Archive of SID

چهاردهمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران

۱۳۸۶ دانشگاه وليعصر (عج) رفسنجان، ۹ تا ۱۱ بهمن ماه ۱۳۸۶ 14th Conference on Optics and Photonics Rafsanjan Vali-e-Asr University, 29-31 January 2008



بررسی عددی تغییر در مکانیزم کندگی لیزری بر اثر افزایش انرژی پالس

سید حسن توسلی، مرتضی خلجی

تهران، اوین، دانشگاه شهید بهشتی، پژوهشکده لیزر و پلاسما

چکیده – در این مقاله یک مدل عددی بر پایه مکانیزم تبخیر عادی و فاز انفجاری، برای تخمین عمق کندگی توسط پالس لیزری برای دو نمونه مس و آلومینیوم مورد بررسی قرار گرفته است. توزیع دمائی در ماده با استفاده از معادله پخش گرمائی و سود جستن از روش Finite difference محاسبه شده است . نتایج نشان میدهند که برای هر دو نمونه یک انرژی آستانهای وجود دارد که مکانیزم کندگی غالب برای انرژیهای پائین تر از آن به صورت تبخیر عادی و برای انرژیهای بالاتر به صورت فاز انفجاری است.

> کلید واژه- کندگی لیزری، تبخیر عادی، انفجار فازی، گذار دیالکتریک. کد PACS – ۱۴۰٬۳۴۴۰،۰۰۰٬۴۴۳۰

۱– مقدمه

کندگی لیزری (Laser Ablation) فرایندی است که بر پایه أن قسمتي از سطح ماده جامد توسط پالس ليزري كنده مي شود. این اثر در بسیاری از زمینه های مربوط به تکنولوژی ليزر همچون جوشكاري ليزري، برش توسط ليزر، ايجاد لايه های نازک و همچنین در تکنیکهای مربوط به پردازش مواد از قبیل ICP و LIBS جایگاه ویژهای دارد[1-3]. با این وجود، مكانيزم فرايند كندگي ليزري، به خصوص براي پالسهائي با انرژی بالا، به طور کامل درک نشده است. هنگامیکه باریکه ليزرى با سطح نمونه جامد برهمكنش مى كند اثرات نسبتا پیچیده ای رخ می دهد که بستگی به عواملی همچون انرژی پالس ليزري، طول موج، نوع ماده هدف (فلز، غير فلز) و غیره خواهد داشت. در مقالات چاپ شده تا کنون، مدلهای گوناگونی برای توصیف کندگی لیزری ارائه شده است. بسیاری از این مدلها بر پایه فرایندهای گرمائی استوار هستند به طوری که برای فلزات و همچنین شبه فلزات سه مکانیزم کلی را میتوان از این دیدگاه مورد توجه قرار داد كه عبارتند از [10-4]:

 ۱) تبخیر عادی (Normal vaporization): هنگامی که پالس لیزر در نقطهای از نمونه مورد نظر (سطح جامد)، متمرکز میشود دما در سطح افزایش پیدا کرده و با رسانش گرمائی به لایه های زیرین، نمونه به تدریج ذوب شده و به تبخیر

میرسد. در این مدل که نوعا مستقل از طول پالس لیزری است، نرخ تبخیر توسط معادلات هرتز- نودسن قابل بیان خواهد بود و عمق کندگی ناشی از تبخیر را میتوان با انتگرالگیری زمانی از معادله "سرعت سطحی بازگشت" که در ادامه به آن اشاره میشود تعیین کرد.

۲) جوش ناهمگن(Heterogeneous boiling): در این نوع مکانیزم که برای پالسهائی با مقیاس زمانی بزرگ رخ می-دهد (2μ s)، نمونه فرصت کافی برای ذوب شدن و رسیدن به دمای جوش (T_b) را خواهد داشت. در این صورت است که گذار فازی- از مایع به بخار- در ناحیه های کوچک (Nucleation site) شروع شده و باعث به وجود آمدن ناهمگن حبابهای کوچک در ناحیه مذاب می گردد. در این حالت دمای سطح در T_b ثابت شده و به خاطر وجود این حالت دمای سطح در مائی تشکیل نمی شود حبابهای بخار، گرادیان دمائی تشکیل نمی شود ($0 \approx T/\partial x$ می

