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 اتم گرایانه برهم‌کنش پالس لیزر فمتوثانیه با هدف آلومینیوم

سحرسادات شریعتی، ارحام عمویی ، علیرضا نیکنام

پژوهشکده لیزر و پلاسما، دانشگاه شهید بهشتی، تهران

این پژوهش به شبیه سازی برهم کنش لیزر فمتوثانیه با فلز آلومینیوم با استفاده از مدل تلفیقی دودمایی و دینامیک مولکولی پرداخته است. مدل دو دمایی به توصیف تحولات دمایی الکترونها و دینامیک مولکولی به توصیف تبدیلات فازی که در شرایط بسیار غیر تعادلی که با تابش لیزر فوق کوتاه القا شده است، می پردازد. این دو زیرسیستم توسط جمله جفتشدگی با هم ترکیب شده اند. شبیه سازی برای شار جذب شده $200\ J/m^2$ انجام شده و تحولات دمای الکترون و شبکه، تغییرات انرژی و تبدیلات فازی ارائه شده است.

کلید واژه: دینامیک مولکولی، مدل دو دمایی.

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.

[Downloaded from opsi.ir on 2026-10-30]

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

۱-مقدمه

تابش لیزرهای پالس کوتاه بر مواد مختلف می‌تواند آن‌ها 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 برهم‌کنش لیزر- ماده را به طور بنیادی دست خوش تغییر کند[۲,۱]. بنابراین بررسی برهم-کنش لیزر با ماده (کندوسوز لیزری) اهمیت بسیاری دارد[۳]. در گذشته فعالیت‌های کندوسوز لیزری با روش آزمون خطا و بدون مدل نظری قاطع توسعه یافته بود. اما امروزه شبیه‌سازی کامپیوتری نقش موثری در مدل سازی برهم‌کنش 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 برهم‌کنش لیزر فمتوثانیه با آلومینیوم به روش ترکیبی دینامیک‌مولکولی MD و دودمایی TTM می‌پردازد.

۲-معادلات اساسی

در این مدل ترکیبی، دینامیک‌مولکولی جایگزین معادله دودمایی برای شبکه می‌شود تا توصیفی واقع-گرایانه از فرآیند برهم‌کنش لیزر با فلز ارائه دهد[۴]. از طرفی معادله پخش برای دمای الکترونی، با روش تفاضل متناهی FD به طور همزمان با انتگرال‌گیری از معادله حرکت نیوتن حل می‌شود. دمای الکترونی وارد جمله جفت‌شدگی می‌شود که وظیفه مبادله انرژی میان الکترون و شبکه را دارد[۵,۶].

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

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

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

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.

$$C_e(T_e)=\gamma_{th}(1+\lambda)T_e$$
$$\gamma_{th}=\pi^2 n_e k_B^2/2\varepsilon_F \quad (۴)$$

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

$$k(T_e,T_l)=C_e(T_e)v_F^2\tau/3$$
$$\frac{1}{\tau}=\upsilon=\upsilon_{e-e}+\upsilon_{e-ph}=AT_e^{\,2}+BT_l \quad (۵)$$

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 می‌شود و در آن I_0، ماکزیمم توان چگالی لیزر است.

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

که β جذب‌پذیری و b ضریب جذب هدف است.

$$\beta=1-R=\sqrt{\frac{4\pi c\varepsilon_0(1+\alpha(T_e+T_0))}{\lambda_0\sigma_0}}$$
$$b=\sqrt{\frac{4\pi\sigma_0}{\lambda_0 c\varepsilon_0(1+\alpha(T_e+T_0))}} \quad (۸)$$

با جای‌گذاری معادلات (۷) و (۸) در معادله (۶) و معادله (۴) و (۵) در رابطه (۱)، معادله پخش برای دمای الکترونی به شکل زیر به‌دست می‌آید.

$$C_e(T_e)\frac{\partial T_e}{\partial t}=k_0\frac{BT_e}{AT_e^{\,2}+BT_l}\frac{\partial^2}{\partial x^2}T_e$$
$$-G(T_e-T_l)$$
$$+C\exp[\frac{(4\ln 2)t^2}{(\tau_p)^2}]\times\exp[-[\frac{D}{1+\alpha(T_e(x,t)-T_0)}]^{0.5}x] \quad (۹)$$

که در معادله بالا $k_0=\frac{\upsilon_F^2\gamma_{th}(1+\lambda)}{3B}$، $C=4\pi I_0/\lambda_0$ و $D=4\pi\sigma_0/\lambda_0 c\varepsilon_0$ در نظر گرفته شده است و G پارامتر جفت‌شدگی، ثابت فرض شده است و α ضریب مقاومت حرارتی فلز است [۵].

