

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗРЫВНОГО ВСКИПАНИЯ ПРИ ИМПУЛЬСНОМ ЛАЗЕРНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ НА ТВЕРДУЮ МИШЕНЬ

АННОТАЦИЯ

Предложена модель, описывающая процессы тепло-массопереноса при переходе от режима нормального испарения к режиму взрывного вскипания поверхностного слоя с отрывом его от мишени (рис. 1а). Конечная стадия соответствует моменту времени, когда впервые выполняется условие $T_m = T_{th}$ ($T_{th} = 0.9T_c$, T_c – критическая температура). Вторая стадия начинается с мгновенного образования в сечении $T=T_m$ паровой полости толщиной $H=10^{-9}$ м с равновесными параметрами пара в этой полости при $T_1=(T_{th}+T_w(t_{1K}))/2$, где t_{1K} – конец первой стадии. Температура оторвавшегося слоя принимается постоянной и равной T_1 .

1. ВВЕДЕНИЕ

В зависимости от длительности и интенсивности лазерного воздействия на твердые материалы с высокими коэффициентами поглощения (металлы, полупроводники) наблюдаются различные режимы импульсной лазерной абляции (ИЛА) [1]. В случае лазерных импульсов наносекундной длительности с увеличением интенсивности лазерного излучения (ЛИ) режим нормального испарения внезапно сменяется взрывным вскипанием с выбросом парокпельной массы с поверхности облучаемой мишени [2, 3]. Модель взрывного вскипания при импульсном лазерном воздействии на твердые материалы предложена в работе [3]. Эта модель учитывает, что при абляции конденсированных веществ с сильным поглощением излучения максимум температуры испаряющегося материала T_m находится не на поверхности, а на некоторой глубине мишени. Модель предполагает, что при достижении в процессе нагрева условия $T_m=T_{th}$ (T_{th} – температура предельного перегрева) происходит потеря термодинамической устойчивости приповерхностного слоя и отрыв его от мишени. Модель [3] описывает процессы объемного поглощения излучения, нагрева и испарения материала, приближенное описание движения оторвавшегося слоя, но не учитывает газодинамические процессы в областях, занятых паром.

В нашей модели газодинамические процессы включены в общую модель. Показано, что они существенно влияют на ход процессов тепло-массопереноса. Кроме того, динамика выброса массы при взрывном вскипании представляет самостоятельный интерес как в научном, так и прикладном отношениях.

2. МОДЕЛИ И МЕТОДЫ РАСЧЕТА

Модель описывает две последовательные стадии ИЛА: (1) стадию, соответствующую режиму нор-

мального испарения материала с поверхности мишени (рис. 1а); (2) стадию, соответствующую режиму взрывного вскипания поверхностного слоя с отрывом его от мишени (рис. 1б). Конечная стадия соответствует моменту времени, когда впервые выполняется условие $T_m = T_{th}$ ($T_{th} = 0.9T_c$, T_c – критическая температура). Вторая стадия начинается с мгновенного образования в сечении $T=T_m$ паровой полости толщиной $H=10^{-9}$ м с равновесными параметрами пара в этой полости при $T_1=(T_{th}+T_w(t_{1K}))/2$, где t_{1K} – конец первой стадии. Температура оторвавшегося слоя принимается постоянной и равной T_1 .

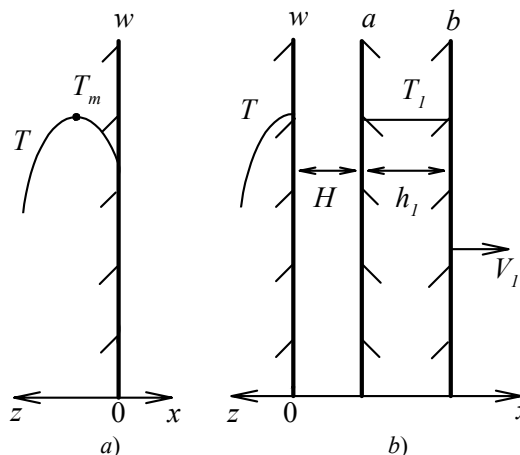


Рис. 1. Схема перехода от режима нормального испарения (а) к режиму взрывного кипения (б)

В рамках нашего описания ИЛА включает три группы пространственно разделенных (но взаимосвязанных) процессов, происходящих в объеме твердого тела (поглощение ЛИ и нагрев), на поверхности (испарение и конденсация) и в областях, занятых паром (движение пара). Общая математическая модель ИЛА соответственно включает в себя тепловые модели мишени и оторвавшегося слоя и газодинамическую модель движения пара. Условия на поверхностях образуют согласующие граничные условия для тепловых и газодинамических моделей.

