

P11-2022-32

И. В. Амирханов, И. Сархатов *, З. К. Тухлиев, Х. Гафуров¹

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
ВЛИЯНИЯ КОНЕЧНОЙ ТОЛЩИНЫ ОБРАЗЦА
НА ЛАЗЕРНУЮ АБЛЯЦИЮ МАТЕРИАЛОВ

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

¹ Худжандский государственный университет им. акад. Бободжана
Гафурова, Худжанд, Таджикистан

* E-mail: ibrohim@jinr.ru

Амирханов И. В. и др.

P11-2022-32

Численное исследование влияния конечной толщины образца на лазерную абляцию материалов

В предыдущих работах проведено численное моделирование лазерной абляции материалов, возникающей под действием ультракоротких лазерных импульсов в полуограниченных образцах, в настоящей — аналогичное численное исследование в образцах конечного размера. Действие лазера учтено через функции источника в уравнении теплопроводности заданием координатной и временной зависимости источника лазера. При лазерной абляции материала толщина образца изменяется. Путем перехода к движущейся системе координат задача с движущимися границами сведена к задаче с фиксированными границами. При этом в уравнении теплопроводности наряду с диффузионным членом возникает конвективный член переноса тепла. В нашей новой постановке задачи переменная толщина образца влияет не только на конвективный член, но и на диффузионный член, на функции источника и на граничные условия уравнения теплопроводности, что видно из математической постановки самой задачи.

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

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2022

Amirkhanov I. V. et al.

P11-2022-32

Numerical Investigation of the Influence of Finite Sample Thickness on Laser Ablation of Materials

In previous works, numerical simulations of laser ablation of materials that occurs under the action of ultrashort laser pulses in semi-constrained samples were carried out. In the present work, a similar numerical study was carried out in samples of a finite size. The action of the laser is taken into account through the source functions in the heat conduction equation, setting the coordinate and time dependences of the laser source. During laser ablation of the material, the thickness of the sample changes. By passing to the moving coordinate system, the problem with moving boundaries is transferred to the problem with fixed boundaries. In this case, in the heat conduction equation, along with the diffusion term, a convective heat transfer term arises. In our new formulation of the problem, the variable thickness of the sample affects not only the convective term, but it affects the diffusion term, the source functions, and the boundary conditions of the heat equation. These influences are visible from the mathematical formulation of the problem itself.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2022

ВВЕДЕНИЕ

В последние годы импульсная лазерная абляция [1–15] (любой процесс лазерно-стимулированного удаления вещества, включая эмиссию электронов) различных материалов вызывает 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 $r_0 \gg \sqrt{a_T \tau}$, где τ – продолжительность воздействия лазерного луча на материал, a_T – температуропроводность, r_0 – радиус пятна нагрева, то задача о движении границы испарения может быть рассмотрена в рамках одномерной модели [16].

ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

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

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

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

$$\lambda \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=h_1(t)} = L_{ev} \rho v_{1Ph}, \quad (3)$$

$$-\lambda \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=d-h_2(t)} = L_{ev} \rho v_{2Ph}, \quad h_k(t) = \int_0^t v_{kPh}(t) dt, \quad k = 1, 2, \quad (4)$$

где $c(T)$, $\lambda(T)$, $\rho(T)$ – удельная теплоемкость, теплопроводность и плотность материала при температуре $T(z, t)$ соответственно; $h_1(t)$, $h_2(t)$ – глубины кратера на левой и правой поверхностях образца в момент времени t ; d – начальная толщина образца; v_{1Ph} , v_{2Ph} – 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 [15]:

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

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 преобразовании координат

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

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:

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

$$A(z, t) = I_0 A_s \alpha e^{-\alpha z D} e^{-\alpha_g h_1(t)} e^{-t/t_1} t/t_1, \quad v_{\text{eff}} = \frac{v_{1Ph}(1-z) - z v_{2Ph}}{D},$$

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

$$\lambda \frac{\partial T(z, t)}{\partial z} \Big|_{z=0} = DL_{ev} \rho v_{1Ph} (T(0, t)), \quad (8)$$

$$-\lambda \frac{\partial T(z, t)}{\partial z} \Big|_{z=1} = DL_{ev} \rho v_{2Ph} (T(1, t)).$$

