

Санкт-Петербургский политехнический университет имени Петра Великого
Институт прикладной математики и механики
Кафедра прикладной математики



Математическое моделирование взаимодействия фемтосекундных лазерных импульсов с металлами

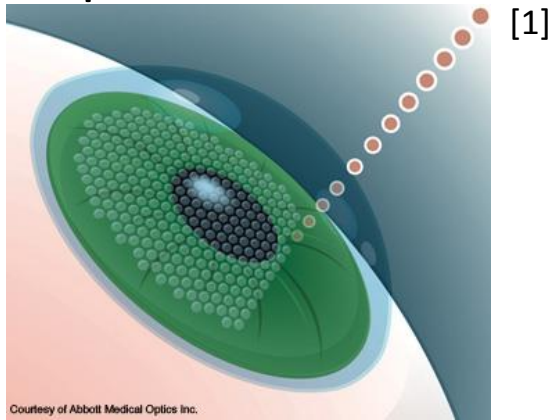
Выполнил: Давыдов Роман Вадимович

Науч. рук.: профессор, д.т.н. Антонов Валерий Иванович

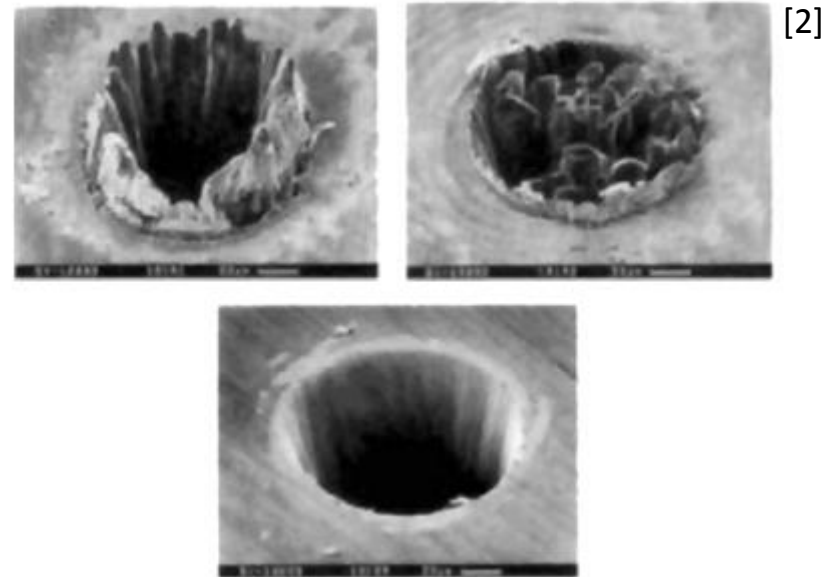
Актуальность исследований

Применение фемтосекундных лазеров

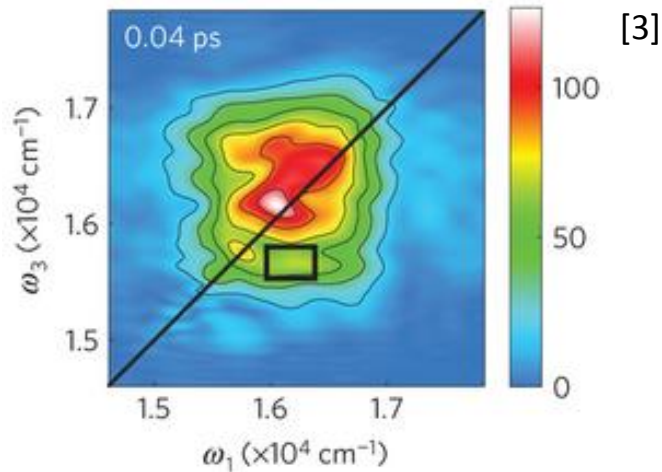
Офтальмология



Лазерная абляция веществ



Спектроскопия



[1] Daukantas P., Optics & Photonics News, Feb. 2010

[2] Makarov G N, Phys. Usp., 2013

[3] Huxter V.M., Nature Physics, 2013

Подходы к моделированию процессов

1. Молекулярно-динамическое моделирование
2. Однотемпературные гидродинамические модели
3. Двухтемпературные гидродинамические модели

Постановка задачи (1)

Рассмотрим задачу о взаимодействии единичного фемтосекундного лазерного импульса с алюминиевой пластиной в одномерном случае в вакууме.

