Журнал технической физики, 2018, том 88, вып. 5

01

Температурное поле при лазерном абляционном разрушении мишени при малых температурах

© В.Г. Шеманин[1], О.В. Мкртычев[2,¶]

[1] Новороссийский политехнический институт (филиал) Кубанский государственный технологический университет,
353900 Новороссийск, Россия
[2] Филиал Белгородского государственного технологического университета им. В.Г. Шухова,
353912 Новороссийск, Россия
[¶] e-mail: oleg214@yandex.ru

(Поступило в Редакцию 7 марта 2017 г. В окончательной редакции 28 сентября 2017 г.)

Рассмотрена тепловая модель лазерного абляционного разрушения материалов. Для численного решения нестационарного уравнения теплопроводности в одномерном случае применяется метод моментов. Полученное решение позволяет анализировать динамику изменения многих параметров, характеризующих процесс лазерной абляции, в числе которых температура поверхности и характерная тепловая длина.

DOI: 10.21883/JTF.2018.05.45890.2241

Введение

Использование лазеров высокой мощности требует понимания физических механизмов взаимодействия лазерного излучения с веществом. Одной из сторон такого взаимодействия является индуцированное лазерным излучением разрушение облучаемого вещества [1–4]. Лазерная абляция получила большое распространение также и во многих практических применениях, от медицины до связи. В связи с этим изучение проблем лазерного абляционного разрушения имеет большое значение и для производственных технологий. Эта проблематика встает и в вопросах теоретического изучения проблем взаимодействия электромагнитного излучения с веществом, например, термоядерная энергетика, моделирование процессов в ядрах звезд и галактик. Этими вопросами занимается большое число коллективов исследователей в разных частях света. В частности, основным ограничением в развитии мощности новых сверхкоротких лазеров является допустимая прочность оптических компонентов. Это особенно относится к сложным оптическим покрытиям многих элементов, которые используются для контроля отражения и пропускания оптических элементов и работают в самых жестких режимах облучения. Этот вопрос важен для технологий многослойных тонкопленочных покрытий. Такие компоненты силовой оптики должны иметь высокий коэффициент отражения в большой спектральной полосе, высокую оптическую прочность и ряд других характеристик для стабильной высокопроизводительной работы. Таким образом, исследование явления лазерного абляционного разрушения имеет большое теоретическое и практическое значение.

Цель настоящей работы — рассмотреть тепловую модель лазерной абляции в нестационарном случае и проанализировать динамику изменения ряда величин, характеризующих процесс лазерного абляционного разрушения. Для этого рассматривается нестационарное уравнение теплопроводности в одномерном случае. Численное решение проводилось с помощью метода моментов.

В результате разрабатываемый алгоритм решения должен быть применим к широкому классу функций, характеризующих физические и термодинамические параметры задачи.

Физическая модель лазерной абляции

Одной из моделей, которыми с начала 1960-х годов описывались экспериментальные результаты квазистационарных режимов лазерного абляционного разрушения, является тепловая модель [3]. Эту же модель можно с успехом применять и к другим режимам лазерной абляции, проверив предварительно, следует ли динамика скорости лазерной абляции кинетике теплового испарения:

$$v = v_0 \exp(-T_a/T), \qquad (1)$$

где v_0 и T_a берутся из справочных данных. Область применения этой формулы определяется, в практически значимых случаях, неравенством $T_a \gg T$.

Если из эксперимента определить зависимости $T(t)$ и $v(t)$ и рассмотреть их в аррениусовских координатах,

$$\ln v = f(1/T),$$

то механизм лазерной абляции можно описать тепловой моделью, если полученная зависимость будет прямолинейной.

Однако непосредственное экспериментальное измерение $T(t)$ и $v(t)$ чрезвычайно сложно для короткоимпульсных лазеров. Как правило, экспериментаторы определяют зависимость $h = h(\Phi)$, толщины слоя удаленного за импульс материала h от дозы облучения Φ. Исходя из качественных соображений, для этой зависимости получены три характерных формы для трех характерных областей изменения Φ: абляции в допороговом приближении ($\Phi < \Phi_{\text{th}}$), абляции в пороговой области ($\Phi \sim \Phi_{\text{th}}$) и для развитой запороговой абляции ($2.5\Phi_{\text{th}} < \Phi < 5\Phi_{\text{th}}$) [3]. Для первой области получена аррениусовская форма:

$$h = C_1 \exp(-C_2/\Phi),$$

где C_1 и C_2 — константы.

