

## شبیه سازی فرایند کندوسوز لیزری از عناصر فلزی تیتانیوم و روی توسط لیزر نانوثانیه نئودیمیم-یاگ در محیط آب مقطر

مهسا پاشازاده<sup>۱</sup>، الناز ایرانی<sup>۲\*</sup>، میر مقصود گلزان<sup>۱</sup> و رسول صدیقی بناپی<sup>۳</sup>

<sup>۱</sup>گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه ارومیه، ارومیه

<sup>۲</sup>گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه تربیت مدرس، تهران

<sup>۳</sup>دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شریف، تهران

چکیده- کند و سوز لیزری در محیط مایع یکی از روش های پاک برای تولید نانوذرات با ویژگی های مختلف است. در این مقاله فرایند کندوسوز لیزری و پارامترهای موثر بر ویژگیهای نانوذرات تولیدی از دو عنصر تیتانیم و روی در محیط آب مقطر به ارتفاع یک سانتی متر از سطح فلز بررسی شده است. بدین منظور از لیزر نئودیمیم-یاگ با پهنای پالس ۱۰ نانو ثانیه، طول موج ۱۰۶۴ نانومتر و قطر کانونی ۲۰۰ میکرومتر استفاده شده است. محاسبات با در نظر گرفتن تاثیر محیط آب مقطر و اثر تعداد مختلف پالس لیزر در نرخ کندگی مورد بررسی قرار گرفته است. توزیع دما روی سطح فلز، میزان کندگی و شار آستانه کندگی به روش المان محدود و توسط نرم افزار کامسول مولتی فیزیک به دست آمده است.

کلمات کلیدی: تیتانیوم، روی، لیزر نئودیمیم-یاگ، کندو سوز لیزری

### Simulation of laser ablation process of titanium and zinc metal elements by nanosecond Nd: YAG laser in distilled water

Mahsa Pashazadeh<sup>1</sup>, Elnaz Irani<sup>2\*</sup>, Mir Maghsoud Golzan<sup>1</sup>, Rasoul Sadighi- Bonabi<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Department of Physics, Urmia University, Urmia, Iran

<sup>2</sup>Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Tarbiat Modares University, Iran

<sup>3</sup>Department of Physics, Sharif University of Technology, Tehran, Iran

Abstract- Laser ablation in liquid solution is a green method for producing nanoparticles with different characteristics. In this paper, laser ablation process and effective parameters on both of titanium and zinc elements in a distilled water environment at a height of 1 cm from the surface of the metal is investigated. For this purpose, the Nd: YAG laser with a time duration of 10 ns, wavelength of 1064, focal diameter of 200 $\mu$ m is used. The simulation is based on considering the effects of the water environment and the number of laser pulses. The distribution of temperature on the metal surface and the fluence thresholds is determined by finite element method using Comsol Multiphysics Package.

Keywords: Titanium, Zinc, Nd:Yag laser, laser ablation

## ۱- مقدمه

موثر در نرخ کندگی از دو عنصر تیتانیوم و روی مورد بررسی قرار گیرد. نانوذرات تولیدی از دو عنصر تیتانیوم و روی نیز به عنوان ذرات پراکنده در محیط رنگینه برای تولید لیزر کاتوره ای گزینه بسیار مناسبی هستند. شبیه سازی مذکور با کمک نرم افزار کامسول و به روش مدل المان محدود و استفاده از مشخصات لیزر نئودیمیوم یاگ با پهنای پالس ۱۰ نانو ثانیه، طول موج ۱۰۶۴ نانومتر با قطر کانونی ۲۰۰ میکرومتر در محیط آب مقطر انجام شده است. توزیع دما روی سطح فلز، عمق و شعاع کندگی برای تعداد شات های ۱، ۲، ۳ و ۱۰ محاسبه شده و نیز با تغییر در شار ورودی لیزر شار آستانه کندگی برای این دو فلز مورد توجه محاسبه و مقایسه شده است.

## ۲- مدل مسئله:

در این مقاله برای مدل سازی از مدل انتقال حرارت دو سیالی استفاده شده است. یکی از جنبه های اصلی این مدل، بررسی پویایی نرخ تولید گرما توسط پارامترهای پالس لیزر است. معادلات انتقال حرارت در یک مختصات استوانه ای دو بعدی بر اساس روش المان محدود حل شده است.

