



بیست و یکمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران
و هفتمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران
۲۳ تا ۲۵ دی ماه ۱۳۹۳، دانشگاه شهید بهشتی



شبیه‌سازی اتم‌گرایانه برهم‌کنش پالس لیزر فمتوثانیه با هدف آلومینیوم

سحرسادات شریعتی، ارحام عمویی، علیرضا نیکنام

پژوهشکده لیزر و پلاسما، دانشگاه شهید بهشتی، تهران

این پژوهش به شبیه‌سازی برهم‌کنش لیزر فمتوثانیه با فلز آلومینیوم با استفاده از مدل تلفیقی دودمای و دینامیک مولکولی پرداخته است. مدل دودمای به توصیف تحولات دمایی الکترونها و دینامیک مولکولی به توصیف تبدیلات فازی که در شرایط بسیار غیر تعادلی که با تابش لیزر فوق‌کوتاه القا شده است، می‌پردازد. این دو زیرسیستم توسط جمله جفت‌شدگی با هم ترکیب شده‌اند. شبیه‌سازی برای شار جذب شده $200 J/m^2$ انجام شده و تحولات دمای الکترون و شبکه، تغییرات انرژی و تبدیلات فازی ارائه شده است.

کلیدواژه: دینامیک مولکولی، مدل دودمای.

Atomistic simulation of femtosecond laser pulse interaction with Al target

Sahar Sadat Shariati, Arham Amouie, Ali Reza Niknam

Laser and Plasma Research Institute, Shahid Beheshti University, Tehran

In this study, simulation of femtosecond laser interaction with aluminum has been investigated using the combined two-temperature model and molecular dynamics. The two-temperature model describes the evolution of the electron temperature and molecular dynamics is used to describe phase transformations occurring under highly non-equilibrium condition induced by ultrashort laser irradiation. These two subsystem are combined using a coupling term. The simulation is performed for an absorbed fluence of $200 J/m^2$ and the evolution of electron and lattice temperatures, energy changes and phase transformations are presented.

Keywords: molecular dynamics, two temperature model.

$$C_e(T_e) = \gamma_{th}(1 + \lambda)T_e \quad (۴)$$

$$\gamma_{th} = \pi^2 n_e k_B^2 / 2\mathcal{E}_F$$

از طرفی رسانایی گرمایی به شکل زیر تعریف می شود. که v_F سرعت فرمی است و τ زمان واهلش ممتوم الکترون است، A و B ضرایب ثابت هستند.

$$k(T_e, T_l) = C_e(T_e)v_F^2\tau/3 \quad (۵)$$

$$\frac{1}{\tau} = \nu = \nu_{e-e} + \nu_{e-ph} = AT_e^2 + BT_l$$

منبع گرما نیز به شکل یک پالس گاوسی تعریف شده است.

$$S(z, t) = b\beta I(0, t) \exp(-bz) \quad (۶)$$

که $I(0, t)$ همان پالس گاوسی فرودی است که به شکل زیر تعریف می شود و در آن I_0 ، ماکزیمم توان چگالی لیزر است.

$$I(0, t) = I_0 \exp\left[-\frac{(4 \ln 2)t^2}{(\tau_p)^2}\right] \quad (۷)$$

که β جذب پذیری و b ضریب جذب هدف است.

$$\beta = 1 - R = \sqrt{\frac{4\pi c \epsilon_0 (1 + \alpha(T_e + T_0))}{\lambda_0 \sigma_0}} \quad (۸)$$

$$b = \sqrt{\frac{4\pi \sigma_0}{\lambda_0 c \epsilon_0 (1 + \alpha(T_e + T_0))}}$$

با جای گذاری معادلات (۷) و (۸) در معادله (۶) و معادله (۴) و (۵) در رابطه (۱)، معادله پخش برای دمای الکترونی به شکل زیر به دست می آید.

$$C_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial t} = k_0 \frac{BT_e}{AT_e^2 + BT_l} \frac{\partial^2}{\partial x^2} T_e \quad (۹)$$

$$- G(T_e - T_l)$$

$$+ C \exp\left[-\frac{(4 \ln 2)t^2}{(\tau_p)^2}\right] \times \exp\left[-\left[\frac{D}{1 + \alpha(T_e(x, t) - T_0)}\right]^{0.5} x\right]$$

که در معادله بالا $k_0 = \frac{\nu_F^2 \gamma_{th} (1 + \lambda)}{3B}$ و $C = 4\pi n_0 / \lambda_0$

در نظر گرفته شده است و $G = 4\pi \sigma_0 / \lambda_0 c \epsilon_0$ پارامتر جفت شدگی، ثابت فرض شده است و α ضریب مقاومت حرارتی فلز است [۵].