2.1. Тепловая модель мишени

Для описания поглощения излучения материалом мишени используется закон Ламберта-Бэра:

$$I(z, t) = I_0(t)(1 - R) \exp(-\alpha z). \quad (1)$$

Здесь $I_0(t)$, $I(z, t)$ – интенсивность излучения на поверхности и в теле на расстоянии z от поверхности в момент времени t , R – коэффициент отражения

поверхности материала, α – коэффициент поглощения. В общем случае R и α зависят от температуры тела. Предполагается, что изменение интенсивности лазерного излучения во времени соответствует гауссовскому закону:

$$I_0(t) = \frac{2E_0\sqrt{\ln 2}}{\tau_L\sqrt{\pi}} \exp\left(-4\ln 2\left(\frac{t-\tau_S}{\tau_L}\right)^2\right), \quad (2)$$

где E_0 – плотность энергии импульса, τ_L – ширина импульса на полувысоте (FWHM), τ_S – интервал времени с момента начала расчета до момента достижения максимума $I_0(t)$ (в расчетах $\tau_S = 1.5\tau_L$).

Для описания теплового состояния материала используется одномерное нестационарное уравнение теплопроводности с объемным источником тепла, записанное в системе координат, связанной с движущимся фронтом испарения, [4]:

$$c\rho\left(\frac{\partial T}{\partial t} - \omega(t)\frac{\partial T}{\partial z}\right) = \frac{\partial}{\partial z}\lambda\frac{\partial T}{\partial z} + \alpha I(z, t), \quad (3)$$

с начальным условием:

$$T(z, 0) = T_0 \quad (4)$$

и граничными условиями:

$$\lambda\left.\frac{\partial T}{\partial z}\right|_{z=0} = \rho\omega(t)L, \quad T(\infty, t) = T_0. \quad (5)$$

Здесь ρ , c , λ – плотность, теплоемкость и коэффициент теплопроводности материала соответственно; L – теплота испарения (сублимации); T_0 – начальная температура, $\omega(t)$ – скорость движения фронта испарения.

Скорость фронта испарения определяется соотношением:

$$\omega(t) = \frac{mF}{\rho}, \quad (6)$$

где F – полный поток частиц через поверхность, совпадающую с фронтом испарения, m – масса частицы.

Полный поток F складывается из потока атомов F^+ , образующихся в процессе испарения, и потока атомов F^- , возвращающихся на поверхность (обратного потока частиц)

$$F = F^+ - F^-. \quad (7)$$

Величина F заранее неизвестна, она находится в результате совместного решения тепловой и газодинамической задач. В различные моменты времени соотношение потоков F^+ и F^- может быть произвольным. В рассматриваемой модели предполагается, что все возвращающиеся на поверхность частицы конденсируются.

Для описания испарения используется закон Герца-Кнудсена, в соответствии с которым поток испаряющихся атомов равен

$$F^+ = \frac{1}{4}n_s u = \frac{p_s(T_w)}{(2\pi mk_B T_w)^{1/2}}. \quad (8)$$

Здесь n_s и p_s – концентрация и давление насыщенного пара при температуре поверхности T_w , $u = (8k_B T_w / \pi m)^{1/2}$ – средняя тепловая скорость

испаряющихся частиц, k_B – постоянная Больцмана.

Для определения давления $p_s(T_w)$ используется уравнение Клайперона-Клаузиуса:

$$p_s(T_w) = p_b \exp\left(\frac{L}{R}\left(\frac{1}{T_b} - \frac{1}{T_w}\right)\right), \quad (9)$$

где T_b – температура кипения при нормальном давлении $p_b = 10^5$ Па, $R = k_B/m$ – газовая постоянная.

Предполагается, что функция распределения для атомов, улетающих с поверхности, является полу-максвелловской:

$$f_{w+} = \frac{F^+}{2\pi} \left(\frac{1}{RT_w}\right)^2 \exp\left(-\frac{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}{2RT_w}\right), \quad v_x > 0. \quad (10)$$

Здесь v_x , v_y , v_z – компоненты скорости частиц.

В начальный момент времени частицы в начальной области отсутствовали. В момент времени $\tau = t/\tau_L = 0$ включался импульс ЛИ. Для каждого временного шага процессы нагрева мишени и разлета частиц были разделены и моделировались последовательно. Вначале решалось уравнение (3) с переменными теплофизическими параметрами c и λ , описывающее процесс прогрева материала. Затем моделировался разлет пара.