При численном моделировании постановку задачи удобно изложить в безразмерных переменных. В данной системе уравнений переходим к безразмерным переменным и величинам по формулам

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

$$\bar{D} = \frac{D}{d}, \quad \bar{t} = \frac{t}{t_0}, \quad \bar{h}_k = \frac{h_k}{d}, \quad \bar{v}_{kPh} = \frac{v_{kPh} t_0}{d}, \quad k = 1, 2;$$

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

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

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

$$\bar{v}_{\text{eff}} = \frac{\bar{v}_{1Ph}(1-z) - z \bar{v}_{2Ph}}{\bar{D}},$$

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

$$\bar{\lambda}(\bar{T}) \frac{\partial \bar{T}(z, \bar{t})}{\partial z} \Big|_{z=0} = A_1 \bar{D}_{\bar{v}_{1Ph}} (\bar{T}(0, \bar{t})), \quad (11)$$

$$-\bar{\lambda}(\bar{T}) \frac{\partial \bar{T}(z, \bar{t})}{\partial z} \Big|_{z=1} = A_1 \bar{D}_{\bar{v}_{2Ph}} (\bar{T}(1, \bar{t})).$$

До проведения численного моделирования лазерной абляции материалов сразу можно заметить отличие постановки задачи для ограниченного образца от постановки аналогичной задачи для полугограниченного образца. Во-первых, в уравнении (6) появилась переменная толщина образца $D(t)$, которая указывает на то, что конечность толщины образца влияет на диффузионную, конвективную части по переносу тепла уравнения теплопроводности. Во-вторых, в скорости $v_{\text{eff}}(t)$ присутствует не только скорость перемещения первой границы $v_{1Ph}(t)$, но и $v_{2Ph}(t)$. В-третьих, толщина образца влияет и на пространственную часть источника. Наконец, толщина образца влияет также и на граничные условия. После получения численного решения задачи в переменной z результаты на графиках рисуем в реальной переменной x путем обратного перехода $x = h_1(t) + zD$. При этом на графиках профилей температуры образца будет видно перемещение границ образца из-за испарения.

ОБСУЖДЕНИЕ ЧИСЛЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

В работе [15] решение задачи (1)–(4) проводилось методом моментов для полугограниченного образца материала полиимида. В работах [17–20] аналогичные задачи решались для полугограниченного образца с примене-

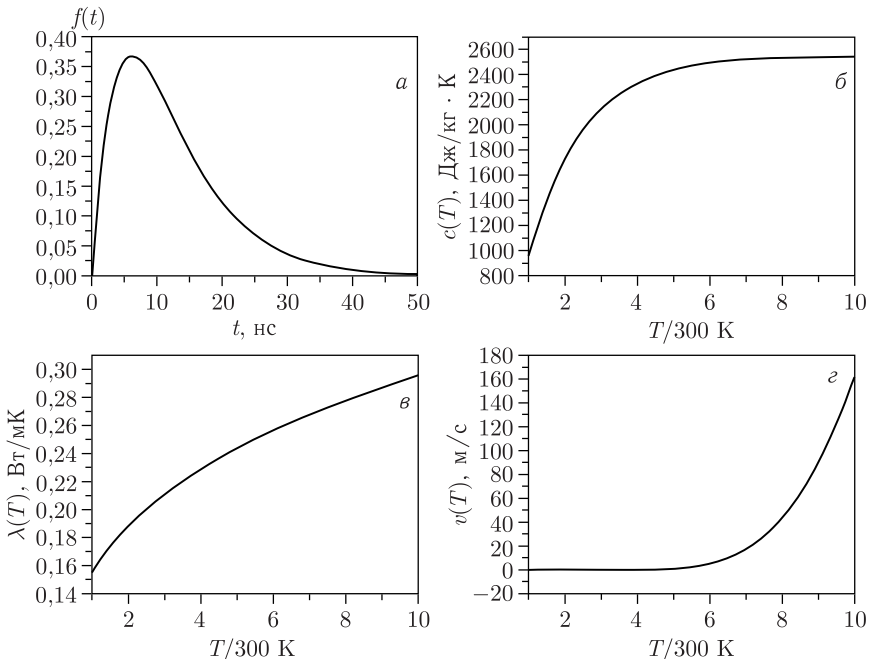


Рис. 1. Временной профиль источника $f(t)$ (а), температурная зависимость удельной теплоемкости $c(T)$ (б), коэффициента теплопроводности $\lambda(T)$ (в) и скорости перемещения границы $v(T)$ (г) из-за испарения

нием метода конечных разностей. В нашей работе данная задача решается для образца конечного размера с применением конечно-разностного метода явной и неявной схемы [21].