Выберем направление оси x перпендикулярно облучаемой поверхности внутрь пластины.

Введем массовую лагранжевую координату m :

$$dm = \rho dx, m = \int_{x_0}^x \rho dx$$

Система уравнений двухтемпературной гидродинамики:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{\rho} \right) + \frac{\partial v}{\partial m} &= 0 \\ \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial m} &= 0, v = \frac{\partial x}{\partial t} \\ \frac{\partial \varepsilon_e}{\partial t} + P_e \frac{\partial v}{\partial m} &= \frac{\partial}{\partial m} \left(k \rho \frac{\partial T_e}{\partial m} \right) - \frac{\alpha_{ei}}{\rho} (T_e - T_i) + J_L \\ \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial t} + P_i \frac{\partial v}{\partial m} &= \frac{\alpha_{ei}}{\rho} (T_e - T_i) \end{aligned}$$

Постановка задачи (2)

ρ – массовая плотность облучаемого металла, ρ_0 – плотность при нормальных условиях,

v – скорость, t – время;

$P = P_e + P_i$ – полное, электронное и ионное давление;

$\varepsilon = \varepsilon_e + \varepsilon_i$ – полная, электронная и ионная внутренняя энергия единицы массы;

T_e, T_i – электронная и ионная температуры, k – коэффициент электронной теплопроводности;

$\alpha_{ei} = 36 * 10^{16} * \frac{\rho}{\rho_0}$ – коэффициент электронно-ионной релаксации [1]

$J_L = \frac{F_{abs}}{\tau_L \delta \sqrt{\pi} \rho} \exp\left(-\frac{t^2}{\tau_L^2}\right) \exp\left(-\frac{x(m,t)-x(m_0,t)}{\delta}\right)$ – энергия лазерного излучения поглощенного [2]
единицей лагранжевой координаты за единицу времени.

F_{abs} – энергия лазерного излучения, поглощенного поверхностью.

δ – толщина скин-слоя;

τ_L – длительность лазерного импульса;

Начальные условия:

$$\rho|_{t=0} = 2700 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, T_e|_{t=0} = T_i|_{t=0} = 300 \text{ K}, v|_{t=0} = 0 \frac{\text{м}}{\text{с}}$$

Граничные условия:

$$P_L = P_R = 0$$
$$\frac{\partial T_e}{\partial m} \Big|_L = \frac{\partial T_e}{\partial m} \Big|_R = 0$$

[1],[2] Petrov Yu. V., Laser and Particle Beams, 2005

Постановка задачи (3)

Используется широкодиапазонная двухтемпературная модель электронной теплопроводности:

[1]

$$k = \frac{c_e \overline{v^2}}{3\nu^{WR}}$$

где $\overline{v^2} = \sqrt{\left(\frac{6E_F}{5m_e}\right)^2 + \left(\frac{3k_B T}{m_e}\right)^2}$ – средний квадрат электронной скорости,

c_e – электронная теплоемкость;

E_F – энергия Ферми;

k_B – постоянная Больцмана; m_e – масса электрона;

ν^{WR} – широкодиапазонная частота столкновений;