۳- نتایج

شبیه سازی مورد نظر با لیزر فمتوثانیه با پهنای پالس

۱- مقدمه

تابش لیزرهای پالس کوتاه بر مواد مختلف می تواند آن ها را به حالت غیرتعادلی برساند و فرصت مناسبی برای بررسی رفتار مواد فراهم کند. در میان لیزرهای پالس کوتاه، لیزر فمتوثانیه می تواند از بعضی جهات مکانیزم برهم کنش لیزر- ماده را به طور بنیادی دست خوش تغییر کند [۱، ۲]. بنابراین بررسی برهم کنش لیزر با ماده (کندوسوز لیزری) اهمیت بسیاری دارد [۳]. در گذشته فعالیت های کندوسوز لیزری با روش آزمون خطا و بدون مدل نظری قاطع توسعه یافته بود. اما امروزه شبیه سازی کامپیوتری نقش موثری در مدل سازی برهم کنش لیزر با ماده دارد، که اغلب به شرایط تجربی بسیار نزدیک است. با توجه به مطالب فوق این مقاله به اختصار به بررسی شبیه سازی برهم کنش لیزر فمتوثانیه با آلومینیوم به روش ترکیبی دینامیک مولکولی MD و دودمایی TTM می پردازد.

۲- معادلات اساسی

در این مدل ترکیبی، دینامیک مولکولی جایگزین معادله دودمایی برای شبکه می شود تا توصیفی واقع- گرایانه از فرآیند برهم کنش لیزر با فلز ارائه دهد [۴]. از طرفی معادله پخش برای دمای الکترونی، با روش تفاضل متناهی FD به طور همزمان با انتگرال گیری از معادله حرکت نیوتن حل می شود. دمای الکترونی وارد جمله جفت شدگی می شود که وظیفه مبادله انرژی میان الکترون و شبکه را دارد [۵، ۶].

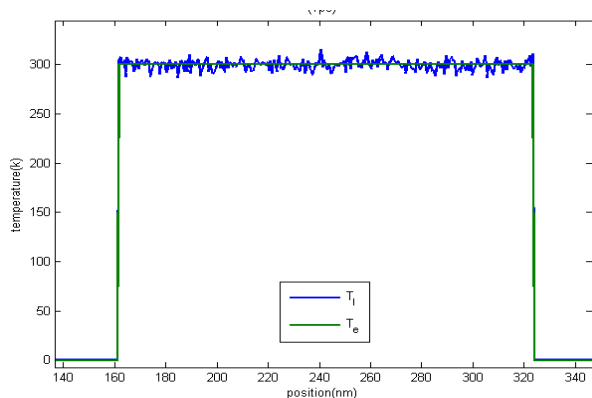
$$C_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial t} = \nabla [K_e(T_e) \nabla T_e] - G(T_e - T_l) + S(z, t) \quad (۱)$$

$$m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = F_i + \zeta m_i v_i^T \quad (۲)$$

$$\zeta = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n G V_n (T_e^k - T_l) / \sum_i m_i (v_i^T)^2 \quad (۳)$$

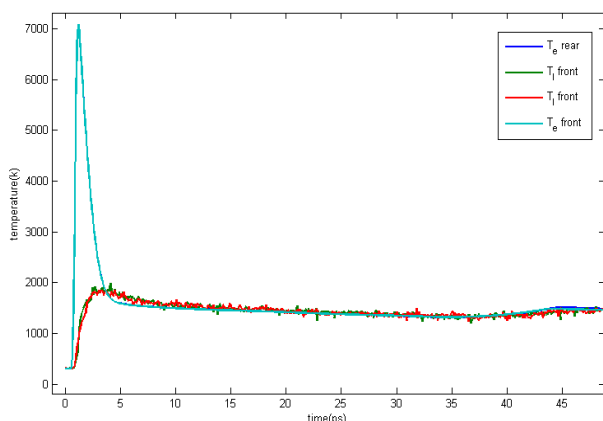
چون قطر لکه لیزر از عمق نفوذ بیشتر است نسخه یک بعدی معادله پخش استفاده شده است.

در این مدل ترکیبی همه خواص ترموفیزیکی الکترون مثل ظرفیت گرمایی و رسانایی گرمایی الکترون وابسته به دما است [۵]. ظرفیت گرمایی رابطه خطی با دما دارد و λ ضریب ثابت است.



شکل ۳: دمای شبکه T_l و دمای الکترونی T_e بر حسب مکان در زمان ۵۰ ps.