Во второй области для коротких импульсов и больших коэффициентов поглощения излучения наблюдается линейная зависимость, следующая из баланса энергии:

$$h = \beta(\Phi - \Phi_{\text{th}}),$$

где $\beta \approx (1 - R)/L$, R — коэффициент отражения излучения, L — скрытая теплота испарения на единицу объема твердого тела.

В третьей области, учитывая экранировку испаряемой поверхности парогазовым облаком и считая, что в результате поглощения излучения до поверхности облучаемой мишени доходит доза облучения

$$\Phi_a = \Phi \exp(-\alpha_g h),$$

где α_g — нормированный эффективный коэффициент поглощения излучения в паре, предлагается логарифмическая зависимость

$$h = \ln(\Phi/\Phi_g)/\alpha_g,$$

где $\Phi_g = C_2/\ln(\alpha_g C_1)$.

К сожалению, когда речь идет о сути физических механизмов, ответственных за лазерное абляционное разрушение, зависимости интегральных кривых $h = h(\Phi)$, приведенные в публикациях, обзор которых представлен в [3], не достаточно информативны.

Для того чтобы сделать такие заключения более убедительными, всегда требуется дополнительная информация, например, из данных о составе и скоростях разлета продуктов лазерной абляции. Самыми информативными в этом случае будут данные об изменении со временем температуры поверхности подвергаемого абляции материала. Решению этой задачи и посвящена настоящая работа, которая является продолжением исследования вопросов динамики лазерного абляционного разрушения и прогнозирования оптической прочности материалов мишени и тонкослойных покрытий [4–7].

Уравнение теплопроводности в одномерном случае

Рассмотрим одномерную задачу лазерной абляции в нестационарном случае. Такой случай реализуется при воздействии на мишень коротких лазерных импульсов. Считаем, что плоский фронт абляции движется вдоль направления z со скоростью $v = v(t)$, которая в процессе лазерного воздействия быстро меняется. С этим фронтом абляции связываем подвижную систему координат. В этой системе координат уравнение теплопроводности имеет вид

$$\frac{\partial H}{\partial t} = v\,\frac{\partial H}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z}\left(\varkappa \frac{\partial T}{\partial z}\right) - \frac{\partial I}{\partial z}, \qquad (2)$$

где $H(T) = \int_{T_0}^{T} \rho(T_1)c(T_1)dT_1$ — энтальпия единицы объема твердого тела, $\rho(T)$ — плотность твердого тела, $c(T)$ — удельная теплоемкость твердого тела, $\varkappa(T)$ — коэффициент теплопроводности, T_0 — начальная температура. Правую часть уравнения (2) будем далее обозначать $B[T]$.

Временная форма лазерного импульса моделируется функцией

$$I(t) = I_0\,\frac{t}{t_1}\,\exp(-t/t_1),$$

при этом доза облучения связана с характерным временем t_1 формулой $\Phi = I_0 t_1$.

Пространственное распределение интенсивности поглощенного лазерного излучения внутри твердого тела моделируется уравнением

$$\partial I/\partial z = -\alpha I,$$

с граничным условием вида $I|_{z=0} = I_S$, где α — коэффициент поглощения, а I_S — поверхностная интенсивность поглощенного лазерного излучения, которая зависит от временно́й формы лазерного импульса $I = I(t)$, поверхностной температуры $T_S(t) = T(t)|_{z=0}$ и толщины испаренного слоя

$$h(t) = \int_0^t v(t_1)dt_1,$$

который уменьшает интенсивность поглощенного лазерного излучения:

$$I_S = I(t)A(T_S)\exp(-\alpha_g h),$$

где $A(T_S) = 1 - R(T_S)$ поглощательная способность, R — коэффициент отражения. Скорость фронта абляции моделируется формулой (1), в которой надо заменить T на T_S.

Все рассматриваемые параметры в этих уравнениях могут произвольным образом зависеть от температуры.