2.2. Тепловая модель оторвавшегося слоя

Будем полагать, что оторвавшийся слой поглощает $(1-R_1)$ долю падающего на него ЛИ (R_1 – коэффициент отражения). При этом слой полностью экранирует от ЛИ мишень.

Изменение толщины слоя определяется уравнением:

$$\frac{dh_1}{dt} = -\omega_a(t) - \omega_b(t), \quad (11)$$

где $\omega_a(t)$ и $\omega_b(t)$ – скорости движения фронтов испарения (конденсации) на поверхностях a и b (рис. 1b), определяемые в соответствии с формулой (6). При определении потоков частиц на поверхности a и b учитывается движение слоя в лабораторной системе координат со скоростью v_1 .

Движение слоя определяется уравнением:

$$\frac{dm_1 v_1}{dt} = p_a^- - p_b^-, \quad (12)$$

где $m_1 = \rho_S h_1(t)$ – масса слоя единичной площади,

p_a^- и p_b^- – давления на поверхностях a и b от падающих на них частиц. В уравнении (12) учтено, что ввиду постоянства температуры слоя импульсы, обусловленные испарением частиц с поверхностей a и b , равны.

Температура слоя определяется уравнением

$$\frac{dQ}{dt} = I_0(t)(1-R_1) + (F_a + F_b)Lm_a + E_{ak} + E_{bk}, \quad (13)$$

где E_{ak} и E_{bk} – потоки кинетической энергии частиц для поверхностей a и b ; m_a – масса частицы; $Q = m_1 c T_1$.

2.3. Модель движения пара

Для моделирования разлета испаренного с поверхности материала использован метод прямого статистического моделирования (ПСМ). В программе расчета реализована схема столкновений без временного счетчика (NTC – схема). Механика столкновений соответствовала модели твердых сфер. Предполагалось полное поглощение материалом частиц, возвращающихся на поверхность. Подробное описание метода и алгоритма ПСМ в приложении к режиму нормального испарения дано в работе [4]. Для переиндексации частиц и выбора макропараметров использовалась сетка со сгущением к поверхности, однозонная неподвижная для режима без отрыва слоя перегретой жидкости и подвижная двухзонная в случае наличия взрывного вскипания. Размер ячеек в расчетах составлял вблизи поверхности 0.002 длины свободного пробега λ_b , посчитанной по температуре кипения T_b и давлению p_b , и не превосходил 0.01 этой величины в остальной области. Число моделирующих частиц – $2 \cdot 10^6$.

Согласование тепловой и газодинамической задач осуществлялось с помощью граничных условий на поверхности. Моделирующие атомы вбрасывались в область согласно соотношению (8) с функцией распределения по скоростям (10). Температура поверхности определялась на этапе решения уравнения теплопроводности. В процессе прямого моделирования определялся обратный поток частиц F^- на поверхность для данного временного шага. Найденное значение использовалось на следующем временном шаге для определения полного потока F и скорости движения фронта испарения ω .

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ И ИХ АНАЛИЗ

Расчеты проведены для плоской мишени из кремния. Оптические и теплофизические параметры кристаллического кремния взяты из [3, 5]. Ниже приведены результаты расчетов для $\tau_L = 1.3 \cdot 10^{-8}$ с, $\alpha = 10^7$ м⁻¹, $R = R_1 = 0.6$ и двух значений $E_0 = 4 \cdot 10^4$ и $4.75 \cdot 10^4$ Дж/м². При $E_0 = 4 \cdot 10^4$ Дж/м² реализуется режим нормального испарения, при $E_0 = 4.75 \cdot 10^4$ Дж/м² – режим взрывного вскипания.

Использованы следующие безразмерные параметры: T отнесена к температуре кипения $T_b = 3504$ К, ρ – к равновесной плотности пара при T_b и p_b ($\rho_b = 0.1$ кг/м³), скорость – к наиболее вероятной скорости частиц пара при T_b ($\sqrt{2RT_b} = 1.44$ км/с), время – к ширине импульса $\tau_L = 1.3 \cdot 10^{-8}$ с.

На рис. 2 приведены результаты расчетов изменения во времени T_w . Там же приведена зависимость $I_0(\tau)$. Максимумы T_w относительно максимума $I_0(\tau)$ сдвинуты немного в сторону больших значений τ . Поверхностный слой при $\tau > 1$ находится в жидком состоянии (температура плавления $T_{melt} = 1685$ К). При $E_0 = 4.75 \cdot 10^4$ Дж/м² взрывное

вскипание поверхностного слоя происходит при $\tau = 1.67$. Оторвавшийся слой экранирует мишень от ЛИ, поэтому T_w мишени падает. После испарения слоя и прекращения экранирования T_w быстро релаксирует к температурному профилю, характерному для режима нормального испарения. Температура оторвавшегося слоя T_1 быстро возрастает до значения $T_1/T_b \approx 2.6$, а затем уменьшается и в момент завершения испарения равна $2.3T_b$.