در شکل ۳ و ۱۰، مشخص است که با گذشت زمان دمای الکترونی و شبکه نیز تغییر می‌کنند و نوسانات متفاوتی دارند و در نهایت به مقدار یکسانی می‌رسند. در ادامه، تحول زمانی سطوح پشت و جلوی قطعه برای شار جذب شده $200 J/m^2$ در شکل ۴ به خوبی مشهود است.



شکل ۴: دمای شبکه و الکترونی در جلو و پشت قطعه بر حسب زمان

با کمی دقت در شکل ۴ مشاهده می‌شود که دمای الکترونی در جلو و پشت قطعه برهم منطبق هستند و دمای شبکه نیز با کمی اختلاف نوسان برهم منطبق می‌باشند. با بررسی شکل ۵ و ۶ می‌توان تغییرات انرژی جنبشی و پتانسیل قطعه را در حین فرآیند مشاهده کرد. انرژی پتانسیل در حدود $t = 20$ دچار فرورفتگی می‌شود که انرژی جنبشی در همین زمان افزایش می‌یابد.

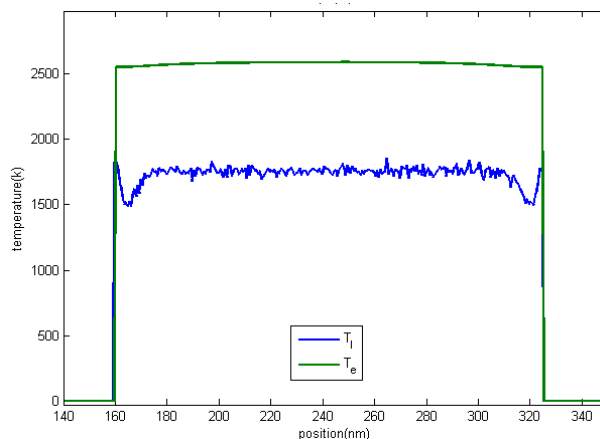
۲۸۲،۵۸ fs برای مدت ۵۰ ps انجام شده و ابعاد قطعه $162 \times 8,1 \times 8,1$ nm است و دارای 640000 اتم می‌باشد. مقادیر ثابت مورد استفاده در برنامه عبارت است از [۷]:

$$A = 1.39 \times 10^6 s^{-1} K^{-2}, B = 5.924 \times 10^6 s^{-1} K^{-1},$$

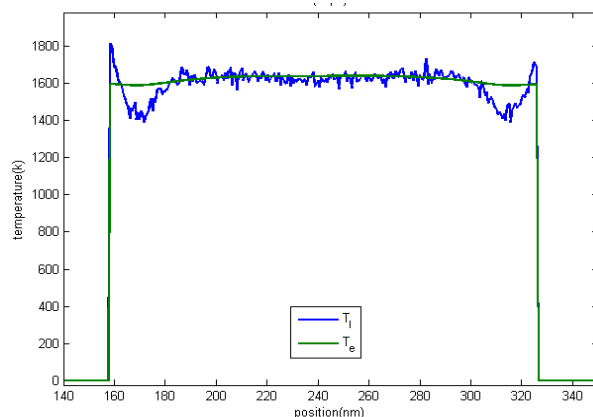
$$G = 5.69 \times 10^{17} Jm^{-3} s^{-1} K^{-1}, \alpha = 4.438 K^{-1}$$

$$\lambda = 0.42, \gamma_{th} = 91.2 Jm^{-3} K^{-2}$$

این مدل برای شار جذب شده $200 J/m^2$ اجرا و مورد بررسی قرار گرفته است. شکل ۱ و ۲، بستگی فضایی دمای الکترونی و دمای شبکه را در زمان‌های مختلف برای شار فوق نشان می‌دهد.



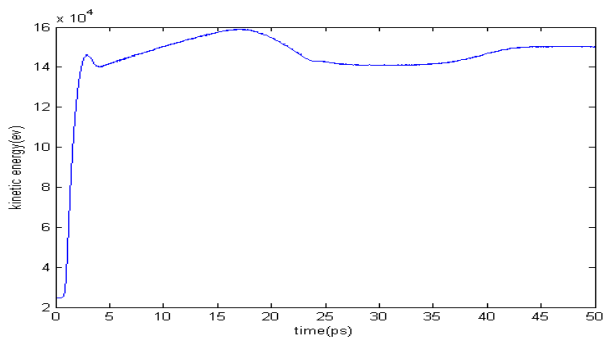
شکل ۱: دمای شبکه T_l و دمای الکترونی T_e بر حسب مکان در زمان ۱ ps.