Частота ν^{WR} сшивается из ν_{ee}^{pl} , ν_{ee}^c , ν_{ei}^{pl} , ν_{ei}^c , где индексы ee и ei относятся к электрон-электронным и электрон-ионным столкновениям, а индексы c и pl – к конденсированной среде и плазме. Смысл использования широкодиапазонной частоты состоит в том, чтобы получить единую удобную для вычислений формулу для коэффициента k :

$$\nu^{WR} = \left((\nu_{ee}^c)^{-2} + (\nu_{ee}^{pl})^{-2} \right)^{-\frac{1}{2}} + \left((\nu_{ei}^c)^{-2} + (\nu_{ei}^{pl})^{-2} \right)^{-\frac{1}{2}}$$

В качестве ν_{ee}^{pl} , ν_{ee}^c , ν_{ei}^{pl} , ν_{ei}^c используются известные аппроксимации для соответствующих состояний вещества.

[1] Inogamov N. A., Appl. Surf. Sci., 2009

Постановка задачи (4)

[1]

Используется широкодиапазонное полуэмпирическое уравнение состояния:

$$P = P_e + P_i + P_{ei}$$

$$P_e = \frac{1}{5} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \left(\frac{y}{V}\right)^{\frac{5}{3}} + T_e \left(\frac{y}{V}\right) \left(1 + \frac{2}{5} \varphi\right)^{-1}$$

$$P_i = \frac{T_i}{V} \frac{1 + 3\lambda \left(\frac{1}{2} - \frac{d \ln y_c(V)}{d \ln V}\right) \Gamma}{1 + \lambda \Gamma}$$

$$P_{ei} = -\frac{1}{5} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \left(\frac{y_0}{V_0}\right)^{\frac{5}{3}} \left(\frac{V_0}{V}\right)^{\frac{4}{3}} \frac{1 + \delta}{1 + [\delta + (1 + \delta) T_e / T^*] \left(\frac{V}{V_0}\right)^\gamma}$$

$$\varepsilon_e = \frac{3}{2} V P, \varepsilon_i = \frac{3}{2} T_i \frac{1 + 2\lambda \Gamma}{1 + \lambda \Gamma}$$

Где $\Gamma = \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{y_c^2(V)}{V^{\frac{1}{3}} T_i}$, $\varphi = \frac{\frac{1}{2} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \left(\frac{y}{V}\right)^{\frac{2}{3}}}{T_e}$, а y находится из уравнения ионизации:

$$\mu_F \left(\frac{y}{V}, T_e\right) + I(y) - B(V, T_e) = 0$$

В уравнении μ_F – химический потенциал идеального ферми-газа, $I(y)$ – ионизационный потенциал. $B(V, T_e)$ – отрицательная поправка, назначение которой – описание холодной ионизации.

V_0, γ, δ, T^* – параметры, определяемые из известных значений плотности, энергии сублимации, изотермической сжимаемости, коэффициента теплового расширения.

[1] Basko M. M., Appl. Surf. Sci., 1985

Решение

Расщепление по физическим процессам:

Гидродинамика:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{\rho} \right) + \frac{\partial v}{\partial m} &= 0 \\ \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial m} &= 0 \\ \frac{\partial \varepsilon_e}{\partial t} + P_e \frac{\partial v}{\partial m} &= J_L \\ \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial t} + P_i \frac{\partial v}{\partial m} &= 0\end{aligned}$$

+ уравнение состояния

Электронная теплопроводность:

$$c_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial m} \left(k \rho \frac{\partial T_e}{\partial m} \right)$$

Электронно-ионный обмен энергией:

$$c_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = - \frac{\alpha_{ei}}{\rho} (T_e - T_i)$$

$$c_i \frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{\alpha_{ei}}{\rho} (T_e - T_i)$$

Решение

Аппроксимация физических величин производилась следующим образом: кинематические параметры, координата и скорость, брались на границах ячеек, в целых точках. Термодинамические же параметры – плотность, электронные и ионные температуры, давления и энергии аппроксимировались в полуцелых точках, в центрах ячеек. Также в центрах ячеек аппроксимируются теплоемкости c_e и c_i и коэффициент теплопроводности k .