۳) جوش انفجاری یا فاز انفجاری (Phase explosion): برای پالسهائی با مقیاس زمانی کوچک و برای شدتهای معینی بالاتر از یک حد آستانه، دمای سطح میتواند به ۰٫۹*T* برسد (*T* دمای بحرانی ترمودینامیکی که بالاتر از حد ابر گرمایش است). در این حالت نرخ تشکیل حبابهای همگن هسته مانند به سرعت افزایش مییابند که این امر موجب



جوش انفجاري (Explosive boiling) ويا همان فاز انفجاري می گردد. در واقع مایع ابر گرم شده طی یک گذار سریع به مخلوطی تعادلی از بخار و قطرههای مایع تبدیل خواهد شد. از طرفی دیگر قبل از رسیدن دمای سطح و لایه های زیرین ، T_c آن به دمای T_c مایع ابر گرم شده در دمای T_c افت و خیز بزرگی را در چگالی خود تحمل خواهد کرد به طوری که این ناحیه را اصطلاحا ناحیه شروع "شرایط غیر عادی" مینامند. در این شرایط فلز خصوصیات عادی خود را به خاطر پراکندگی الکترونی ناشی از افت و خیزهای چگالی از دست میدهد. رسانائی الکتریکی فلز کاهش یافته و فلز مذاب شده (مایع فلزی) توسط قسمتهای ابتدائی پالس لیزری، به مایع دیالکتریک تبدیل میشود. با کاهش رسانائی الکتریکی فلز، مقادیر بازتاب و ضریب جذب برای ادامه پالس لیزری کاهش چشمگیری را خواهند داشت. در این حالت می توان ماده را برای ادامه پالس لیزری، شفاف در نظر گرفت و جذب تابش فرودی برای ضخامت دی-الكتريك ضعيف خواهد شد. از اين فرايند معمولا با عنوان

"گذار دیالکتریک" یاد میکنند[11]. در این مقاله یک مدل عددی بر پایه مکانیزم تبخیر عادی و فاز انفجاری، برای تخمین عمق کندگی توسط پالس لیزری بر حسب افزایش انرژی، مورد بررسی قرار گرفته است. برای پالسهائی با شدتهای معین و بالاتر از یک حد آستانه، گذار از حالت تبخیرعادی به فاز انفجاری برای دو نمونه مس و آلومینیوم با هم مقایسه شده است. همچنین دمای سطح در هر لحظه، عمق ذوب شدگی ماده و ضخامت لایه دیالکتریک در خلال

برهمکنش لیزر با هر دو نمونه محاسبه شده است.

| Parameter | Symbols | Values for Cu | Values for Al |
|---|---------------|---|------------------------|
| Mass of Cu atom (kg) | m | 1.06×10^{-25} | 4.48×10 ⁻²⁶ |
| Thermal condectivity (W m ⁻¹ K ⁻¹) | λ | 380 (solid), 170 (liquid) | 235(solid, liquid) |
| Mass denssity (kg m ⁻³) | ρ | 8960 (solid), 8000 (liquid) 2700(solid, liquid) | |
| Specific heat (J kg ⁻¹ K ⁻¹) | C_p | 420 (solid), 494 (liquid) | 940 (solid, liquid) |
| Melting point (K) | T_m | 1358 | 933.5 |
| Boiling point (K) | T_{b} | 2836 | 2793.15 |
| Critical temperature (K) | T_{c} | 8280 | 5410 |
| Heat of vaporization (J/mol) | L_{ev} | 3.048×10 ⁵ | 105×10 ⁵ |
| Absorption coefficient (m^{-1}) | α | 7.44×10^{7} | 1.38×10^{8} |
| Absorption coefficient at $0.8 T_c \text{ (m}^{-1})$ | $\alpha_{_d}$ | 7×10^{5} | 1.38×10^{6} |
| Reflectivity at room temperature | R | 0.8 | 0.8 |
| Reflectivity at 0.8 T | <i>R</i> . | 0.1 | 0.1 |

جدول ۱: خصوصیات نوری و گرمائی برای نمونههای مس و آلومینیوم استفاده شده درمحاسبات.

