирали в виде короткодействующих по времени.

Если эту функцию выбираем в виде $f(t) = 1$ и предполагаем $\alpha_g = 0$, то это означает, что на образец действует лазер постоянной интенсивности и затуханием лазерного излучения в слое пара пренебрегается. Тогда численное моделирование показывает, что по истечении некоторого времени наше нестационарное решение переходит к стационарному решению. Рис. 4 подтверждает это. Как видно, скорость абляции, температура на поверхности материала при больших временах почти не меняются. Это является признаком перехода к волновому стационарному решению задачи абляции.

На рис. 5 приведена динамика профилей температуры образца при воздействии на него лазерного излучения постоянной интенсивности $I_0 = 10^{11} \text{ Вт/м}^2$.

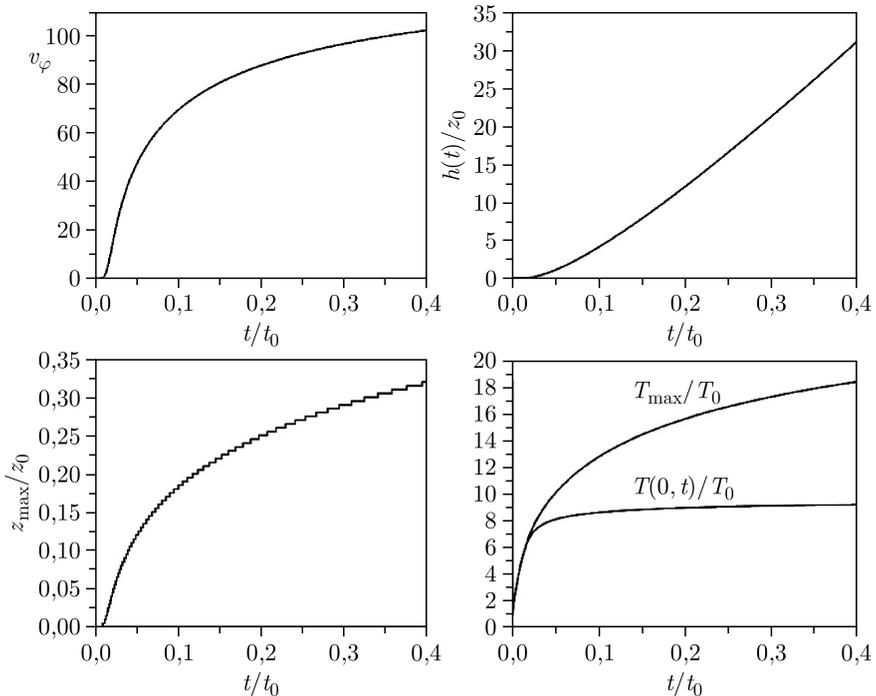


Рис. 4. Временные зависимости скорости абляции, толщины слоя абляции, координаты максимума температуры внутри образца, температуры на поверхности и максимума температуры внутри образца при постоянной интенсивности лазерного излучения $I_0 = 10^{11} \text{ Вт/м}^2$ ($t_0 = 100 \text{ нс}$, $T_0 = 300 \text{ К}$, $z_0 = 100 \text{ нм}$)

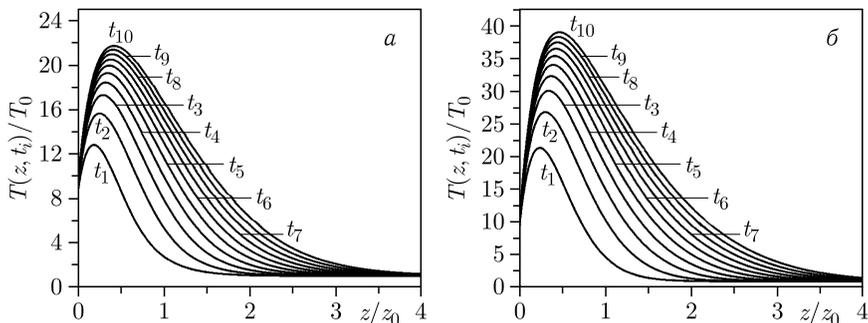


Рис. 5. Динамика профилей температуры образца при воздействии на него лазерного излучения постоянной интенсивности $I_0 = 10^{11}$ Вт/м² при временах $t_j = j \cdot 0,1 \cdot t_0$, $j = 1, 2, \dots, 9, 10$, с учетом (а) и без учета (б) температурной зависимости теплофизических параметров материала образца

На рис. 6 показана динамика стационарных профилей температур при разных интенсивностях лазерного излучения $I_0 = k \cdot 2 \cdot 10^{10}$ Вт/м², $k = 1, 2, \dots, 5$.