Выпишем начальные и граничные условия уравнения теплопроводности.

Первое граничное условие на фронте абляции связывает тепловой поток на границе фаз J_S с расходом энергии на испарение [3]:

$$\varkappa\,\frac{\partial T}{\partial z}\bigg|_{z=0} = v(L - H_S + H_S^{(v)}) \equiv -J_S,$$

где L — скрытая теплота испарения на единицу объема твердого тела, H_S — энтальпия единицы объема твердого тела на границе фаз, а величины с надстрочным индексом (v) относятся к соответственным характеристикам пара.

Второе граничное условие для температуры $T|_{z\to\infty} = T_0$ и начальное условие для температуры $T|_{t=0} = T_0$ являются очевидными.

Численное решение уравнения теплопроводности методом моментов

Вместо точного решения $H(z, t)$ подставим некоторое приближенное решение $H_p(z, t)$. Ввиду этого тождество (2) нарушится и в результате образуется остаточная функция $\mathrm{Res}[H_p]$:

$$\frac{\partial H_p}{\partial t} - B[T_p] \equiv \mathrm{Res}[H_p].$$

Эта функция, как и в [3], выбрана в виде

$$H_p(z, t) = \frac{1}{1-\alpha l}\left[\left(H_S - \frac{J_S l}{\chi_S}\right)e^{-\alpha z} - \left(\alpha l H_S - \frac{J_S l}{\chi_S}\right)e^{-\frac{z}{l}}\right],$$

что удовлетворяет граничным условиям при $z = 0$, $z = \infty$ и выполняет требование $H_p(z = 0, t) = H_S(t)$. Первое слагаемое здесь описывает изменение энтальпии, связанное с глубиной проникновения излучения, а второе описывает эффекты теплопроводности. Функция $l(t)$ представляет собой глубину прогрева или характерную тепловую длину, а $\chi_S = \chi(T_S)$, где $\chi = \varkappa/c\rho$ — коэффициент температуропроводности.

Соответственно методу моментов приближенное решение H_p будет таковым, если выполнены интегральные соотношения для моментов M_n:

$$\frac{dM_n}{dt} = \int\limits_0^\infty z^n B\big[T\big(H_p(z, t)\big)\big]dz = 0,$$

$$M_n = \int\limits_0^\infty z^n H_p(z, t)dz,$$

где $n = 0, 1, 2, \ldots$ (полное число этих уравнений должно равняться числу неизвестных функций, использованных для создания приближенного решения H_p). Уравнения минимизируют остаточную функцию $\mathrm{Res}[H_p]$ вдоль направлений z^n в функциональном пространстве, обращая в ноль проекции на эти направления.

В качестве двух зависящих от времени функций можно выбрать температуру поверхности $T_S(t)$ и пространственный масштаб распределения энтальпии $l(t)$ или толщину испаренного слоя $h(t)$. Для нас главное получить зависимость $T_S(t)$. В соответствии со сказанным были введены два момента распределения энтальпии:

$$M_0(t) = \int\limits_0^\infty H(z, t)dz, \quad M_1(t) = \int\limits_0^\infty zH(z, t)dz.$$

Проецируя уравнение теплопроводности на направления z_n, где $n = 0, 1$, получим систему уравнений

$$\frac{dM_0}{dt} = -vH_S + J_S + I_S = -v(L + H_S^{(v)}) + I_S,$$

$$\frac{dM_1}{dt} = -vM_0 + \int\limits_{T_\infty}^{T_S} \varkappa(T)dT + \alpha^{-1}I_S. \qquad (3)$$

Подставляя сюда наше приближение H_p, получим следующие выражения для моментов:

$$M_0 = (l + \alpha^{-1})H_S - \alpha^{-1}\frac{J_S l}{\chi_S},$$

$$M_1 = (l^2 + \alpha^{-1}l + \alpha^{-2})H_S - (l + \alpha^{-1})\alpha^{-1}\frac{J_S l}{\chi_S}. \qquad (4)$$