Временная форма источника $f(t)$, температурная зависимость скорости перемещения границы из-за испарения $v_s(T)$, удельной теплоемкости $c(T)$ и теплопроводности $\lambda(T)$, которые приведены на рис. 1, взяты для материала полиимида, как и в [15]:

$$f(t) = \frac{t}{t_1} \exp\left(-\frac{t}{t_1}\right), \quad t_1 = 6,13 \text{ нс}, \quad c(T) = 2550 - 1590 \exp\left[\frac{300 - T}{460}\right] \frac{\text{Дж}}{\text{кг} \cdot \text{К}},$$

$$\lambda(T) = 0,155 \left(\frac{T}{300}\right)^{0,28} \frac{\text{Вт}}{\text{мК}}, \quad v = v_0 e^{-T_\alpha/T_s}, \quad v_0 = 3 \cdot 10^4 \text{ м/с}, \quad T_\alpha = 15700 \text{ К}.$$

Проведено численное моделирование влияния конечной толщины образцов на лазерной абляции материалов с использованием метода конечных разностей явной и неявной численных схем. На рис. 2 приведены профили температур в десять моментов времени $t_j = j \cdot 10$ нс для образцов разных начальных толщин: $d_1 = 150$ нм (*а, б*), $d_2 = 400$ нм (*в, г*). Как видно, в момент времени $t_1 = 10$ нс в обеих границах первого и второго образцов не происходило заметных перемещений. В момент времени $t_2 = 20$ нс в обоих образцах первые границы начали перемещаться. Во втором об-

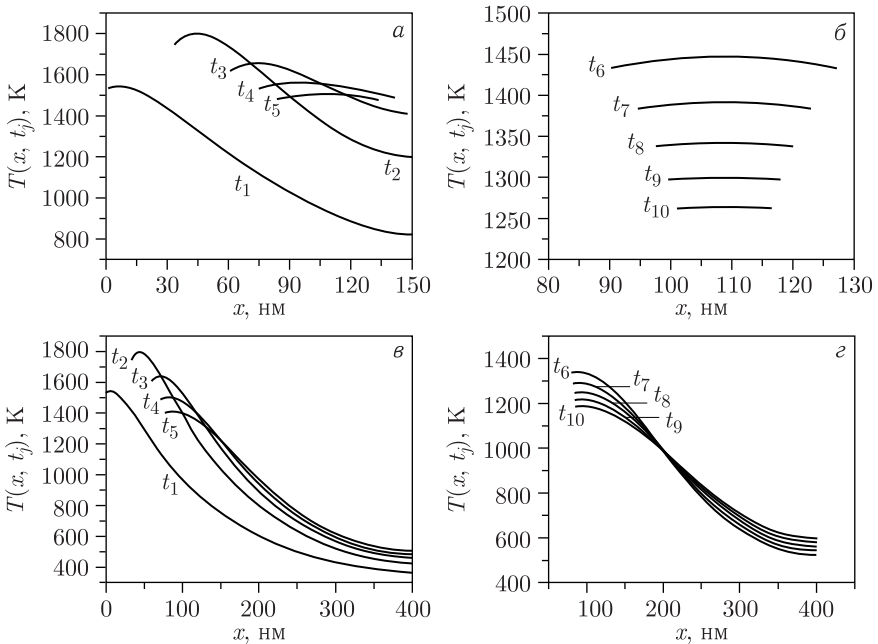


Рис. 2. Профили температур при временах $t_i = i \cdot 10$ нс для образцов с толщинами $d_1 = 150$ нм (*а, б*) и $d_2 = 400$ нм (*в, г*)