Профили температуры образца при неучете искомой зависимости имеют почти в два раза большую величину, чем при ее учете.

На рис. 6 каждому стационарному профилю соответствует своя температура на поверхности образца T_s и скорость абляции v_φ . Этим интенсивностям соответствуют еще максимальные температуры внутри образца и их координаты: T_{\max}/T_0 , z_{\max}/z_0 . Из графика видно, что вблизи границы $z = 0$ существует перегрев образца, т. е. температура внутри образца около границы выше, чем на самой границе.

В табл. 1, 2 приведены значения данных величин при разных интенсивностях источника, соответствующие рис. 6.

Для получения решений задачи стационарных волн лазерной абляции материалов можно было поступать по-другому. В уравнениях (1)–(4) сле-

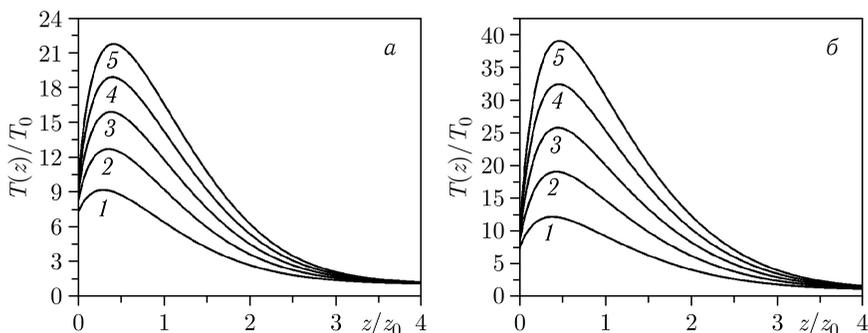


Рис. 6. Динамика стационарных профилей температур при разных интенсивностях лазерного излучения $I_0 = k \cdot 2 \cdot 10^{10}$ Вт/м², $k = 1, 2, \dots, 5$, с учетом (а) и без учета (б) температурной зависимости теплофизических параметров материала образца

Таблица 1. Данные для рис. 6, а

I_0 , Вт/м ²	T_s/T_0	v_φ , м/с	T_{\max}/T_0	z_{\max}/z_0
$2 \cdot 10^{10}$	7,147	19,82	9,1095	0,295
$4 \cdot 10^{10}$	8,005	43,445	12,639	0,360
$6 \cdot 10^{10}$	8,581	67,3569	15,8248	0,385
$8 \cdot 10^{10}$	9,0334	91,4364	18,8144	0,405
$10 \cdot 10^{10}$	9,4149	115,6312	21,6672	0,415

Таблица 2. Данные для рис. 6, б

I_0 , Вт/м ²	T_s/T_0	v_φ , м/с	T_{\max}/T_0	z_{\max}/z_0
$2 \cdot 10^{10}$	7,2713	22,460	12,1117	0,385
$4 \cdot 10^{10}$	8,1005	46,923	19,0005	0,43
$6 \cdot 10^{10}$	8,665	71,465	25,7272	0,45
$8 \cdot 10^{10}$	9,1108	96,0457	32,3777	0,46
$10 \cdot 10^{10}$	9,4874	120,6494	38,983	0,47

лаем упрощающие предположения:

$$f(t) = 1, \quad \alpha_g = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial t} = 0.$$

В результате получим следующую нелинейную краевую задачу для распределения стационарной температуры $T(z)$:

$$C(T)v_\varphi \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right) + A_s(T)I_0 \alpha \exp(-\alpha z) = 0, \quad (5)$$

$$\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=0} = v_\varphi(T_s)L_{ev}\rho, \quad T(z_{\max}) = T_0. \quad (6)$$