Гидродинамика:

$$\frac{v_i^{n+1} - v_i^n}{\tau} = \frac{P_{i+1/2}^{n+1} - P_{i-1/2}^{n+1} + P_{i+1/2}^n - P_{i-1/2}^n}{\tau}$$

$$\frac{x_i^{n+1} - x_i^n}{\tau} = \frac{v_{i+1/2}^{n+1} + v_{i+1/2}^n}{2}$$

$$\frac{1/\rho_{i+1/2}^{n+1} - 1/\rho_{i+1/2}^n}{\tau} = \frac{v_{i+1/2}^{n+1} + v_{i+1/2}^n - v_i^{n+1} - v_i^n}{2}$$

$$\frac{\varepsilon_{ei+1/2}^{n+1} - \varepsilon_{ei+1/2}^n}{\tau} = - \left(\frac{P_{ei+1/2}^{n+1} + P_{ei+1/2}^n}{2} \right) \frac{v_{i+1/2}^{n+1} + v_{i+1/2}^n - v_i^{n+1} - v_i^n}{2h} + J_{Li}^n$$

$$\frac{\varepsilon_{ii+1/2}^{n+1} - \varepsilon_{ii+1/2}^n}{\tau} = - \left(\frac{P_{ii+1/2}^{n+1} + P_{ii+1/2}^n}{2} \right) \frac{v_{i+1/2}^{n+1} + v_{i+1/2}^n - v_i^{n+1} - v_i^n}{2h}$$

Электронная теплопроводность:

$$\frac{\tau \rho_{i+1/2}^n}{h^2} k_i^{n+1} \rho_i^n T_{ei-1/2}^{n+1} - \left(\frac{\tau \rho_{i+1/2}^n}{h^2} (k_i^{n+1} \rho_i^n + k_{i+1}^{n+1} \rho_{i+1}^n) + c_{ei+1/2}^{n+1} \right) T_{ei+1/2}^{n+1} + \frac{\tau \rho_i^n}{h^2} k_{i+1}^{n+1} \rho_{i+1}^n T_{ei+3/2}^{n+1}$$