Подставляя уравнения (4) в (3) с учетом граничных условий, получим дифференциальные уравнения для функций $T_S(t)$ и $l(t)$. Вместе с уравнением (1) эти уравнения составляют систему однородных дифференциальных уравнений первого порядка вида

$$\begin{cases} m_{11}\dot{T}_S + m_{12}\dot{l} + m_{13}\dot{h} = n_1, \\ m_{21}\dot{T}_S + m_{22}\dot{l} + m_{23}\dot{h} = n_2, \\ m_{31}\dot{T}_S + m_{32}\dot{l} + m_{33}\dot{h} = n_3, \end{cases}$$

где коэффициенты m_{ij}, n_i не зависят явно от $\dot{T}$, $\dot{l}$, $\dot{h}$, или в матричном виде $MX = N$, где обозначены

$$M = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{pmatrix}, \quad X = \begin{pmatrix} \dot{T}_S \\ \dot{l} \\ \dot{h} \end{pmatrix}, \quad N = \begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{pmatrix}.$$

В зависимости от вида функций $c(t)$, $\varkappa(t)$ и $A(t)$ система может иметь и большее или меньшее число уравнений.

Приводя матрицу M к диагональному виду, получим систему трех дифференциальных уравнений для функций $T_S(t)$, $l(t)$ и $h(t)$:

$$\begin{cases} \dot{T}_S = f_1(T_S, l, h), \\ \dot{l} = f_2(T_S, l, h), \\ \dot{h} = f_3(T_S, l, h), \end{cases} \qquad (5)$$

которая численно интегрируется (с соответствующими начальными условиями). Данный алгоритм применим к уравнению теплопроводности при любых функциональных зависимостях входящих в это уравнение теплофизических параметров. Этот алгоритм распространяется на случай облучения системы нескольких плоскопараллельных сред.

Применимость тепловой модели к описанию лазерной абляции в микросекундном и наносекундном диапазонах длительностей лазерных импульсов подтверждена результатами работ [2,3,8,9]. Развитый авторами алгоритм на основе использованной физической модели тестировался для проверки адекватности и точности путем расчетов в созданной программе по данным, полученным авторами [3,10–12], и сравнения полученных результатов с результатами этих работ. В частности, были выполнены вычисления температуры поверхностей, характерные тепловые длины и глубины кратеров [3]; глубины кратеров [10]; глубины кратеров и скорости абляции [11] и температуры поверхности [12]. Тестирование показало хорошее совпадение наших результатов и данных, полученных другими авторами, в пределах погрешности 30%.

Рассмотрим для примера случай постоянных $\rho, c, \varkappa$ и A. Система (5) после алгебраических преобразований примет вид

$$\begin{cases} \dot{T}_S = f_1(T_S, l) = \frac{m_{22}n_1 - m_{12}n_2}{m_{11}m_{22} - m_{12}m_{21}}, \\ \dot{l} = f_2(T_S, l) = \frac{-m_{21}n_1 + m_{11}n_2}{m_{11}m_{22} - m_{12}m_{21}}, \end{cases} \tag{6}$$

где

$$m_{11} = l + \frac{1}{\alpha} - \frac{v_0 l L}{\alpha \varkappa} \frac{T_a}{T_S^2} \exp\left(-\frac{T_a}{T_S}\right),$$

$$m_{12} = T_S - T_0 - \frac{v_0 l L}{\alpha \varkappa} \exp\left(-\frac{T_a}{T_S}\right),$$

$$n_1 = v_0 \left(\frac{L}{c\rho} - T_S + T_0\right) \exp\left(-\frac{T_a}{T_S}\right) + \frac{I_S}{c\rho},$$

$$m_{21} = l^2 + \frac{l}{\alpha} + \frac{1}{\alpha^2} + \left(l + \frac{1}{\alpha}\right) \frac{v_0 l L}{\alpha \varkappa} \frac{T_a}{T_S^2} \exp\left(-\frac{T_a}{T_S}\right),$$

$$m_{22} = \left(2l + \frac{l}{\alpha}\right)(T_S - T_0) - \frac{2 v_0 l L}{\alpha \varkappa} \exp\left(-\frac{T_a}{T_S}\right) - \frac{v_0 l L}{\alpha^2 \varkappa} \exp\left(-\frac{T_a}{T_S}\right),$$

$$n_2 = \frac{\varkappa}{c\rho}(T_S - T_0) + \frac{I_S}{\alpha c \rho} - \left(l + \frac{1}{\alpha}\right)(T_S - T_0) \times v_0 \exp\left(-\frac{T_a}{T_S}\right) + \frac{v_0^2 l L}{\alpha^2 \varkappa} \exp\left(-2\frac{T_a}{T_S}\right).$$