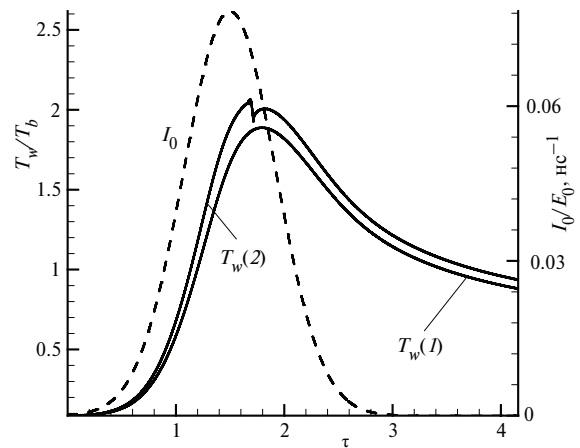


Рис. 2. Зависимости $I_0(\tau)$ и $T_w(\tau)$: 1 – $E_0 = 4 \cdot 10^4$ Дж/м²; 2 – $E_0 = 4.75 \cdot 10^4$ Дж/м²

На рис. 3 приведены зависимости от времени толщины и скорости оторвавшегося слоя. Начальная толщина слоя равна 0.025 мк. Полное испарение слоя происходит в течение 0.575 нс. За это время его скорость достигает 3.76 км/с. Разгон слоя происходит непрерывно и с большим ускорением. К моменту полного испарения слой пролетает примерно 0.6 мк.

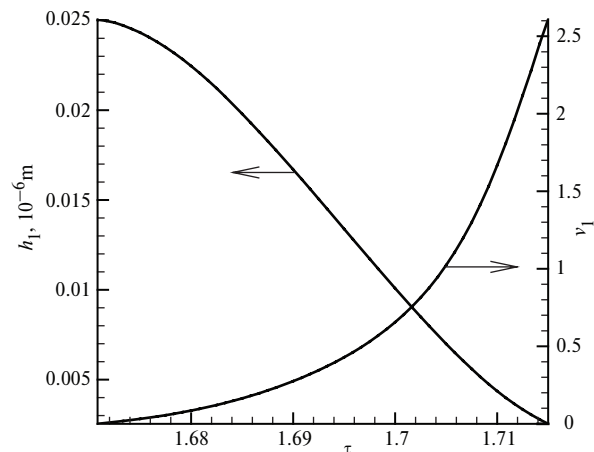


Рис. 3. Зависимости $h_1(\tau)$ и $v_1(\tau)$

На рис. 4 а и б приведены профили ρ и v_x пара после полного испарения слоя ($\tau = 1.7$). Взрывное вскипание приводит к существенному изменению параметров парового облака. В поле течения формируется трехзонная газодинамическая структура. У поверхности мишени находится тонкий слой пара с

высокими давлением и плотностью и малой скоростью. До момента завершения испарения оторвавшегося жидкого слоя расширение этого пара определяло ускорение жидкого слоя. Далее располагается узкий высокоскоростной паровой слой с относительно высокой плотностью, образовавшийся в результате быстрого испарения оторвавшегося жидкого слоя. Слой движется со сверхзвуковой скоростью (числа Маха в диапазоне 1.6 – 1.8) и обладает высоким динамическим давлением. В сечении, где ρ и v_x максимальны, динамическое давление пара ρv_x^2 достигает значения порядка $7 \cdot 10^3$ атм. Справа от высокоскоростного слоя находится зона свободного нестационарного расширения пара в вакуум со структурой, характерной для режима нормального испарения [4].