377

www.SID.ir

۲- مدل عددی

در حین برهمکنش پالس لیزری با نمونه، لایه هائی با دمای بالا در سطح و زیر سطح ماده جامد ایجاد می شود به طوری که دمای بالای خود را با رسانائی گرمائی به درون ماده منتقل می کنند. بدین طریق توزیع دمائی در ماده با استفاده از معادله پخش گرمائی و سود جستن از روش Finite difference مورد محاسبه قرار می گیرد. در خلال پالس لیزری، توزیع فضائی دما در نمونه، در هر مرحله زمانی، از برهمنهی سه حالت زیر بدست میآید: ۱) گرمایش ناشی از جذب انرژی لیزر ۲) خنکشدگی سطح نمونه بر اثر تبخیر ۳) خنکشدگی ناشی از رسانش گرمائی به لایههای زیرین. در این مدل سعی ما بر این بوده است که معادله انتقال گرمائی را با به حساب آوردن عوامل: رسانائی گرمائی، نقطه ذوب ماده هدف، تبخیر عادی، گذار دی الکتریک و فاز انفجاری مورد محاسبه قرار دهیم. تغیرات لازم در خصوصیات نوری ماده، در نقطه ذوب آن و همچنین در گذار دیالکتریک طبق جدول شماره (۱) در برنامه لحاظ شده است[8,11]. در این محاسبات برای سادهتر شدن برنامه از تاثير حفاظ پلاسمائي (Plasma shielding) و همچنين انتقال انرژی از نمونه به گاز، صرفنظر شده است.

1-1 معادلات حاکم در مدل

در خلال برهمکنش لیزر با فلز، انرژی پالس لیزری به صورت کوانتومهای نوری یا همان فوتونها، جذب الکترونها شده و باعث بالاتر رفتن تراز انرژی الکترونها در باند هدایت میشوند. در این حالت الکترونهای تحریک شده، انرژی خود را، از طریق برخورد با فونونها از دست میدهند و بدین Archief SID

ترتیب، با انتقال انرژی از فونونها به ساختار شبکهای فلز، ماده گرم میشود. از آنجائیکه زمان واهلش انرژی در این فرایند برای اکثر فلزات در حدود fs = 100 - 10 تخمین زده شده است[10]، به همین دلیل برای پالسهای لیزری نانو ثانیه میتوان چنین نتیجه گرفت که انرژی فوتونها با برخورد به فلز تقریبا به طور لحظهای تبدیل به گرما میشوند. بنابراین مفهوم دما و رسانائی گرمائی برای چنین پالسهائی قابل قبول خواهد بود. از طرفی دیگر، با توجه به این حقیقت مابل قبول خواهد بود. از طرفی دیگر، با توجه به این حقیقت مرتبه ای در حدود $1/\alpha$ است، و از آنجائیکه این مقدار در مقایسه با قطر باریکه پالس لیزری متمرکز شده بر روی مطح ماده (که در حدود 100μ میباشد) خیلی کوچکتر سطح ماده (که در حدود 100μ

$$c_{p}\rho[\frac{\partial T(t,z)}{\partial t} - u(t)\frac{\partial T(t,z)}{\partial z}] = \frac{\partial}{\partial z}\lambda\frac{\partial T(t,z)}{\partial z} + \dot{q}_{(1)}$$

t در این معادله \mathcal{Z} ، محور مختصات عمود بر سطح نمونه و زمان است. q,T,λ,ρ,C_p به ترتیب گرمای ویژه ماده هدف، چگالی جرمی، رسانندگی گرمائی، توزیع دمائی در ماده و منبع گرمائی برای گرم کردن نمونه می باشند. u(t)را سرعت بازگشت سطحی مینامیم و خواهیم داشت:

$$u(t) = \beta p_b (2\pi n k_B T_{sur})^{-1/2} \exp[\frac{L_{ev}}{k_B} (\frac{1}{T_b} - \frac{1}{T_{sur}})] \quad (2)$$