Рассмотрим допороговое приближение этой системы уравнений, полагая $l \ll 1$ и $T_a \gg T_S$. При этих допущениях система уравнений (6) примет вид

$$\begin{cases} \dot{T}_S = \frac{J_S \alpha}{c\rho} - \frac{1}{2}\frac{\alpha \varkappa}{l c \rho}(T_S - T_0), \\ \dot{l} = \frac{1}{2}\frac{\varkappa}{c\rho}\left(\alpha + \frac{1}{l}\right). \end{cases} \tag{7}$$

Результаты компьютерного моделирования

$\Phi, \mathrm{J \cdot cm^{-2}}$		0.1	1	10
T, K	10 ns	0.5	1.25	3.5
	150 μs	27.5	87.5	280
l, cm	10 ns	$1 \cdot 10^{-5}$	$0.8 \cdot 10^{-5}$	$0.65 \cdot 10^{-5}$
	150 μs	0.05	0.05	0.05

Результаты компьютерного моделирования

Численное решение системы (7) проводилось с помощью соответственного математического программного обеспечения — пакета прикладных программ MATLAB. Для расчетов была создана программа Heat_mom. Приведем здесь результаты расчетов для некоторых значений параметров: $\alpha = 4.25 \cdot 10^5\,\mathrm{cm^{-1}}$, $T_0 = 300\,\mathrm{K}$, $\chi = 1.55 \cdot 10^{-3}\,\mathrm{W\,cm^{-1} \cdot K^{-1}}$, $L = 710\,\mathrm{J\,cm^{-3}}$, $T_a = 15700\,\mathrm{K}$, $c = 0.96\,\mathrm{J\,g^{-1} \cdot K^{-1}}$, $\rho = 1.42\,\mathrm{g\,cm^{-3}}$, I_s варьировался (здесь поток излучения Φ и характерное время t_1 связаны соотношением $\Phi = I_0 t_1$), $v_0 = 3 \cdot 10^6\,\mathrm{cm \cdot s^{-1}}$.

В экспериментах использовались импульсы лазерного излучения длительностью 20 ns и 300 μs. При этом значения пороговых величин потоков излучения для наносекундных импульсов находились в диапазоне 20–50 и 150–300 $\mathrm{J\,cm^{-2}}$.

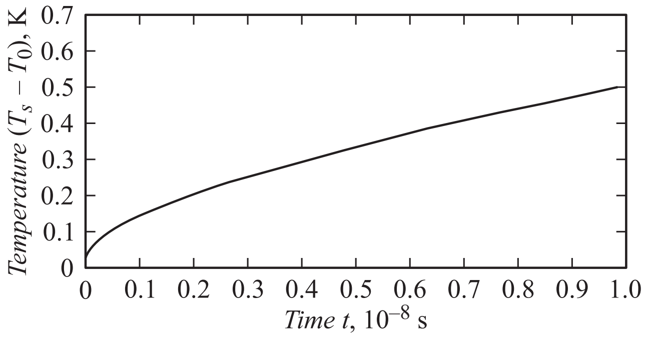

Рис. 1. Изменение температуры поверхности при облучении наносекундным импульсом с потоком $\Phi = 0.1\,\mathrm{J \cdot cm^{-2}}$.

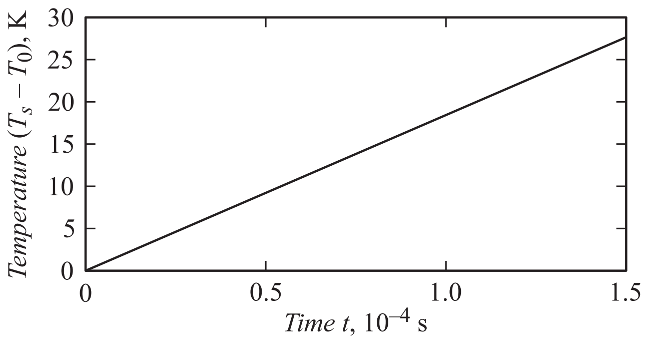

Рис. 2. Изменение температуры поверхности при облучении микросекундным импульсом с потоком $\Phi = 0.1\,\mathrm{J \cdot cm^{-2}}$.