$$= c_{ei+1/2}^{n+1} (T_{ei+1/2}^n)$$

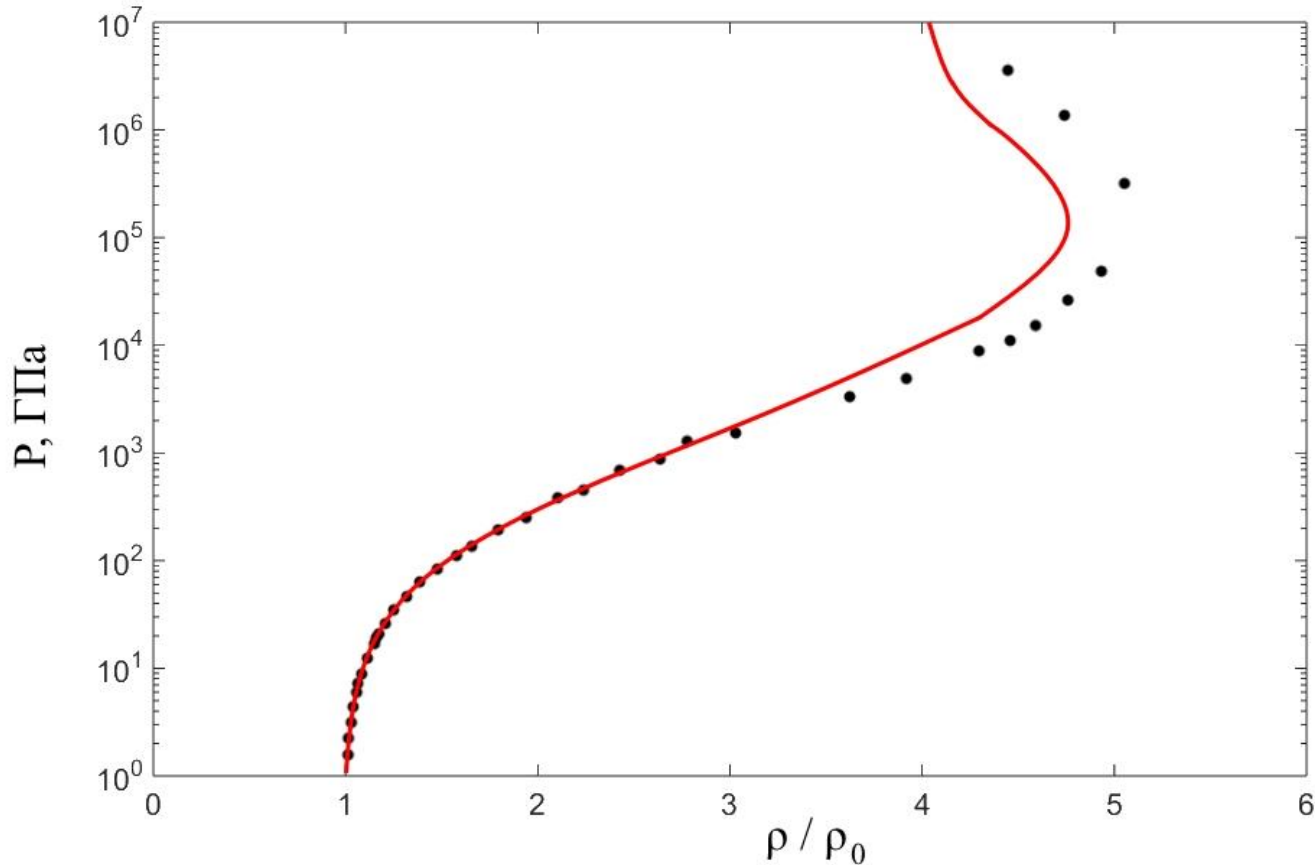
Электронно-ионный обмен энергией:

$$\frac{c_{ei+1/2}^{n+1} (T_{ei+1/2}^{n+1} - T_{ei+1/2}^n)}{\tau} = -\alpha_{ei+1/2}^n (T_{ei+1/2}^{n+1} - T_{ii+1/2}^n)$$

$$\frac{c_{ii+1/2}^{n+1} (T_{ii+1/2}^{n+1} - T_{ii+1/2}^n)}{\tau} = -\alpha_{ei+1/2}^n (T_{ei+1/2}^{n+1} - T_{ii+1/2}^n)$$

Результаты

Для проверки широкодиапазонного уравнения состояния была построена ударная адиабата алюминия:

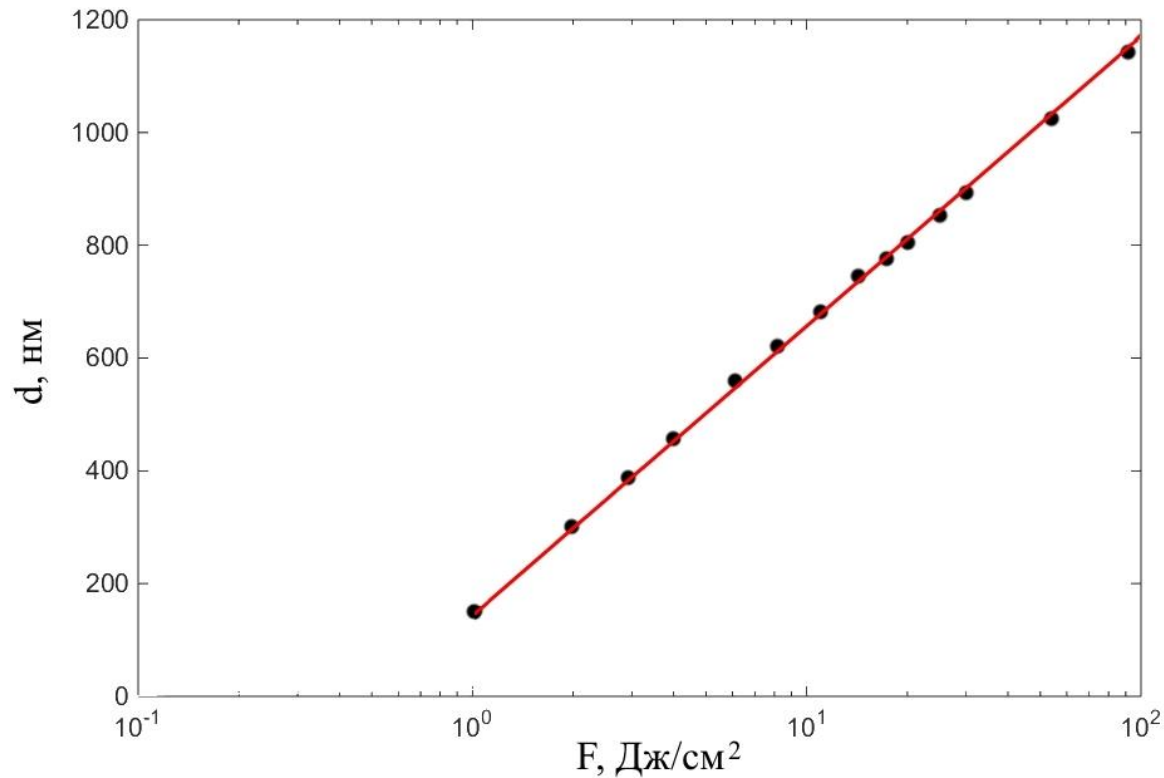


Ударная адиабата алюминия в координатах давление – степень сжатия. Сплошная линия – расчет по предложенному в работе уравнению состояния. Точки – экспериментальные данные [1]

[1] Trunin F., Russian Federal Nuclear Center - VNIIEF, Sarov, 2001

Результаты

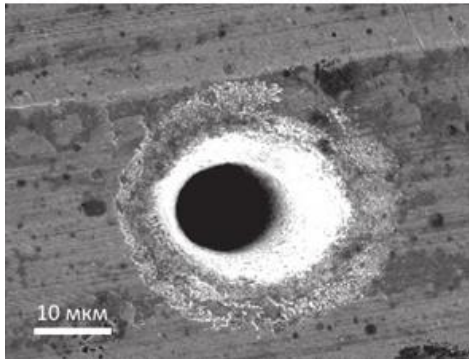
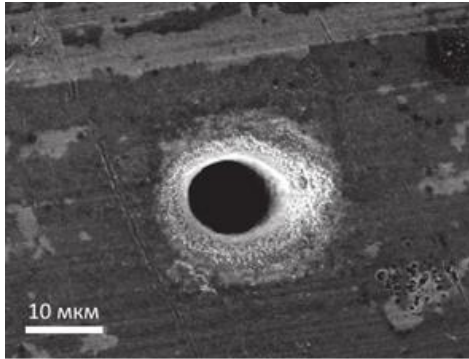
Проведено моделирование лазерной абляции алюминиевой пластины толщиной 100 мкм, фемтосекундным лазерным импульсом длительностью 100 фс, с длиной волны 800 нм.