در این معادله، β ضریب تبخیر، p_b فشار در نقطه جوش (که معمولا نزدیک به 0.1Mpaاست)، m جرم یک اتم نمونه، L_{ev} گرمای تبخیری، T_b, T_s به ترتیب دمای سطح و دمای جوش ماده می باشند. با انتگرال گیری زمانی از معادله (۲) عمق کندگی ناشی از تبخیر بدست میآید[9]. یک مشخصه مهم در مکانیزم کندگی بر پایه تبخیر عادی، خنک شدگی سطح بر اثر گرمای تبخیر می باشد که به عنوان یک شرط مرزی مهم با استفاده از تعریف سرعت سطحی بازگشت به صورت زیر در حل معادله (۱) بیان می شود:

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial z}\Big|_{z=0,t} = L_{ev}u(t)$$
(3)

از طرفی دیگر معادله (۱) با یک شرط مرزی و یک شرط

$$T(z,t=0) = T_{atm} \quad , \ T(\infty,t) = T_{atm} \tag{4}$$

که در آن $T_{atm} = 300K$ دمای محیط میباشد. باید توجه داشت که در هر لحظه محور مختصات با سطح نمونه حرکت می کند بطوری که همیشه نقطه 0 = zروی سطح قرار می گیرد. همانطور که در بالا اشاره شد، جذب انرژی پالس لیزری توسط نمونه، باعث بالا رفتن دمای نمونه می گردد، قبل از رسیدن دمای نمونه به ΛT_c ، معادله منبع گرمائی به صورت زیر در نظر گرفته می شود:

$$\dot{q} = \alpha (1 - R) I(t) e^{-\alpha z} \tag{5}$$

I(t) که در اینجا α ضریب جذب، R ضریب بازتاب و α نمونه شدت تابشی پالس لیزری است. در خلال گرمایش نمونه توسط پالس لیزری، پروفایل زمانی مناسب برای آن در لیزر Nd:YAG Q-Switch

$$I(t) = I_{\max}(\frac{t}{t_{\max}})^7 \exp[7(1 - \frac{t}{t_{\max}})]$$
(6)

 I_{max} ماکزیمم شدت تابشی لیزر، $t_{\text{max}} = 10ns$ زمانی را نشان می دهد که انرژی لیزر به ماکزیمم رسیده است. در این محاسبات ماکزیمم شدت تابشی لیزر از ۰٫۸ تا ۲ گیگا وات بر سانتی متر مربع در نظر گرفته شده است. از طرف دیگر هنگامی که دمای نمونه در اثر پالس لیزری افزایش می یابد و به Λ_r ۰ می رسد شرایط غیر عادی برای فلز شروع شده و گذار دی الکتریک اتفاق می افتد در این حالت لایه دی الکتریک تشکیل شده و تولید گرما در این لایه، ناشی از پالس لیزری به صورت زیر است:

$$\dot{q} = \alpha_d (1 - R_d) I_0(t) e^{-\alpha_d z} \tag{7}$$

در اینجا $\alpha_d \alpha_d R_d$ به ترتیب ضرایب جذب و بازتاب در دی-الکتریک هستند. همانطور که در شکل (۱) ملاحظه می شود، ضخامت دی الکتریک در نزدیک سطح تشکیل شده و از آنجائیکه ضرایب جذب و بازتاب ($\alpha_d \alpha_d$) در این ناحیه کاهش می یابند، انرژی لیزر تابشی از طریق این لایه به لایه های زیرین که هنوز در حالت ذوب شده هستند می رسد. در این حالت پالس لیزری یک فصل مشترک جدید را میان مایع دی الکتریک و فلز ذوب شده می بیند، آهنگ



شکل ۱: جذب نور لیزر در خلال گذار دی الکتریک گرمایش برای لایههای زیرین فلزی به صورت زیر است[11]: $\dot{q} = lpha (1-R)(1-R_d) I \ (t) e^{-lpha_d} e^{-lpha(z-d)}$ (8) که b در اینجا ضخامت لحظه ای لایه دی الکتریک است.