Приведем данные по температуре поверхности для импульса наносекундного диапазона с потоком излучения $\Phi = 0.1;\ 1;\ 10\,\mathrm{J\,cm^{-2}}$ и характерным временем $t_1 = 10\,\mathrm{ns}$ и для импульса микросекундного диапазона с потоком излучения $\Phi = 0.1,\ 1,\ 10,\ 20,\ 50,\ 100\,\mathrm{J\,cm^{-2}}$ и характерным временем $t_1 = 150\,\mu\mathrm{s}$ (рис. 1 и 2 и таблица). В тексте и на графиках фигурирует не температура поверхности T_S, а ее отклонение от начальной температуры T_0. То есть $T = T_S - T_0$.

Для большей наглядности покажем все графики для разности температур $T = T_S - T_0$ для микросекундного импульса на рис. 3 и для характерной длины области прогрева на рис. 4. Можно отметить, что для наносекундного импульса наблюдается уменьшение тепловой длины с увеличением плотности излучения. При этом для микросекундного импульса к моменту примерно $100\,\mu\mathrm{s}$ от начала облучения тепловая длина достигает предельного значения, которое не зависит от плотности падающего излучения.

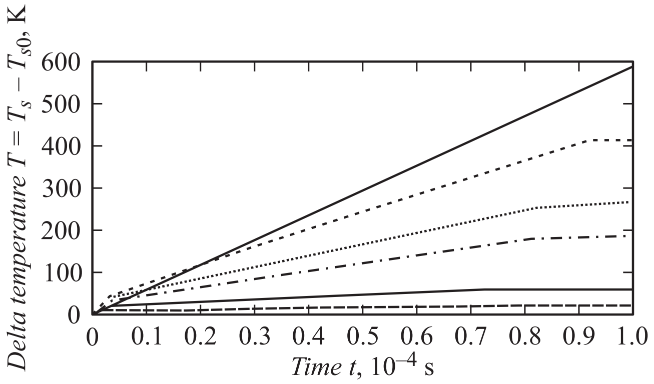

Рис. 3. Температура поверхности при разных плотностях излучения в течение первых $100\,\mu\mathrm{s}$ для допорогового приближения. Сверху вниз: сплошная, штриховая, пунктирная, штрихпунктирная, сплошная и штриховая линии соответствуют значениям плотности излучения $\Phi = 100,\ 50,\ 20,\ 10,\ 1,\ 0.1\,\mathrm{J\cdot cm^{-2}}$ соответственно.

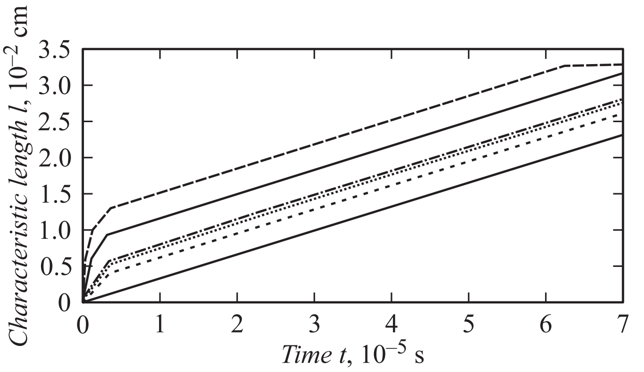

Рис. 4. Характерная длина области прогрева при разных плотностях излучения в течение первых $70\,\mu\mathrm{s}$ для допорогового приближения. Сверху вниз: штриховая, сплошная, штрихпунктирная, пунктирная, штриховая и сплошная линии соответствуют значениям плотности излучения $\Phi = 100,\ 50,\ 20,\ 10,\ 1,\ 0.1\,\mathrm{J\cdot cm^{-2}}$ соответственно.