فرآیند انتشار گرما برای دو فلز تیتانیوم و روی بر اساس معادله هدایت گرمایی شبیه سازی شده است:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot \{k \nabla T\} + Q \quad (1)$$

که  $\rho$  چگالی ماده،  $C_p$  ظرفیت گرمایی ویژه،  $T$  دما،  $K$  هدایت حرارتی و  $Q$  منبع گرما است. با توجه به قانون بیر لامبرت منبع گرما به صورت زیر بیان می شود [۵]:

$$Q = I(t) \exp\left[-\frac{2r^2}{\omega^2}\right] \alpha (1 - R) \exp(-\alpha z) \quad (2)$$

$I(t)$  شدت لیزر،  $\omega$  شعاع لیزر در نقطه کانونی،  $\alpha$  ضریب جذب و  $R$  ضریب بازتاب است. محاسبات معادله انتقال حرارت با در نظر گرفتن اندازه قطعه فلزی با شعاع ۱ میلیمتر و ارتفاع آب ۱۰ میلیمتر و محصورسازی نمونه با

تا کنون روش های متعددی برای تولید نانو مواد صورت گرفته است که اغلب نیازمند دمای بالا، زمان بر و غیرپاک هستند. یکی از روش های متداول و پاک در زمان محدود برای تولید نانو ذرات کند و سوز لیزر پالسی است. با کانونی کردن تابش کانونی لیزر با چگالی بالای انرژی بر روی هدف فلزی هاله پلاسما ایجاد میشود و گسیل گرمایونی بر اساس مکانیزم تابش ترمزی معکوس اتفاق می افتد. موج ضربه ای به علت تغییر ناگهانی در ویژگی های دمایی و فشار محیط ایجاد می شود. ذرات ایجاد شده در اثر تابش لیزر در مایع پراکنده می شوند. ذرات کنده شده فلزی در محیط آب مقطر با اکسیژن ترکیب شده و اکسید فلزی به عنوان فراورده واکنش ایجاد می شود که پارامترهای لیزر، ویژگی های هدف و مشخصات محیط مایع در ویژگی های ساختاری نانوذرات تولیدی اثر گذارند. ویژگی مهم روش کند و سوز لیزری پالسی فراهم کردن نانو ذرات خالص و فارغ از محصولات جانبی است. کند و سوز لیزری در محیط مایع از دیدگاه کاربردی و تجهیزات مورد نیاز روشی مناسب تر و کم هزینه تر نسبت به تولید نانو ذرات در محیط گازی و خلا می باشد و یک روش ایمن، مستقیم و سریع برای تولید نانو ذرات کنترل شده و از پیش تعریف شده است [۱]. پیچیده بودن ساز و کار در محیط مایع و دشواری جمع آوری داده های آزمایشگاهی در مراحل آغازین کند و سوز در محیط مایع دست به دست هم داده و پیشنهاد سازوکارهای کمی مناسب را دور از دسترس ساخته است. خاموشی سریع گدازه در محیط مایع، محصور شدن آن و اثر حفره زایی از عوامل مؤثر بر عدم درک دقیق ساز و کارهای موجود به شمار میرود [۲-۴]. لذا به دلایل اهمیت موضوع و جدید بودن روش تولید نانوذرات، ارائه یک مدل جامع تئوری که بتواند بر محدودیتهای امکانات تجربی نیز غلبه کند ضروریست. لذا در این کار تلاش شده است با ارائه یک مدل دقیقتر همراه با ملاحظه تاثیر محیط آب، عوامل

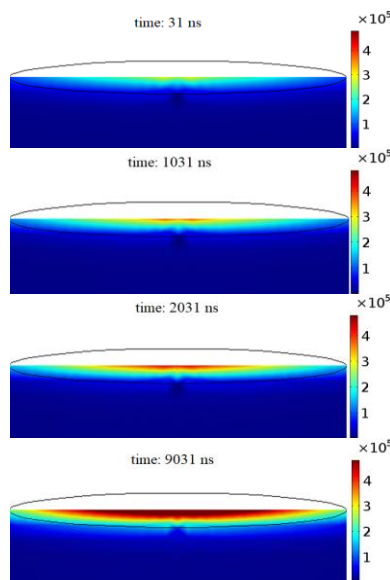
تعداد پالس های ۱ و ۲ و ۳ و ۱۰

تعداد پالس	۱	۲	۳	۱۰
تیتانیوم (میکرومتر)	۳۰۰.۱	۳۰.۵۱	۳۱.۴۹	۴۲.۰۳
روی (میکرومتر)	۴۰۰.۰۶	۴۳.۲۴	۴۵.۰۱	۶۵.۶۰