۲-۲- بحث و نتایج

دمای لحظهای سطح برای دو نمونه آلومینیوم و مس در خلال پالس لیزری برای چهار انرژی مختلف پالس در شکل(bgar) با هم مقایسه ۰,9 T_c شده است. همانطور که در بالا نیز اشاره گردید فاز انفجاری در اتفاق میافتد که این مقدار برای آلومینیوم و مس به ترتیب برابر با ۴۸۶۹ و ۶۶۲۴ درجه کلوین میباشد. بنابراین برای رسیدن به چنین دمائی، انرژی پالس باید از یک حد معینی (حد آستانه) بیشتر باشد که به وضوح در شکل برای هر دو نمونه گذار انرژی به بالاتر از آستانه دیده می شود. برای انرژی های پائین تر از آستانه و درخلال برهمکنش لیزر با نمونه، دمای سطح به ماکزیمم مقدار خود رسیده و بعد از آن به تدریج کاهش می یابد در این حالت عمق کندگی تنها توسط مکانیزم تبخیر عادی در برنامه محاسبه می گردد. برای توصیف هر چه بهتر روند افزایش دمای لحظهای سطح نسبت به زمان برای انرژیهای بالاتر از آستانه، در شکل (bوt) نقاط A تا E به طور نمادین برای پالسی با انرژی افزایش میابد (نقطه A) بدین ترتیب با برهمکنش ادامه Gw/cm^2 میابد (نقطه) می علامت گذاری شده است. بعد از رسیدن ابتدای پالس لیزری به نمونه دمای سطح تا نقطه ذوب ماده



SID

شکل ۲ : دمای لحظهای سطح برای انرژیهای مختلف لیزر (a) نمونه آلومینیوم (b) نمونه مس

۰٫۸ T_c با سطح نمونه، دما بالاتر رفته و در زمان B به T_c بالس لیزری با سطح نمونه، دما بالاتر رفته و در زمان T_c میرسد به طوری که در این مرحله گذار دیالکتریک رخ میدهد . در نقطه C با رسیدن دمای سطح به T_c (طبق مکانیزم فاز انفجاری) Cکندگی از نمونه آغاز می گردد و تا زمان D ادامه خواهد داشت. در ادامه با تحلیل رفتن انرژی پالس و همچنین رسانائی گرمائی به لایههای زیرین دمای سطح روندی نزولی پیدا می کند به طوری که در زمان E دمای سطح کمتر از T_c شده و با گذشت زمان به دمای محیط میرسد. در این حالت عمق کندگی توسط هر دو مکانیزم تبخیر عادی و فاز انفجاری در برنامه محاسبه می گردد. در هر دو شکل دیده می شود هر افزایشی در انرژی پالس لیزری، زمان رسیدن دمای سطح را به ماکزیمم مقدار خود کاهش میدهد. این موضوع به وضوح برای انرژیهای بالاتر از آستانه، قابل مشاهده است. شکل (۳ aوb) ضخامت لایه دیالکتریک و ناحیه مذاب را در خلال پالس لیزری نشان میدهد. نقاط A تا E در شکل (bوr) بیانگر همان زمانهای توصیف داده شده برای پالسی با انرژی A میباشد. بدین ترتیب در زمان A سطح ذوب A انرژی A مطح شده و از طریق رسانش گرمائی به لایههای زیرین ضخامت ناحیه مذاب افزایش می یابد با رسیدن دمای سطح به T_c ، (نقطه B) ضخامت لایه دیالکتریک به تندی افزایش یافته و همانند شکل (۱)، ناحیه مذاب بین دو ناحیه دیالکتریک و نمونه جامد قرار می گیرد. با افزایش ضخامت دىالكتريك، آهنگ صعودى ضخامت ناحيه مذاب كند مى شود اما به دلیل رسانش گرمائی به لایههای داخلی تر ماده و ذوب شدن آنها، ضخامت ناحیه مذاب همچنان سیر صعودی خود را حفظ خواهد کرد. (همانطور که می توان دید برای انرژیهای پائین تر از آستانه، به خاطر صفر بودن ضخامت لایه دیالکتریک، روند صعودی ناحیه مذاب در خلال پالس لیزر حفظ شده است). در نهایت قبل از پایان پالس لیزری یعنی در زمان E ، دمای سطح کمتر از T_c ، T_c شده و ضخامت لایه