разце абляция происходит только на первой границе. В первом образце с момента $t_4 = 40$ нс абляция материала происходит на обеих границах. Это показывает, что один и тот же флюенс энергии имеет разное влияние в зависимости от толщины образца. На рис. 2, в профили температуры вы-

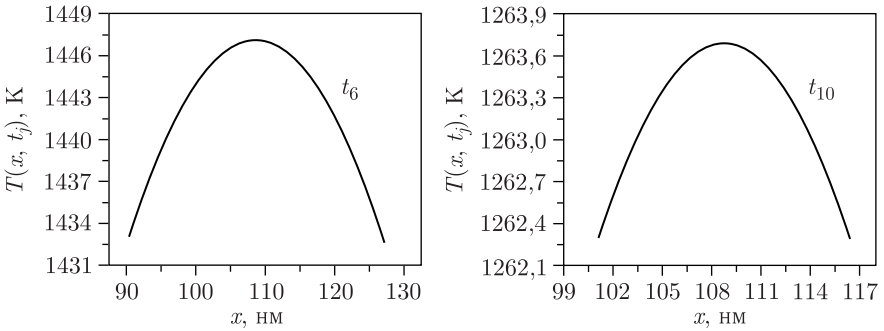


Рис. 3. Профили температуры образца толщиной $d_1 = 150$ нм при временах $t_6 = 60$ нс и $t_{10} = 100$ нс

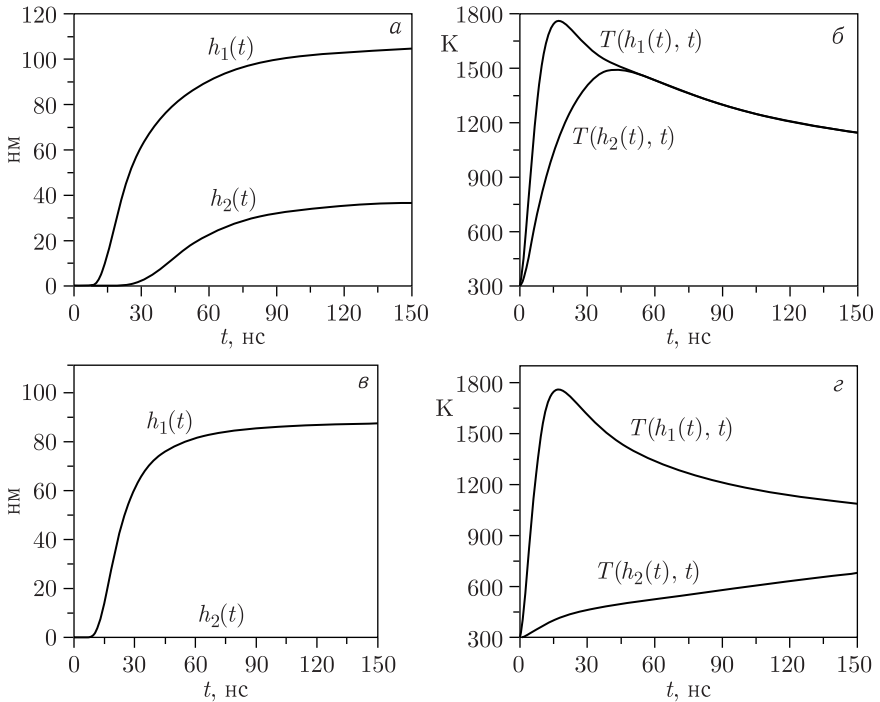


Рис. 4. Динамика толщин слоев испарений и температур на первой и второй границах для образцов с толщинами $d_1 = 150$ нм (а, б) и $d_2 = 400$ нм (в, г)

глядят горизонтальными. На самом деле если их рисовать отдельно, то они будут выглядеть по-другому. На рис. 3 приведены два из этих профилей при временах $t_6 = 60$ нс и $t_{10} = 100$ нс.

На рис. 4 показана динамика изменения толщин слоев испарений и температур на первой и второй границах для упомянутых образцов. Эти графики подтверждают предыдущие наши рассуждения: для тонких образцов абляция материала происходит на обеих границах, а для относительно толстого материала абляция материала происходит только на первой границе. Поскольку для тонкого образца при испарении обе границы приближаются друг к другу достаточно близко, температуры в этот момент на них не должны сильно отличаться. Рис. 4, б подтверждает это.