جدول ۲: شعاع کندگی برای دو عنصر تیتانیوم و روی در تعداد پالس های ۱، ۲، ۳ و ۱۰

تعداد پالس	۱	۲	۳	۱۰
تیتانیوم (میکرومتر)	۲۱۴.۰۴	۲۱۴.۳۴	۲۱۴.۴۳	۲۲۱.۵۷
روی (میکرومتر)	۲۱۹.۱۶	۲۲۰.۵۰	۲۲۶.۴۰	۲۴۲.۵۱

تحول زمانی توزیع دما در ساختار دو بعدی در شکل ۲ و ۳ برای فلز تیتانیوم و روی نمایش داده شده است و تصویری دو بعدی از شکل حفره کندگی در تعداد پالس های مختلف لیزر نمایش می دهد. دمای سطح فلز تیتانیوم در شرایط یکسان تابش لیزر به صورت قابل توجی بالاتر از سطح فلز روی است. حد اکثر دما در تابش ۱۰ پالس لیزر و در زمان ۹۰۳۱ نانو ثانیه در نزدیکی سطح تیتانیوم و در نقطه کانونی پالس لیزر تا ۵۲۶۱۳۹ درجه کلوین و در سطح روی تا ۲۷۲۰۱۱ درجه کلوین افزایش می یابد.

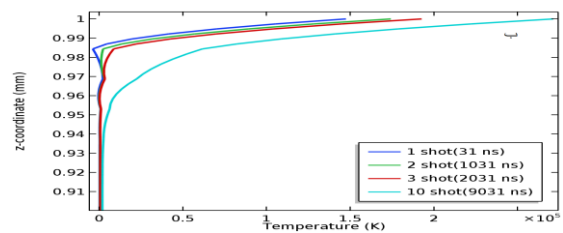
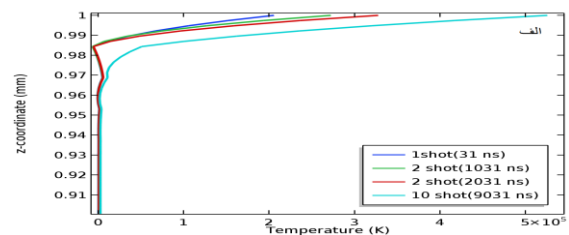


شکل ۲: توزیع دما در سطح تیتانیوم برای تعداد پالس های ۱، ۲، ۳ و ۱۰

شعاع 1.2 میلیمتر انجام شده است. که با توجه به اندازه قطر لکه لیزر برابر ۲۰۰ میکرومتر، ابعاد مناسبی انتخاب شده است. مش بندی با دقت 0.2 میکرومتر صورت گرفته است و معادلات با مراتب زمانی ۱ نانو ثانیه حل شده است. همچنین باریکه لیزر به صورت کاملاً گاوسی فرض شده است و فواصل زمانی بین پالس های لیزر ۱۰۰۰ نانو ثانیه است.

### ۳- نتایج شبیه سازی

در شکل ۱ تغییرات دمایی برای دو فلز تیتانیوم و روی در راستای Z برای تعداد پالس ۱، ۲، ۳ و ۱۰ با انرژی ۲۸۵ میلی ژول در زمانی که دمای سطح به ازای هر پالس به حد اکثر مقدار خود رسیده است نمایش داده شده است. حد اکثر دما ۳۱ نانو ثانیه پس از شروع هر پالس لیزر حاصل می شود.



شکل ۱: تغییرات دمایی برای دو فلز الف (تیتانیوم، ب) روی، در راستای Z برای تعداد پالس ۱، ۲، ۳ و ۱۰ در زمانی که دمای سطح به ازای هر پالس به حد اکثر مقدار خود رسیده است.