۳- نتایج

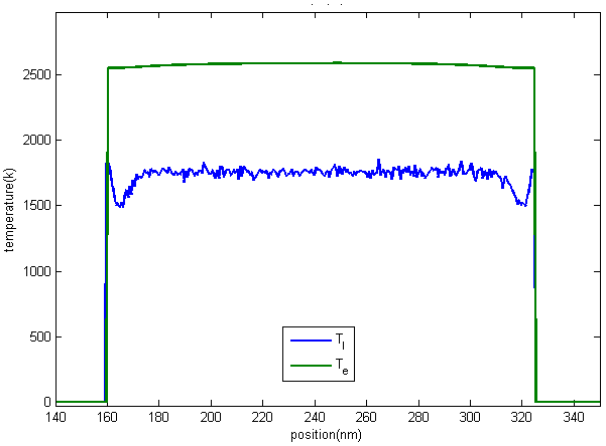
شبیه‌سازی مورد نظر با لیزر فمتوثانیه با پهنای پالس

[Downloaded from opsi.ir on 2026-10-30]

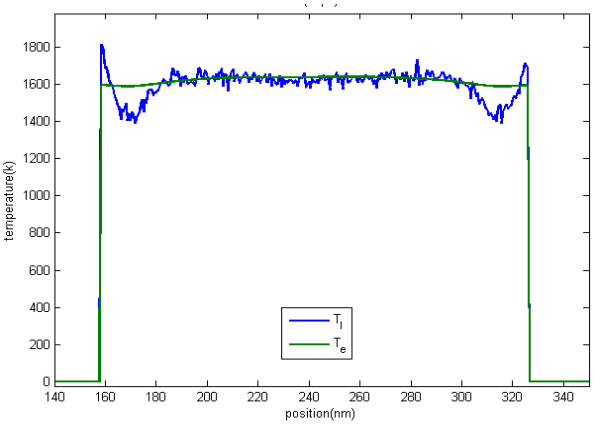
۲۸۲,۵۸ fs برای مدت ۵۰ps انجام شده و ابعاد قطعه ۸,۱×۸,۱nm ×۱۶۲ است و دارای ۶۴۰۰۰۰ اتم می‌باشد. مقادیر ثابت مورد استفاده در برنامه عبارت است از[۷] :

$$A=1.39\times10^{6}\,s^{-1}K^{-2}, B=5.924\times10^{6}\,s^{-1}K^{-1},$$
$$G=5.69\times10^{17}\,Jm^{-3}s^{-1}K^{-1}, \alpha=4.438K^{-1}$$
$$\lambda=0.42, \gamma_{th}=91.2\,Jm^{-3}K^{-2}$$

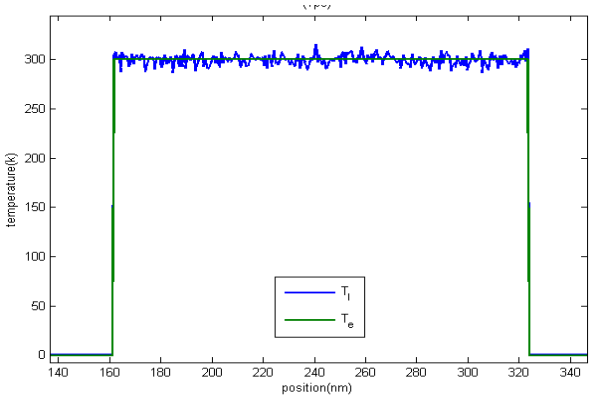
این مدل برای شار جذب‌شده J/m^2 ۲۰۰ اجرا و مورد بررسی قرارگرفته‌است. شکل ۲،۱و۳ بستگی فضایی دمای الکترونی و دمای شبکه را در زمان‌های مختلف برای شار فوق نشان می دهد.



شکل ۱:دمای شبکه T_l و دمای الکترونی T_e بر حسب مکان در زمان۱ps.

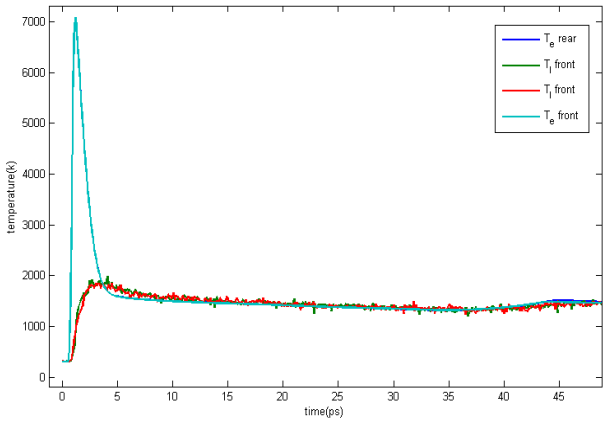


شکل ۲:دمای شبکه T_l و دمای الکترونی T_e بر حسب مکان در زمان۲۵ps .