Archief SID

دیالکتریک صفر می شود در این حالت ناحیه مذاب همچنان در حال گسترش می باشد. ضخامت لایه مذاب تا دها نانوثانیه بعد از پالس لیزر به خاطر رسانش گرمائی سطوح با دمای بالا، گسترش می ابد و به تدریج به دمای محیط رسیده و به حالت جامد تبدیل می شوند. همانطور که در شكل ملاحظه مى شود با افزايش (كاهش) انرژى پالس ليزر نقاط A ، A و C به سمت زمانهای کوچکتر (بزرگتر) و نقطه D به سمت زمانهای بزرگتر (کوچکتر) میل میکنند. با توجه به اینکه در این برنامه دو مکانیزم تبخیر عادی و فاز انفجاری برای هر انرژی پالس به طور همزمان محاسبه می شوند شکل (baf) مقدار کندگی لیزری و نوع مکانیزم غالب در این کندگی را بر حسب افزایش انرژی پالس نشان میدهد. مشاهده می شود در هر دو شکل یک انرژی آستانه ای وجود دارد که مکانیزم کندگی غالب برای انرژیهای پائینتر از آن به صورت تبخیر عادی و برای انرژیهای بالاتر به صورت فاز انفجاری است. همانطور که می توان دید آهنگ گذار از تبخیر عادی به فاز انفجاری برای نمونه آلومینیوم، بر خلاف مس، به تندی صورت گرفته است به طوری که نمی توان انرژی دقیقی به آن نسبت داد. انرژی مورد نیاز برای رسیدن به ۰٫۹*T* برای آلومینیوم تقریبا برابر با ۰٫۹۲۲ Gw/cm² و برای مس 1,0 Gw/cm² مے باشد.

۳- نتیجهگیری

در این مقاله یک مدل عددی بر پایه مکانیزم تبخیر عادی و فاز انفجاری، برای تخمین عمق کندگی توسط پالس لیزری بر حسب افزایش انرژی از ۰٫۸ تا ۲ گیگا وات بر سانتیمتر مربع در نظر گرفته شد. محاسبات نشان میدهد گذار از حالت تبخیرعادی به فاز انفجاری برای دو نمونه مس و



شکل ۳ : عمق ناحیه مذاب و ضخامت لحظهای لایه دیالکتریک در انرژیهای مختلف لیزر (۵) نمونه آلومینیوم و (b) نمونه مس



شکل۴: مقدار کندگی لیزری و نوع مکانیزم غالب درکندگی بر حسب افزایش انرژی پالس (a) آلومینیوم و (b) مس

آلومینیوم به ترتیب در انرژیهای ۰٫۹۱۱Gw/cm² و ۱٫۵ Gw/cm² رخ میدهد.

مراجع

- J. Li and G. K. Ananthasuresh, J. Micromech. Microeng. 11, 38, 2001.
- [2] H. Kim, J. S. Horwitz, G. P. Kushto, Z. H. Kafafi, and D. B. Chrisey, *Appl. Phys. Lett.*, **79**, 284, 2001.
- [3] D. Bleiner, Z. Chen, D. Autrique and A. Bogaerts, Journal of Analytical Atomic Spectrometry, 21, 910, 2006.
- [4] A. Bogaerts, Z. Chen, R. Gijbels, A.Vertes, Spectrochimica Acta Part B, 58, 1867, 2003.
- [5] M. Bulgakova, A. V. Bulgakov, *Applide physics A*, **73**, 199, 2001.
- [6] A. Miotello and R. Kelly, Appl. Phys. Lett. 67, 24, 1995.
- [7] Q. Lu, *Physical Review* **67**, 2003.
- [8] Z. Chen and A. Bogaerts, Journal Of Applied Physics, 97, 2005.
- [9] Q. Lu, S. Mao, X. Mao, and R. E. Russo, Applied Physics Letters, 80, 2002.
- [10] D. Bleiner, A. Bogaerts, Spectrochimica Acta Part B, 61, 421, 2006.
- [11] C. Porneala, D. A. Willis, International Journal of Heat and Mass Transfer, 49, 1928, 2006.