با توجه به دمای جوش تیتانیوم و روی که به ترتیب برابر ۳۵۶۰ و ۱۱۸۰ درجه کلوین است حداکثر عمق کندگی و شعاع کندگی در تعداد پالس های مختلف برای این دو عنصر به ترتیب در جدول ۱ و ۲ آورده شده است. جدول ۱: حد اکثر عمق کندگی برای دو عنصر تیتانیوم و روی در

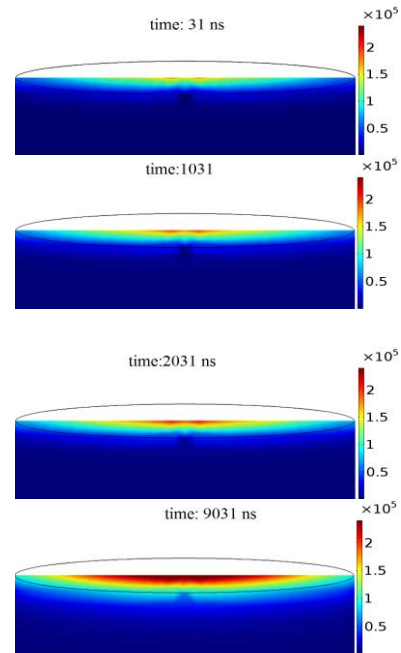
۱۰۰۰ نانو ثانیه، عمق و شعاع گندگی و نیز تحولات زمانی توزیع دمایی بر روی سطح فلزات تیتانیوم و روی در محیط آب مقطر به دست آمده است. بدین منظور با ارائه یک مدل جامع عوامل موثر در فرایند کندوسوز لیزری آنالیز شده است. میزان گندگی در شرایط یکسان تابش لیزر بر روی فلز برای بیشتر از تیتانیوم است. شدت آستانه گندگی نیز برای فلز روی برابر ۱۰۲۱۰ و برای فلز تیتانیوم برابر ۳۰۴۲۱۸ ژول بر سانتی متر مربع محاسبه شده است.

### سپاسگزاری

نویسندگان مقاله مراتب سپاسگذاری را از حمایت مداوم آزمایشگاه تحقیقاتی لیزر دانشگاه صنعتی شریف دارند.

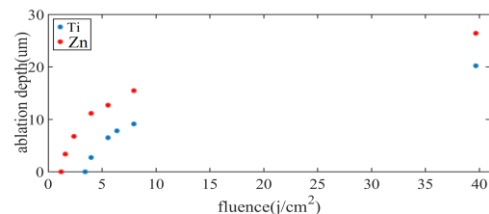
### مراجع

- [1] V. Amendola, M. Meneghetti, "Laser ablation synthesis in solution and size manipulation of noble metal nanoparticles", Phys. Chem. Chem. Phys., vol.11, pp.3805-3821, 2009.
- [2] C. Y. Shih, M. V. Shugaev, C. Wu, L. V. Zhigilei, "Generation of Subsurface Voids, Incubation Effect, and Formation of Nanoparticles in Short Pulse Laser Interactions with Bulk Metal Targets in Liquid: Molecular Dynamics Study", J. Phys. Chem. C, vol. 121, pp.16549-16567, 2017.
- [3] V. Oliveira, R. Vilar, "Finite element simulation of pulsed laser ablation of titanium carbide", Appl. Surf. Sci., vol. 253, pp.7810-7814, 2007.
- [4] H. S. Lim, J. Yoo, "FEM based simulation of the pulsed laser ablation process in nanosecond fields", J. Mech. Sci. Tech., vol.7, No.25, pp.1811-1816, 2011.
- [5] J. T. Houghton, *The Physics of atmospheres 2nd edition*, Cambridge University press, Cambridge, United Kingdom 2002.



شکل ۳: توزیع دما در سطح روی برای تعداد پالس های ۱، ۲۰، ۳۰ و ۱۰

همچنین اثر انرژی پالس لیزر به عنوان پارامتر موثر در میزان تغییرات دما و نرخ گندگی برای یک تک پالس لیزر برای چند شار انرژی لیزر نشان داده شده است و شار آستانه برای هر یک از دو عنصر تیتانیوم و روی محاسبه شده است.



شکل ۴: مقایسه نرخ گندگی دو عنصر تیتانیوم و روی در شار های مختلف انرژی.

مطابق شکل در شرایط یکسان نرخ گندگی برای فلز روی حدود ۱۰۵ برابر تیتانیوم است که به دلیل پایین بودن آستانه گندگی برای فلز روی در مقایسه با فلز تیتانیوم می باشد.

### ۴- نتیجه گیری

در این مقاله با استفاده از لیزر پالسی با طول موج ۱۰۶۴ نانومتر، پهنای پالس ۱۰ نانو ثانیه، قطر کانونی ۲۰۰ میکرومتر و ملاحظه فواصل زمانی بین پالس های لیزر