شکل ۳:دمای شبکه T_l و دمای الکترونی T_e بر حسب مکان در زمان۵۰ ps.

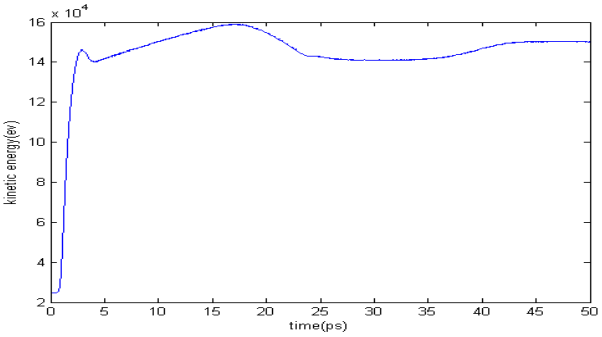
در شکل ۱،۲و۳ مشخص است که با گذشت زمان دمای الکترونی و شبکه نیز تغییر می‌کنند و نوسانات متفاوتی دارند و در نهایت به مقدار یکسانی می‌رسند. در ادامه، تحول زمانی سطوح پشت و جلوی قطعه برای شار جذب شده J/m^2 ۲۰۰ در شکل ۴ به خوبی مشهود است.



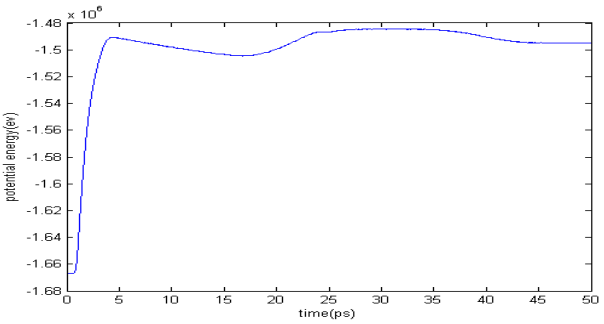
شکل ۴:دمای شبکه و الکترونی در جلو و پشت قطعه بر حسب زمان

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 و۶ می‌توان تغییرات انرژی جنبشی و پتانسیل قطعه را در حین فرآیند مشاهده‌کرد. انرژی پتانسیل در حدود $t=20$ دچار فرورفتگی می‌شود که انرژی جنبشی در همین زمان افزایش می‌یابد.

[Downloaded from opsi.ir on 2026-10-30]

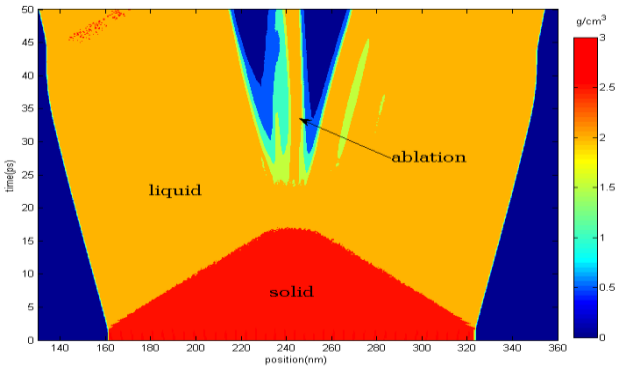


شکل ۵: تغییرات انرژی جنبشی بر حسب زمان



شکل ۶: تغییرات انرژی پتانسیل بر حسب زمان

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 می‌گذارد. این نمودار حاوی اطلاعات مهمی از پدیده های مختلف در این شبیه سازی است. لازم است بدانیم که چگالی آلومینیوم جامد در دمای اتاق $۲,۷۰\ g/m^3$ است و در حالت ذوب به $۲,۳۷۵ g/m^3$ کاهش یافته و با افزایش دما کاهش بیشتری می‌یابد، بنابراین با کمک چگالی می‌توان فاز سیستم راتشخیص داد.



شکل۷: تغییرات فاز در قطعه برای $۲۰۰\ J/m^2$، زمان بر حسب مکان

نتیجه گیری

مدل ترکیبی دینامیک‌مولکولی(MD) و دودمایی(TTM) همواره یکی از مهم‌ترین روش‌های شبیه‌سازی برای برهم-کنش لیزر با مواد است. ما در این مقاله با استفاده از مدل دودمایی و تلفیق آن با دینامیک‌مولکولی، به شبیه‌سازی لیزر فمتوثانیه با فلز آلومینیوم پرداختیم و تغییرات فاز و کندوسوز لیزری و تغییرات دمای الکترونی و شبکه را بررسی کردیم.

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 appilication 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

[Downloaded from opsi.ir on 2026-10-30]