На рис. 5 приведена динамика толщин, суммарной толщины слоев перемещений первой и второй границ, скоростей перемещений границ для образцов с начальными толщинами $d_1 = 150$ нм (а, б) и $d_2 = 400$ нм (в, г).

В тонких образцах суммарная толщина испарения больше, чем в толстых.

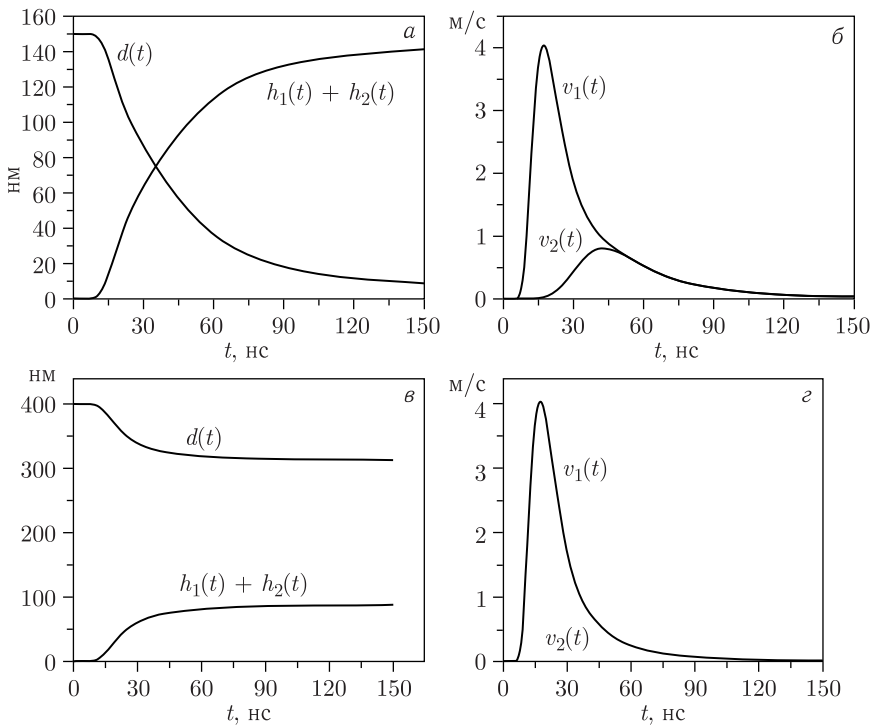


Рис. 5. Динамика толщин, суммарной толщины слоев перемещений первой и второй границ, скоростей перемещений границ для образцов с начальными толщинами $d_1 = 150$ нм и $d_2 = 400$ нм

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работах [17–20] численное моделирование лазерной абляции материалов проведено для полуограниченных образцов. В настоящей работе предложена аналогичная постановка задачи для образцов конечной толщины. В новой постановке толщина образца присутствует в конвективном и диффузионном членах уравнения теплопроводности, а также в функции источника и граничных условиях. В эффективной скорости конвективного члена присутствуют скорости перемещений первой и второй границ.

Численным моделированием установлено:

1) В относительно тонких образцах испарение материала происходит на обеих границах, а в толстых образцах испарение материала происходит только на той, на которой действует лазер.

2) Один и тот же поток энергии лазера производит разные эффекты. В тонких образцах суммарная толщина перемещений границ больше по сравнению с толстыми. Путем подбора толщины образца можно достичь наиболее оптимального испарения материала, т. е. наибольшей суммарной толщины испарения с обеих границ.

3) При относительно тонких образцах они могут почти целиком превращаться в пар.