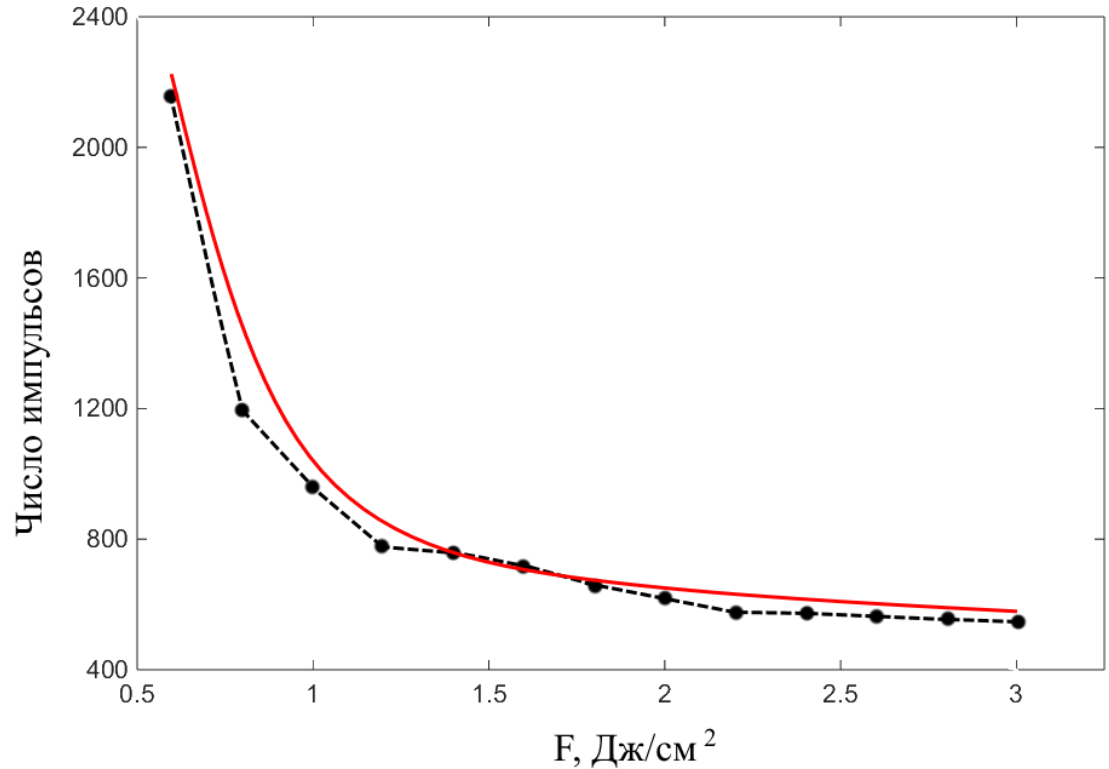
Глубина абляции алюминия при воздействии на него фемтосекундным лазерным импульсом в зависимости от величины плотности энергии. Сплошная линия – результаты моделирования. Точки – экспериментальные данные [1]

[1] Zhang J., Chen Y., Journal of Applied Physics, 2015

Результаты



Фотографии пробитой алюминиевой пластины многочисленными лазерными импульсами с плотностями 1 и 3 Дж/см² [1]



Зависимость необходимого количества импульсов для пробития насквозь алюминиевой пластины толщиной 100 мкм от плотности энергии лазерного излучения. Сплошная линия – результаты моделирования. Пунктирная – экспериментальные данные [2]