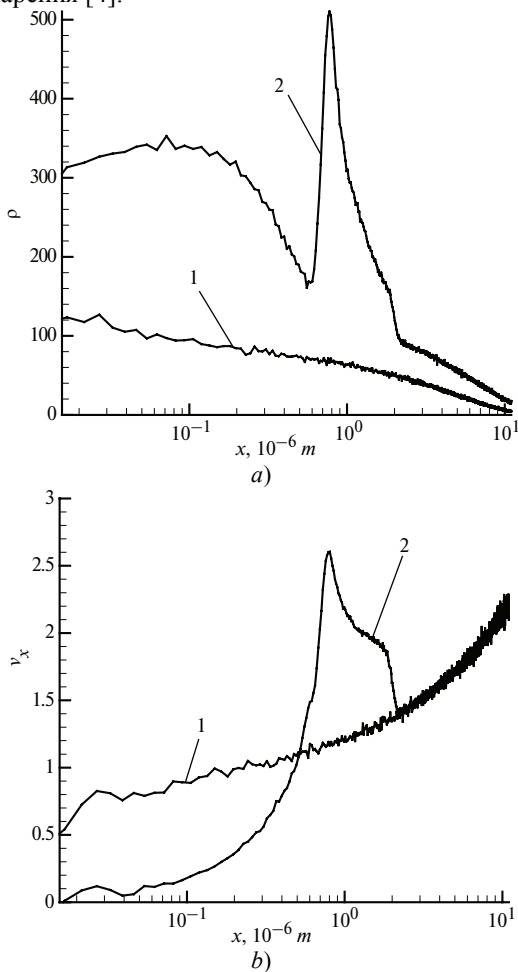


Рис. 4. Профили $\rho(x)$ (a) и $v_x(x)$ (b) при $\tau=1.7$: 1 – $E_0=4 \cdot 10^4$ Дж/м²; 2 – $E_0=4.75 \cdot 10^4$ Дж/м²

Влияние взрывного вскипания на динамику и величину уноса массы с поверхности мишени показано на рис. 5, где приведена зависимость $m_s(\tau)$. В данном случае это влияние относительно невелико и сводится к локальному ускорению уноса в момент отрыва слоя. В основном же унос определяется процессом испарения с поверхности мишени. Следует, однако, заметить, что дальнейшее увеличение

E_0 приводит к быстрому ускорению частоты сброса жидких слоев материала и увеличению уноса. Особенности взрывного вскипания со сбросом многих слоев материала мишени являются предметом дальнейших исследований.

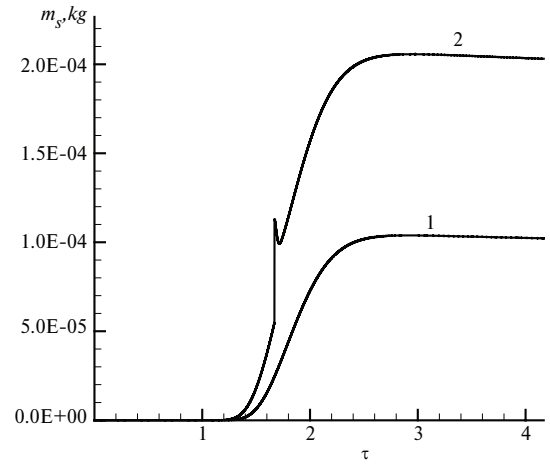


Рис. 5. Зависимости $m_s(\tau)$: 1 – $E_0=4 \cdot 10^4$ Дж/м²; 2 – $E_0=4.75 \cdot 10^4$ Дж/м²

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Взрывное вскипание конденсированных веществ при лазерном воздействии импульсами наносекундной длительности относится к физическим явлениям весьма высокой сложности. Детальное и надежное моделирование этого явления дело пока далекое от реальности. Представленная модель претендует лишь на приближенное описание, но это описание является полным и включает все основные стороны и процессы явления. Авторы полагают, что предложенная модель будет полезным инструментом исследований в этой области.

Работа выполнена при финансовой поддержке INTAS (грант № 03-51-5208).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Анисимов С.И., Лукьянчук Б.С. Избранные задачи теории лазерной абляции // УФН. 2002. Т. 172. № 3. С. 301 – 333.
2. Bulgakova N.M., Bulgakov A.V. Pulsed laser ablation of solids: transition from normal vaporization to phase explosion // Appl.Phys. 2001. Vol. A73. P.199–208.
3. Моделирование взрывного вскипания при импульсном лазерном воздействии / С.Н. Андреев, С.В. Орлов, А.А. Самохин // Труды ИОФАН. М.: Наука, 2004. Т. 60. С. 127 – 148.
4. Быков Н.Ю., Лукьянов Г.А. Моделирование импульсной лазерной абляции твердого материала на базе тепловой модели мишени и прямого статистического моделирования разлета пара // Теплофизика и аэромеханика. 2003. Т. 10. № 3. С. 401 – 410.
5. Охотин А.С., Пушкарский А.С., Григорьев В.В. Теплофизические свойства полупроводников. М: Атомиздат, 1972. 200 с.