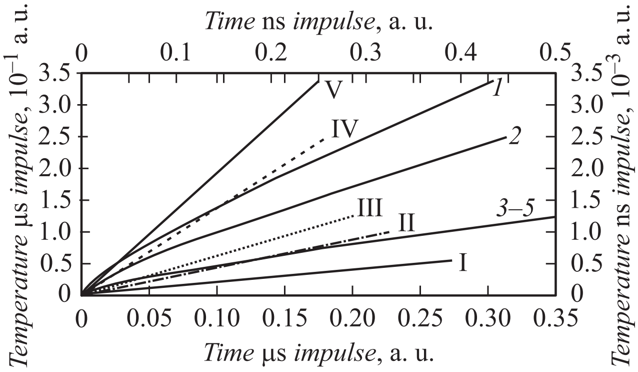

Рис. 5. Нормированная температура поверхности в относительных единицах времени при разных значениях плотности излучения $\Phi_{1-5} = 0.1,\ 0.5,\ 1,\ 5,\ 10\,\mathrm{J\cdot cm^{-2}}$.

На рис. 5 показаны графики нормированной на начальную температуру поверхности разности температур T/T_0 в зависимости от относительного времени t/t_{imp} для пяти разных значений плотности излучения Φ_{1-5}. Для микросекундного диапазона соответствующие графики обозначены римскими цифрами от I до V, для наносекундного — арабскими от *1* до *5*. Вычисления проводились при значениях, указанных выше в тексте, с несколько иными значениями начальных данных в Heat_mom_ArbUnit_1_approximation, созданной специально для этой задачи программе.

Заключение

Разработанный алгоритм решения и созданное программное обеспечение позволили проанализировать динамику ряда параметров лазерного абляционного разрушения: температуры поверхности, тепловой длины, толщины аблированного слоя, скорости абляции.

При решении нестационарной задачи теплопроводности для одномерного случая численным методом с помощью метода моментов, в приведенном алгоритме можно учитывать имеющиеся отличия и проводить вычисления по созданной компьютерной программе для величин, которые могут зависеть и от времени, и от координаты произвольным образом.

Список литературы

[1] *Волков Н.Б., Майер А.Е., Яловец А.П.* // ЖТФ. 2003. Т. 73. Вып. 3. С. 1–9.
[2] *Морозов Н.Ф., Старцев Ю.К., Судьенков Ю.В., Сусликов А.А., Баранов Г.А., Беляев А.А.* // ЖТФ. 2006. Т. 76. Вып. 7. С. 53–58.
[3] *Анисимов С.И., Лукьянчук Б.С.* // УФН. 2002. Т. 172. Вып. 3. С. 301–333.
[4] *Atkarskaya A.B., Mkrtychev O.V., Privalov V.E., Shemanin V.G.* // Opt. Mem. Neural Netw. 2014. Vol. 23. N 4. P. 265–270.

[5] *Мкртычев О.В., Аткарская А.Б., Шеманин В.Г.* // Известия вузов. Физика. 2012. Т. 8. Вып. 2. С. 238–239.
[6] *Мкртычев О.В., Привалов В.Е., Фотиади А.Э., Шеманин В.Г.* // Научно-технические ведомости СПб. гос. политех. ун-та. Физико-математические науки. 2015. Т. 213. Вып. 1. С. 128–135.
[7] *Shemanin V.G., Mkrtychev O.V.* // J. Phys. Conf. Ser. 2015. Vol. 653. P. 012012.
[8] *Маненков А.А., Прохоров А.М.* // УФН. 1986. Т. 148. Вып. 1. С. 179–211.
[9] *Климентов С.М., Кононенко Т.В., Пивоваров П.А., Гарнов С.В., Конов В.И., Прохоров А.М., Брайтлинг Д., Даусинер Ф.* // Квант. электрон. 2001. Т. 31. Вып. 5. С. 378–383.
[10] *Гуськов К.С., Гуськов С.Ю.* // Квант. электрон. 2001. Т. 31. Вып. 4. С. 305–310.
[11] *Булгаков А.В., Булгакова Н.М.* // Квант. электрон. 1999. Т. 27. Вып. 2. С. 53–58.
[12] *Gao X., Feng G., Han J., Zhai L.* // Opt. Express. 2012. Vol. 20. N 20. P. 22095–22101.