Данная нелинейная краевая задача не решается аналитически. Ее можно решить только численно, например, с помощью непрерывного аналога метода Ньютона. Однако, решая эту задачу, мы бы получили результаты, аналогичные приведенным на рис. 6. При этом динамика переходов к этим решениям, как показано на рис. 5, для одной интенсивности оставалась бы в тени. Тем не менее это не умаляет результатов решения нелинейной краевой задачи (5), (6). Решение данной задачи будет предметом наших дальнейших исследований.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

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

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

В предположении постоянной интенсивности источника лазерного излучения и пренебрежении его затуханием в толщине абляции материала численным моделированием получены стационарные волновые решения с

учетом и без учета температурной зависимости теплофизических параметров материала, которые качественно совпадают, но количественно сильно различаются. 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. Используя упрощающие предположения, получим нелинейные краевые задачи для температуры образца, которые решаются численно с применением, например, непрерывного аналога метода Ньютона. Однако при этом динамика перехода от нестационарных решений к стационарному остается в тени. Но этот недостаток не умаляет получение стационарных волн лазерной абляции материалов таким методом.

Численное моделирование полученной задачи является предметом наших дальнейших исследований.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Захаров Л. А., Булгакова Н. М. Численное моделирование лазерной абляции металлов и полимеров при воздействии импульсами инфракрасного излучения: влияние начальной температуры образца // Вест. НГУ. Сер. Физ. 2010. Т. 5, вып. 1. С. 39–47.
2. Анисимов С. И., Лукьянчук Б. С. Избранные задачи теории лазерной абляции // УФН. 2002. Т. 172, № 3. С. 301–333.
3. Вейко В. П., Либенсон М. Н., Червяков Г. Г., Яковлев Е. Б. Взаимодействие лазерного излучения с веществом. Силовая оптика / Под ред. В. И. Конова. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. 312 с.
4. Allen M. P., Tildesley D. J. Computer Simulation of Liquids. Walton Street, Oxford OX2 6DP: Clarendon Press, 1991.
5. Jin Z. H., Gumbsch P., Lu K., Ma E. Melting Mechanisms at the Limit of Superheating // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 87, No. 5. P. 055703.
6. Abraham F. F., Broughton J. Q. Pulsed Melting of Silicon (111) and (100) Surfaces Simulated by Molecular Dynamics // Phys. Rev. Lett. 1986. V. 56. P. 734.
7. Zhigilei V., Garrison B. J. Pressure Waves in Microscopic Simulations of Laser Ablation // Mater. Res. Soc. (MRS) Proc. V. 538. Cambridge Univ. Press, 1998. P. 491–496.
8. Etcheverry J. I., Mesaros M. Molecular Dynamics Simulation of the Production of Acoustic Waves by Pulsed Laser Irradiation // Phys. Rev. B. 1999. V. 60, No. 13. P. 9430–9434.
9. Zhigilei L. V., Garrison B. J. Microscopic Mechanisms of Laser Ablation of Organic Solids in the Thermal and Stress Confinement Irradiation Regimes // J. Appl. Phys. 2000. V. 88, No. 3. P. 1281–1298.
10. Амирханов И. В., Саркер Н. Р., Сархадов И. Численное моделирование лазерной абляции материалов // Матер. Всерос. конф. с междунар. участием. Москва, РУДН, 13–17 апр. 2020 г. С. 237–239.
11. Амирханов И. В., Земляная Е. В., Пузынин И. В., Пузынина Т. П., Сархадов И. О влиянии формы источника в модели фазовых переходов в металлах, облучаемых импульсными пучками ионов. Сообщ. ОИЯИ Р11-2002-78. Дубна, 2002. 18 с.
12. Самарский А. А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1983. С. 258–276.

Получено 16 декабря 2024 г.

Редактор *Е. В. Сабеева*

Подписано в печать 20.01.2025.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать цифровая.

Усл. печ. л. 0,69. Уч.-изд. л. 0,85. Тираж 105 экз. Заказ № 61024.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: publish@jinr.ru

www.jinr.ru/publish/