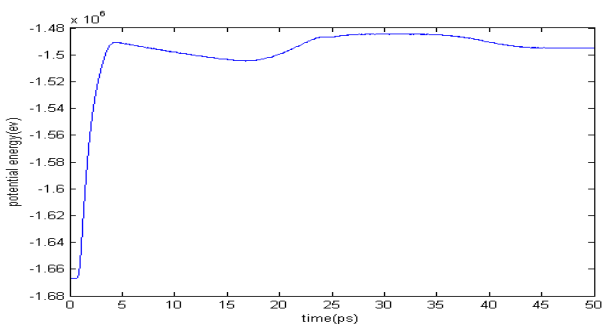
شکل ۲: دمای شبکه T_l و دمای الکترونی T_e بر حسب مکان در زمان ۲۵ ps.

نتیجه گیری

مدل ترکیبی دینامیک مولکولی (MD) و دودمایی (TTM) همواره یکی از مهم ترین روش های شبیه سازی برای برهم کنش لیزر با مواد است. ما در این مقاله با استفاده از مدل دودمایی و تلفیق آن با دینامیک مولکولی، به شبیه سازی لیزر فمتوثانیه با فلز آلومینیوم پرداختیم و تغییرات فاز و کندوسوس لیزری و تغییرات دمای الکترونی و شبکه را بررسی کردیم.



شکل ۵: تغییرات انرژی جنبشی بر حسب زمان

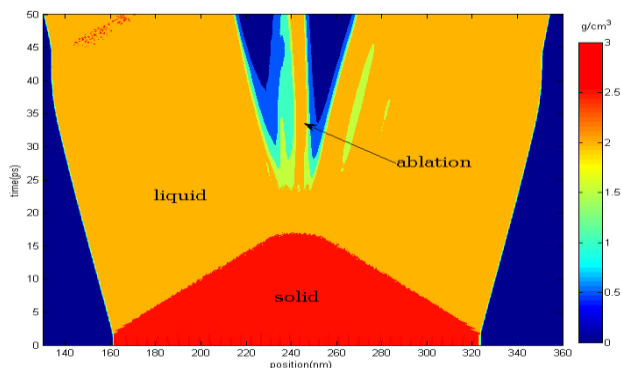


شکل ۶: تغییرات انرژی پتانسیل بر حسب زمان

مراجع

- [۱] P.S. Banks, M.D. Feit, A.M. Rubenchik, B.C. Stuart, and M.D. Perry, *Material effects in ultrashort pulse laser drilling of metals*, **Appl. Phys. A**, 1999a, 69, 7, pp. S377-S380
- [۲] B. Rethfeld, A. Kaiser, M. Vicanek, and G. Simon, *Ultrafast dynamics of nonequilibrium electrons in metals under femtosecond laser irradiation*, **Phys. Rev. B**, 2002, 65, pp. 214303~214313.
- [۳] J. Machan, M. Valley, G. Holleman, M. Mitchell, D. Burchman, J. Zamel, G. Harpole, H. Injeyyan, and L. Marabella, *Diode-pumped Nd:YAG laser for precision laser machining*, **J. Laser Appl.**, 1996, 8, pp 225-232.
- [۴] S.I. Anisimov, B.L. Kapeliovich, T.L. Perel'man, *Electron emission from metal surfaces exposed to ultra short laser pulses*, **JETP Lett.** 39, 375 (1974)
- [۵] R. Fang, D. Zhang, H. Wei, Z. Li, F. Yang, Y. Gao, *Improved two-temperature model and its application in femtosecond laser ablation of metal target*, **Laser and Particle Beams**, 2010, 28, 157-164.
- [۶] D.S. Ivanov, L.V. Zhigilei, *Combined atomistic-continuum modeling of short-pulse laser melting and disintegration of metal films*, **Phys. Rev. B**, 2003, 68, 064114.
- [۷] CH. Wu, L.V. Zhigilei, *microscopic mechanisms of laser spallation and ablation of metal targets from -scale molecular dynamics simulations*, **Appl. Phys. A**, 2014, 114:11-32

تغییرات انرژی جنبشی و پتانسیل نیز مطابق قانون پایستگی انرژی است. در انتها شکل ۷، نمودار کانتوری تغییرات چگالی سیستم و تغییرات فاز را به نمایش می گذارد. این نمودار حاوی اطلاعات مهمی از پدیده های مختلف در این شبیه سازی است. لازم است بدانیم که چگالی آلومینیوم جامد در دمای اتاق $2,70 \text{ g/m}^3$ است و در حالت ذوب به $2,375 \text{ g/m}^3$ کاهش یافته و با افزایش دما کاهش بیشتری می یابد، بنابراین با کمک چگالی می توان فاز سیستم را تشخیص داد.



شکل ۷: تغییرات فاز در قطعه برای $2,00 \text{ J/m}^2$ ، زمان بر حسب مکان