[1], [2] Zhang J., Chen Y., Journal of Applied Physics, 2015

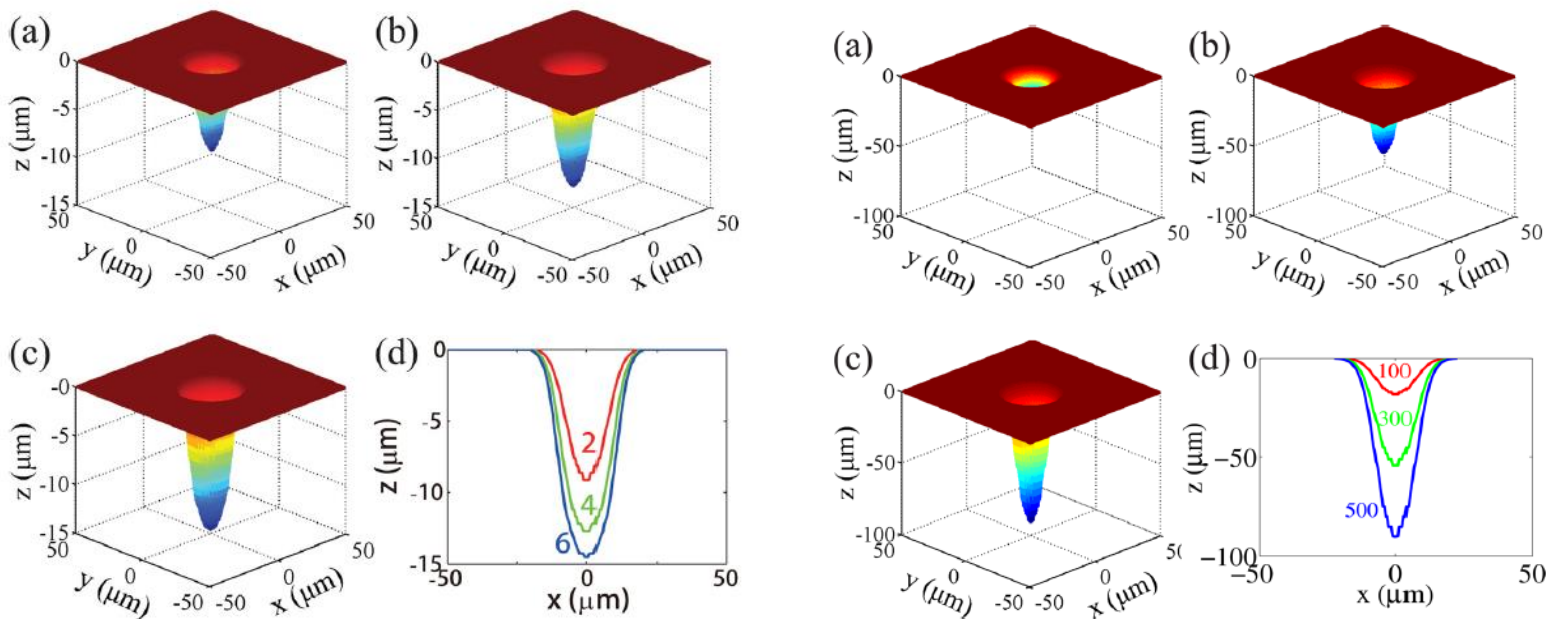
Выводы

- Разработана двухтемпературная гидродинамическая модель взаимодействия фемтосекундных лазерных импульсов с металлами.
- Создан программный код для численного моделирования лазерной абляции металлов в одномерном приближении.
- Проведен анализ моделей уравнений состояния и транспортных коэффициентов металлов, применимых для моделирования абляции. Выбраны модели, удовлетворяющие необходимым требованиям на широкодиапазонность и двухтемпературность.
- Проведено численное исследование абляции алюминиевой пластины при воздействии лазерным импульсом, длительностью 100 фс, с длиной волны 800 нм.
- Обнаружено хорошее согласование расчетной глубины абляции с экспериментальными данными в широком диапазоне плотностей энергий. Показано, что зависимость глубины абляции при фемтосекундном воздействии от величины плотности энергии логарифмическая, что подтверждается многочисленными экспериментами.
- Показано что, при плотностях энергии $1-3 \frac{\text{Дж}}{\text{см}^2}$ для пробития алюминиевой пластины толщиной 100 мкм необходимое число импульсов сокращается с ростом плотности, но достигнув минимальных значений (около 570), далее убывает весьма медленно.

Дальнейшие направления исследований

Планируется более детально рассмотреть физические процессы с учетом фазовых переходов, включая критическую точку, при высоких плотностях мощности подвода энергии.

Возможно расширение модели на двумерный случай и трехмерный случай для исследования профиля кратера, образующегося после лазерной абляции.



[1]

[1] Zhang J., Chen Y., Journal of Applied Physics, 2015

Спасибо за внимание!