



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 پائین‌تر از آن به صورت تبخیر عادی و برای انرژی‌های بالاتر به صورت فاز انفجاری است.

کلید واژه- کندگی لیزری، تبخیر عادی، انفجار فازی، گذار دی‌الکتیک.

کد PACS - ۱۴۰,۳۴۴۰,۰۰۰,۴۴۳۰

۱- مقدمه

کندگی لیزری (Laser Ablation) فرایندی است که بر پایه آن قسمتی از سطح ماده جامد توسط پالس لیزری کنده می‌شود. این اثر در بسیاری از زمینه‌های مربوط به تکنولوژی لیزر همچون جوشکاری لیزری، برش توسط لیزر، ایجاد لایه‌های نازک و همچنین در تکنیک‌های مربوط به پردازش مواد از قبیل ICP و LIBS جایگاه ویژه‌ای دارد [1-3]. با این وجود، مکانیزم فرایند کندگی لیزری، به خصوص برای پالس‌های با انرژی بالا، به طور کامل درک نشده است. هنگامیکه باریکه لیزری با سطح نمونه جامد برهم‌کنش می‌کند اثرات نسبتاً پیچیده‌ای رخ می‌دهد که بستگی به عواملی همچون انرژی پالس لیزری، طول موج، نوع ماده هدف (فلز، غیر 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 که عبارتند از [4-10]:

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 لایه‌های زیرین، نمونه به تدریج ذوب شده و به تبخیر

می‌رسد. در این مدل که نوعاً 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 پالس‌هایی با مقیاس زمانی بزرگ رخ می‌دهد ($\geq 1\mu s$)، 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 ناحیه‌های کوچک (Nucleation site) شروع شده و باعث به وجود آمدن ناهمگن حباب‌های کوچک در ناحیه مذاب می‌گردد. در این حالت دمای سطح در $T_b \approx$ ثابت شده و به خاطر وجود حباب‌های بخار، گرادیان دمائی تشکیل نمی‌شود ($\partial T/\partial x \approx 0$) و در ادامه پالس لیزری هر چه دما بالاتر می‌رود برای تغییر فاز مایع به بخار صرف می‌شود.

۳) جوش انفجاری یا فاز انفجاری (Phase explosion): برای پالس‌هایی با مقیاس زمانی کوچک و برای شدت‌های معینی بالاتر از یک حد آستانه، دمای سطح می‌تواند به $0.9T_c$ برسد (T_c 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

۲- مدل عددی

در حین برهمکنش پالس لیزری با نمونه، لایه هائی با دمای بالا در سطح و زیر سطح ماده جامد ایجاد می‌شود به طوری که دمای بالای خود را با رسانائی گرمائی به درون ماده منتقل می‌کنند. بدین طریق توزیع دمائی در ماده با استفاده از معادله پخش گرمائی و سود جستن از روش Finite difference مورد محاسبه قرار می‌گیرد. 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. تغییرات 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 تاثیر حفاظ پلاسمائی (Plasma shielding) و همچنین انتقال انرژی از نمونه به گاز، صرف‌نظر شده است.

۲-۱- 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 الکترونها حرکت کرده، انرژی خود را، از طریق برخورد با فونونها از دست می‌دهند و بدین

جوش انفجاری (Explosive boiling) و با همان فاز انفجاری می‌گردد. 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 آن به دمای $0.9 T_c$ مایع ابر گرم شده در دمای $0.8 T_c$ افت و خیز بزرگی را در چگالی خود تحمل خواهد کرد به طوری که این ناحیه را اصطلاحاً 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 می‌توان ماده را برای ادامه پالس لیزری، شفاف در نظر گرفت و جذب تابش فرودی برای ضخامت دی-الکتریک ضعیف خواهد شد. از این فرایند معمولاً 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 پالسهای با شدتهای معین و بالاتر از یک حد آستانه، گذار از حالت تبخیر عادی 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 conductivity ($W m^{-1} K^{-1}$)	λ	380 (solid), 170 (liquid)	235 (solid, liquid)
Mass density ($kg m^{-3}$)	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 $0.8 T_c$ (m^{-1})	α_d	7×10^5	1.38×10^6
Reflectivity at room temperature	R	0.8	0.8
Reflectivity at $0.8 T_c$	R_d	0.1	0.1

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

اولیه دیگر به صورت زیر همراهی می‌شود:

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

که در آن $T_{atm} = 300K$ ، دمای محیط می‌باشد. باید توجه داشت که در هر لحظه محور مختصات با سطح نمونه حرکت می‌کند بطوری که همیشه نقطه $z = 0$ روی سطح قرار می‌گیرد. همانطور که در بالا اشاره شد، جذب انرژی پالس لیزری توسط نمونه، باعث بالا رفتن دمای نمونه می‌گردد، قبل از رسیدن دمای نمونه به $0.8T_c$ ، معادله منبع گرمایی به صورت زیر در نظر گرفته می‌شود:

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

که در اینجا α ضریب جذب، R ضریب بازتاب و $I(t)$ شدت تابشی پالس لیزری است. در خلال گرمایش نمونه توسط پالس لیزری، پروفایل زمانی مناسب برای آن در لیزر Nd:YAG Q-Switch به صورت زیر است [11]:

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

I_{max} ماکزیمم شدت تابشی لیزر، $t_{max} = 10ns$ زمانی را نشان می‌دهد که انرژی لیزر به ماکزیمم رسیده است. در این محاسبات ماکزیمم شدت تابشی لیزر از 0.8 تا 2 گیگا وات بر سانتی‌متر مربع در نظر گرفته شده است. از طرف دیگر هنگامی که دمای نمونه در اثر پالس لیزری افزایش می‌یابد و به $0.8T_c$ می‌رسد شرایط غیر عادی برای فلز شروع شده و گذار دی‌الکتریک اتفاق می‌افتد در این حالت لایه دی‌الکتریک تشکیل شده و تولید گرما در این لایه، ناشی از پالس لیزری به صورت زیر است:

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

در اینجا α_d و R_d به ترتیب ضرایب جذب و بازتاب در دی‌الکتریک هستند. همانطور که در شکل (۱) ملاحظه می‌شود، ضخامت دی‌الکتریک در نزدیک سطح تشکیل شده و از آنجائیکه ضرایب جذب و بازتاب (R_d و α_d) در این ناحیه کاهش می‌یابند، انرژی لیزر تابشی از طریق این لایه به لایه‌های زیرین که هنوز در حالت ذوب شده هستند می‌رسد. در این حالت پالس لیزری یک فصل مشترک جدید را میان مایع دی‌الکتریک و فلز ذوب شده می‌بیند، آهنگ

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 $10 - 100fs$ تخمین زده شده است [10]، به همین دلیل برای پالسهای لیزری نانو ثانیه می‌توان چنین نتیجه گرفت که انرژی فوتونها با برخورد به فلز تقریباً به طور لحظه‌ای تبدیل به گرما می‌شوند. بنابراین مفهوم دما و رسانائی گرمائی برای چنین پالسهای قابل قبول خواهد بود. از طرفی دیگر، با توجه به این حقیقت که طول جذب در مس ($l_{abs} = 1/\alpha$ ضریب جذب) از مرتبه ای در حدود $10nm$ است، و از آنجائیکه این مقدار در مقایسه با قطر باریکه پالس لیزری متمرکز شده بر روی سطح ماده (که در حدود $100\mu m$ می‌باشد) خیلی کوچکتر است می‌توان برای ساده‌سازی، معادله رسانائی گرمائی را در یک بعد حل کرد [4]:

$$c_p \rho \left[\frac{\partial T(t, z)}{\partial t} - u(t) \frac{\partial T(t, z)}{\partial z} \right] = \frac{\partial}{\partial z} \left[\lambda \frac{\partial T(t, z)}{\partial z} \right] + \dot{q} \quad (1)$$

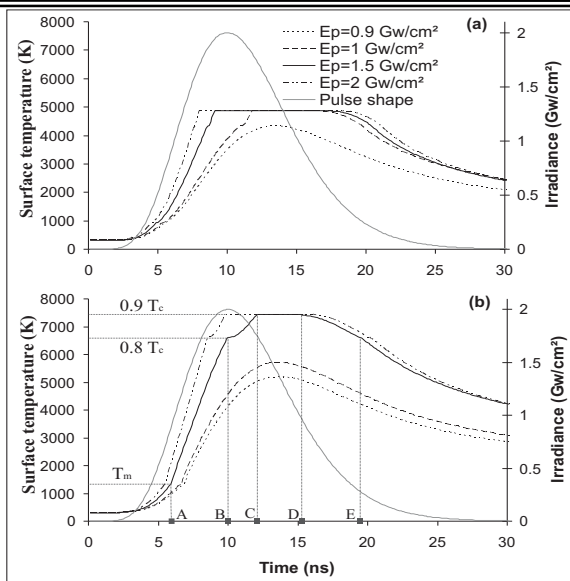
در این معادله z ، محور مختصات عمود بر سطح نمونه و t زمان است. \dot{q} ، T ، λ ، ρ ، C_p به ترتیب گرمای ویژه ماده هدف، چگالی جرمی، رسانندگی گرمائی، توزیع دمائی در ماده و منبع گرمائی برای گرم کردن نمونه می‌باشند. $u(t)$ را سرعت بازگشت سطحی می‌نامیم و خواهیم داشت:

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

در این معادله، β ضریب تبخیر، p_b فشار در نقطه جوش (که معمولاً نزدیک به $0.1Mpa$ است)، m جرم یک اتم نمونه، L_{ev} گرمای تبخیری، T_s ، T_b به ترتیب دمای سطح و دمای جوش ماده می‌باشند. با انتگرال‌گیری 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 می‌باشد که به عنوان یک شرط مرزی مهم با استفاده از تعریف سرعت سطحی بازگشت به صورت زیر در حل معادله (۱) بیان می‌شود:

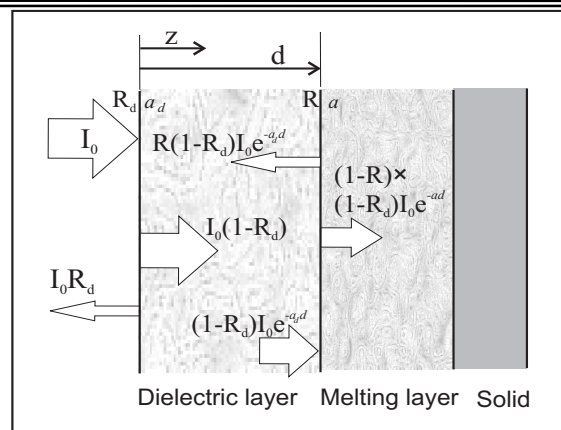
$$-\lambda \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=0, t} = L_{ev} u(t) \quad (3)$$

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



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

پالس لیزری با سطح نمونه، دما بالاتر رفته و در زمان T_c به $0.8 T_c$ می‌رسد به طوری که در این مرحله گذار دی‌الکتریک رخ می‌دهد. در نقطه C با رسیدن دمای سطح به $0.9 T_c$ (طبق مکانیزم فاز انفجاری) کندی از نمونه آغاز می‌گردد 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 می‌کند به طوری که در زمان E دمای سطح کمتر از $0.8 T_c$ شده و با گذشت زمان به دمای محیط می‌رسد. در این حالت عمق کندی توسط هر دو مکانیزم تبخیر عادی و فاز انفجاری در برنامه محاسبه می‌گردد. در هر دو شکل دیده می‌شود 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 و b) ضخامت لایه دی‌الکتریک و ناحیه مذاب را در خلال پالس لیزری نشان می‌دهد. نقاط A تا E در شکل (۳ و b) بیانگر همان زمانهای توصیف داده شده برای پالسی با انرژی 1.5 Gw/cm^2 می‌باشد. بدین ترتیب در زمان A سطح ذوب شده و از طریق رسانش گرمائی به لایه‌های زیرین ضخامت ناحیه مذاب افزایش می‌یابد با رسیدن دمای سطح به $0.8 T_c$ (نقطه B) ضخامت لایه دی‌الکتریک به تندی افزایش یافته و همانند شکل (۱)، ناحیه مذاب بین دو ناحیه دی‌الکتریک و نمونه جامد قرار می‌گیرد. با افزایش ضخامت دی‌الکتریک، آهنگ صعودی ضخامت ناحیه مذاب کند می‌شود اما به دلیل رسانش گرمائی به لایه‌های داخلی‌تر ماده و ذوب شدن آنها، ضخامت ناحیه مذاب همچنان سیر صعودی خود را حفظ خواهد کرد. (همانطور که می‌توان دید برای انرژی‌های پائین‌تر 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 $0.8 T_c$ شده و ضخامت لایه



شکل ۱: جذب نور لیزر در خلال گذار دی‌الکتریک

گرمایش برای لایه‌های زیرین فلزی به صورت زیر است [11]:

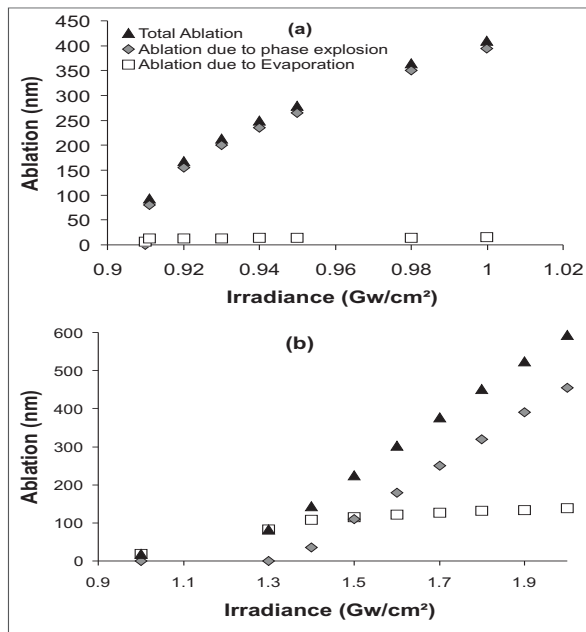
$$\dot{q} = \alpha(1-R)(1-R_d)I(t)e^{-\alpha_d d} e^{-\alpha(z-d)} \quad (8)$$

که d در اینجا ضخامت لحظه‌ای لایه دی‌الکتریک 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 (۲ و b) با هم مقایسه شده است. همانطور که در بالا نیز اشاره گردید فاز انفجاری در $0.9 T_c$ 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 می‌شود. برای انرژی‌های پائین‌تر از آستانه و در خلال برهمکنش لیزر با نمونه، دمای سطح به ماکزیمم مقدار خود رسیده و بعد از آن به تدریج کاهش می‌یابد در این حالت عمق کندی تنها توسط مکانیزم تبخیر عادی در برنامه محاسبه می‌گردد. برای توصیف هر چه بهتر روند افزایش دمای لحظه‌ای سطح نسبت به زمان برای انرژی‌های بالاتر از آستانه، در شکل (۲ و b) نقاط A تا E به طور نمادین برای پالسی با انرژی افزایش می‌یابد (نقطه A) بدین ترتیب با برهمکنش ادامه 1.5 Gw/cm^2 علامت گذاری شده است. بعد از رسیدن ابتدای پالس لیزری به نمونه دمای سطح تا نقطه ذوب ماده

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



شکل ۴: مقدار کندگی لیزری و نوع مکانیزم غالب در کندگی بر حسب افزایش انرژی پالس (a) آلومینیوم و (b) مس

آلومینیوم به ترتیب در انرژی‌های 0.911 Gw/cm^2 و 1.5 Gw/cm^2 رخ می‌دهد.

مراجع

- [1] 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, *Appl. Phys. Lett.*, **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.

دی‌الکتریک صفر می‌شود در این حالت ناحیه مذاب همچنان در حال گسترش می‌باشد. ضخامت لایه مذاب تا ده‌ها نانوثانیه بعد از پالس لیزر به خاطر رسانش گرمایی سطوح با دمای بالا، گسترش می‌یابد و به تدریج به دمای محیط رسیده و به حالت جامد تبدیل می‌شوند. همانطور که در شکل ملاحظه می‌شود با افزایش (کاهش) انرژی پالس لیزر نقاط A، B، C و D 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 می‌شوند شکل (b) مقدار کندگی لیزری و نوع مکانیزم غالب در این کندگی را بر حسب افزایش انرژی پالس نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود در هر دو شکل یک انرژی آستانه‌ای 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 می‌توان دید آهنگ گذار از تبخیر عادی به فاز انفجاری برای نمونه آلومینیوم، بر خلاف مس، به تندی صورت گرفته است به طوری که نمی‌توان انرژی دقیقی به آن نسبت داد. انرژی مورد نیاز برای رسیدن به $0.9 T_c$ برای آلومینیوم تقریباً برابر با 0.911 Gw/cm^2 و برای مس 1.5 Gw/cm^2 می‌باشد.

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 0.8 تا 2 گیگا وات بر سانتی‌متر مربع در نظر گرفته شد. محاسبات نشان می‌دهد گذار از حالت تبخیر عادی به فاز انفجاری برای دو نمونه مس و