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

Конфликт интересов: Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Захаров Л. А., Булгакова Н. М.* Численное моделирование лазерной абляции металлов и полимеров при воздействии импульсами инфракрасного излучения: влияние начальной температуры образца // Вестник НГУ. Серия: Физика. 2010. Т. 5, вып. 1.
2. *Bauerle D.* Laser Processing and Chemistry. Berlin; Heidelberg: Springer-Verlag, 2000.
3. *Miotello A., Kelly R.* Laser-Induced Phase Explosion: New Physical Problems When a Condensed Phase Approaches the Thermodynamic Critical Temperature // Appl. Phys. A. 1999. V. 69. P. S69–S73.
4. *Bulgakova N. M., Bulgakov A. V., Bourakov I. M., Bulgakova N. A.* Pulsed Laser Ablation of Solids and Critical Phenomena // Appl. Surf. Sci. 2002. V. 197–198. P. 96–99.
5. *Pound M. W., Kane J. O., Ryutov D. D., Remington B. A. et al.* Pillars of Heaven // Astrophysics and Space Science. 2007. V. 307. P. 187–190.
6. *Фортвов В. Е.* Мощные ударные волны и экстремальные состояния вещества // Усп. физ. наук. 2007. Т. 177, № 4. С. 347–368.
7. *Meijer J., Du K., Gillner A., Hoffmann D., Kovalenko V. S. et al.* Laser Machining by Short and Ultrashort Pulses, State of the Art and New Opportunities in the Age of the Photons // Annals of the CIRP. 2002. V. 51. P. 531–550.

8. Zoubir A., Shah L., Richardson K., Richardson M. Practical Uses of Femtosecond Laser Micro-Materials Processing // Appl. Phys. A. 2003. V. 77. P. 311–315.
9. Kuznetsov A. I., Koch J., Chichkov B. N. Nanostructuring of Thin Gold Films by Femto-second Lasers // Appl. Phys. A. 2009. V. 94. P. 221–230.
10. Bulgakova N. M., Panchenko A. N., Tel'minov A. E., Shulepov M. A. Formation of Microtower Structures on Nanosecond Laser Ablation of Liquid Metals // Appl. Phys. A. 2010. V. 98. P. 393–400.
11. Dijkkamp D., Goetz A. S., Venkatesan T., Wu X. D. Evidence for the Thermal Nature of Laser-Induced Polymer Ablation // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 58. P. 2142–2145.
12. Burns F. C., Cain S. R. The Effect of Pulse Repetition Rate on Laser Ablation of Polyimide and Polymethylmethacrylate-Based Polymers // J. Phys. D: Appl. Phys. 1996. V. 29. P. 1349–1355.
13. Fahler S., Krebs H. U. Calculations and Experiments of Material Removal and Kinetic Energy during Pulsed Laser Ablation of Metals // Appl. Surf. Sci. 1996. V. 96–98. P. 61–65.
14. Фокин В. Б. Континуально-атомистическая модель и ее применение для численного расчета воздействия одиночного и двойного фемтосекундного лазерного импульса на металлы. Дис. ... канд. физ.-мат. наук. М., 2017.
15. Анисимов С. И., Лукьянчук Б. С. Избранные задачи теории лазерной абляции // УФН. 2002. Т. 172, № 3. С. 301–333.
16. 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.
17. Amirkhanov I. V., Sarker N. R., Sarkhadov I. Numerical Simulation of Thermal Processes Occurring in Materials under the Action of Femtosecond Laser Pulses // Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science. 2021. V. 29, No. 1. P. 5–13.
18. Гафуров Х., Сархадов И., Тошходжаев Х. А., Хомидов М. Моделирование воздействия лазерного импульса сложной временной структуры на тепловые процессы в твердых телах // Политехнический вестник. Серия: Интеллект. Инновации. Инвестиции. 2019. Т. 2, № 46. С. 41–46.
19. Амирханов И. В., Саркер Н. Р., Сархадов И. Численное моделирование лазерной абляции материалов // Материалы всероссийских конференций с международным участием. М.: РУДН, 2020. С. 237–239.
20. Amirkhanov I. V., Sarker N. R., Sarkhadov I. Numerical Modeling of Laser Ablation of Materials // Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science. М.: PFUR, 2021.
21. Самарский А. А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1983. С. 258–276.

Получено 12 июля 2022 г.

Редактор *М. И. Зарубина*

Подписано в печать 19.09.2022.

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

Усл. печ. л. 0,5. Уч.-изд. л. 0,96. Тираж 200 экз. Заказ № 60503.

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

E-mail: publish@jinr.ru

www.jinr.ru/publish/